

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ**

**НАУЧНЫЕ РАБОТЫ
УЧАСТНИКОВ КОНКУРСА
«МОЛОДЫЕ УЧЕНЫЕ НИУ ИТМО»
2012 ГОДА**



Санкт-Петербург

2013

**Научные работы участников конкурса «Молодые ученые НИУ ИТМО»
2012 года. – СПб: НИУ ИТМО, 2013. – 306 с.**

Издание содержит результаты научных работ молодых ученых, которые приняли участие в конкурсе «Молодые ученые НИУ ИТМО» в 2012 году.

ISBN 978-5-7577-0426-5



В 2009 году Университет стал победителем многоэтапного конкурса, в результате которого определены 12 ведущих университетов России, которым присвоена категория «Национальный исследовательский университет». Министерством образования и науки Российской Федерации была утверждена программа его развития на 2009–2018 годы. В 2011 году Университет получил наименование «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

© Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, 2013

© Авторы, 2013

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ СИНТЕЗ АЛГОРИТМА УПРАВЛЕНИЯ ПРЕЦИЗИОННОГО СЛЕДЯЩЕГО ЭЛЕКТРОПРИВОДА С УПРУГОЙ СВЯЗЬЮ

А.А. Абдуллин

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.Н. Дроздов

Ключевые слова: метод пространства состояний, грубое управление вынужденным движением, двухмассовый механизм, робастность, наблюдатель.

Введение

К настоящему времени достигнуты исключительно высокие успехи в разработке аппаратного обеспечения прецизионного электропривода. В связи с этим существенно возрастают требования к алгоритмам регуляторов, гарантирующим как можно более полное раскрытие возможностей современной аппаратуры. В соответствии с этим ведутся непрерывные поиски по совершенствованию структуры и методов синтеза систем управления прецизионным электроприводом. Перспективным в этом плане является метод пространства состояний, широко используемый в настоящее время в теории управления.

В 80-х годах прошлого столетия начинались исследования по применению метода пространства состояний в теории электропривода, например, под руководством профессора Ю.А. Борцова в ЛЭТИ. Но они не получили должного развития. Частичным объяснением этого может служить недостаточное развитие программных средств, позволяющих реализовывать с приемлемой точностью и скоростью сложные вычислительные процедуры, присущие методу пространства состояний.

С тех пор на рынке появились мощные математические пакеты, во многом снимающие вычислительные проблемы, связанные с методом пространства состояний. Среди современных математических пакетов особо следует выделить MATLAB. Он в наибольшей степени ориентирован на выполнение процедур синтеза алгоритмов управления и последующую проверку свойств спроектированной системы благодаря развитым средствам моделирования динамических систем.

На основании сказанного вполне оправдан интерес к применению метода пространства состояний для проектирования систем управления прецизионным электроприводом именно на настоящем этапе.

Постановка задачи

Метод пространства состояний предполагает следующую постановку задачи. Исходными данными для проектирования системы управления являются математическая модель объекта управления (ОУ), модели внешних воздействий, критерий качества, описывающий желаемые свойства проектируемой системы. Необходимо спроектировать алгоритм регулятора, оптимизирующий заданный критерий качества. Эту задачу рассмотрим на примере синтеза алгоритма управления азимутальной осью опорно-поворотного устройства наземного телескопа.

Объект управления

С максимальной ответственностью необходимо относиться к составлению модели ОУ. В принципе не существует модели, полностью адекватной любому физическому объекту. Исходя из этого, прежде всего, необходимо выбрать такую расчетную схему

(динамическую модель), которая в максимальной степени отражает существенные особенности типовых режимов функционирования ОУ. Это сложная и до сих пор слабо формализованная задача.

В работах [1–5] показано, что наиболее полно отражает работу азимутальной оси модель электромеханической системы (ЭМС), которая функционально содержит три основных узла: механизм (Мх), представленный двухмассовой расчетной схемой; электромеханический преобразователь энергии (ЭМП или электрическая машина); управляемый преобразователь (УП) электрической энергии. Структурная схема такой системы представлена на рис. 1.

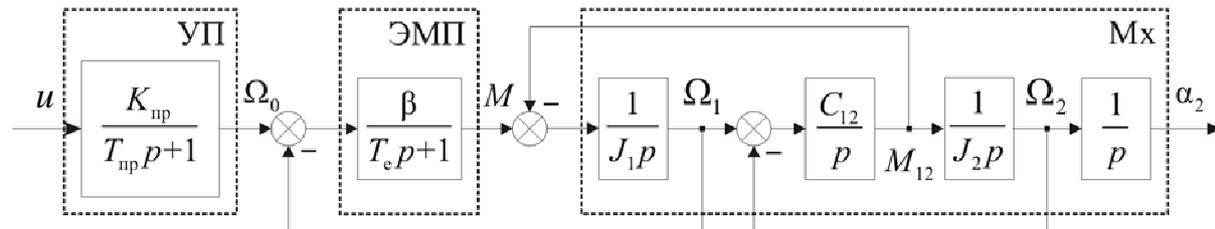


Рис. 1. Структурная схема ЭМС: $J_1=6600 \text{ кг}\cdot\text{м}^2$ – момент инерции первой массы; $J_2=197300 \text{ кг}\cdot\text{м}^2$ – момент инерции второй массы; $C_{12}=8,62\cdot 10^8 \text{ Н}\cdot\text{м}/\text{рад}$ – коэффициент упругости; $\beta=2,9\cdot 10^4 \text{ Н}\cdot\text{м}\cdot\text{с}/\text{рад}$ – жесткость механической характеристики ЭМП; $T_e=1,6\cdot 10^4 \text{ с}$ – электрическая постоянная времени фазной обмотки ЭМП; $K_{пр}=0,026 \text{ рад}/\text{Вс}$ – пропорциональный коэффициент УП; $T_{пр}=2\cdot 10^4 \text{ с}$ – постоянная времени УП

Синтез алгоритма управления

Следящие электроприводы осей, как правило, строятся по структуре с подчиненным регулированием параметров. В системе управления с такой структурой существует проблема возникновения автоколебаний, связанных с наличием нагрузки типа «сухое трение» и определяющих нижнюю границу диапазона скоростей плавного слежения.

Снижение нижней границы диапазона скоростей плавного слежения возможно при расширении полосы пропускания системы за счет введения дополнительных обратных связей по скорости и углу поворота второй массы [6]. Для рассматриваемого объекта удалось расширить полосу пропускания в четыре раза и пропорционально снизить границу диапазона скоростей плавного слежения до значения $0,375 \text{ }^\circ/\text{с}$.

Помимо возникновения автоколебаний в системе подчиненного регулирования параметров используется искусственное введение нулей в передаточную функцию регулятора для сокращения больших постоянных времени ОУ, что может привести к потере управляемости и наблюдаемости [7, 8]. По этой причине целесообразно исследовать другие подходы к синтезу регуляторов.

В работе [9] было показано, что применение принципа грубого управления вынужденным движением позволило значительно снизить нижнюю границу диапазона скоростей плавного слежения, при этом получены лучшие качественные показатели по отношению к подчиненной системе регулирования.

Далеко не простой проблемой является формулирование показателей качества проектируемой системы. Наиболее распространенными здесь являются требования быстродействия, нормы установившейся ошибки. Этой проблеме необходимо уделять постоянное внимание, формальные, математические критерии качества должны адекватно отражать требования по потребительским свойствам проектируемой системы. При этом математические модели физических объектов, естественно, отличаются от идеальных моделей, используемых в качестве исходных данных для синтеза регулятора. Возникает вопрос о сохранении некоторых желаемых свойств и,

прежде всего, свойства устойчивости при вариациях модели ОУ в системе с рассчитанным регулятором [10]. В работе [11] рассматриваются численные методы анализа робастности свойства устойчивости линейной неадаптивной системы управления электропривода при заданных количественных оценках вариаций модели объекта. Предложенный в работе метод анализа робастности гарантирует работоспособность реальной системы. Также было показано, что при малых значениях постоянной времени электрического преобразователя и электрической постоянной времени двигателя, структурная схема, представленная на рис. 1, упрощается и принимает вид рис. 2.

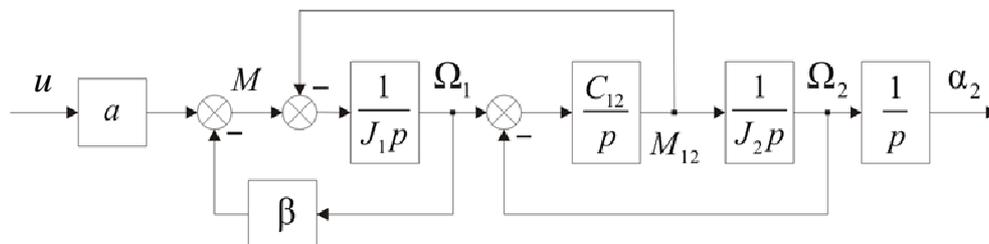


Рис. 2. Структурная схема упрощенной ЭМС

Здесь $a = K_{пр} \cdot \beta \approx 750 \text{ Н} \cdot \text{м}/\text{В}$.

Адекватное описание внешних воздействий на ОУ в процессе синтеза алгоритма управления в значительной степени определяет успех функционирования системы в реальных условиях. Внешние воздействия в современной теории управления принято рассматривать как выходы фиктивных, а в системах программного слежения и реальных, генераторов командного сигнала. Исходные данные для проектирования таких генераторов обычно оговариваются в задании на проектирование системы. Это особенно важно, если измерению доступны не все координаты ОУ, как например, скорость второй массы. В этом случае требуется использование наблюдателей для оценки неизмеряемых координат. Однако при наличии момента сухого трения в системе с использованием наблюдателя возникает ошибка по оценке скорости [6]. Система, замкнутая по оцениваемой скорости теряет устойчивость.

Заключение

Синтез алгоритма управления, основанный на теории пространства состояния, позволяет получить высокие показатели качества и имеет хорошее вычислительное обеспечение в виде современных математических пакетов. Процедура синтеза для конкретного типа объектов управления легко оформляется в программу с переменными входными данными в виде параметров моделей объекта, внешнего воздействия и численных значений показателей качества проектируемой системы. Выполнение такой программы не занимает много времени. В принципе, такая программа может выполняться в процессе нормального функционирования объекта по результатам идентификации объекта в реальном времени.

Перспективы

Дальнейшие направления исследований – это, прежде всего, совершенствование методов построения математических моделей объектов, адекватно отражающих существенные особенности функционирования объектов.

Требуются тщательные исследования по методам идентификации объектов, причем не только по физическим моделям объектов, но и по результатам экспериментальных исследований опытных образцов, а также по результатам полевых

испытаний. Перспективным является разработка удаленных методов идентификации объектов.

Литература

1. Васильев В.Н., Томасов В.С., Шаргородский В.А., Садовников М.А. Состояние и перспективы развития прецизионных электроприводов комплексов высокоточных наблюдений // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 3. – С. 5–12.
2. Томасов В.С., Денисов К.М., Толмачев В.А. Следящие электроприводы систем наведения оптико-механических комплексов нового поколения. Проблемы и достижения // Труды V междунар. (XVI Всеросс.) конф. по автоматизированному электроприводу. АЭП-2007. 18–21 сентября 2007. – СПб, 2007. – С. 175–177.
3. Сеницын В.А., Томасов В.С. Энергоподсистемы следящих электроприводов измерительных телескопов // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 3. – С. 12–17.
4. Толмачев В.А., Антипова И.В., Фомин С.Г. Математическая модель следящего электропривода оси опорно-поворотного устройства // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2007. – № 10 (44). – С. 142–146.
5. Толмачев В.А. Синтез следящего электропривода оси опорно-поворотного устройства // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 3. – С. 68–72.
6. Абдуллин А.А., Толмачев В.А. Система управления следящего электропривода с нежесткой исполнительной осью // Научно-технический вестник ИТМО. – № 1 (77). – 2012. – С. 41–46.
7. Первозванский А.А. Курс теории автоматического управления: Учебное пособие. – М.: Наука, 1986. – 616 с.
8. Ту Ю. Современная теория управления. – М.: Машиностроение, 1971. – 472 с.
9. Абдуллин А.А., Дроздов В.Н. Синтез алгоритма управления прецизионного следящего электропривода // Труды VII международной (VIII всероссийской) конференции по автоматизированному электроприводу АЭП-2012. – С. 208–212.
10. Красовский Н.Н. Некоторые задачи теории устойчивости движения. – М.: Физматгиз, 1959. – 211 с.
11. Абдуллин А.А., Толмачев В.А. Система управления следящего электропривода с нежесткой исполнительной осью // Научно-технический вестник ИТМО. – 2012. – № 1 (77). – С. 41–46.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МИКРОГЕОМЕТРИИ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ДЕТАЛЕЙ ПРИБОРОВ

Ю.С. Андреев

Рассмотрен новый метод изучения влияния микрогеометрии поверхностей деталей на их функциональные свойства, основанный на использовании непараметрического подхода к описанию и контролю шероховатости поверхности.

Ключевые слова: микрогеометрия, шероховатость поверхности, непараметрические критерии оценки и контроля, функциональные свойства.

Введение

В приборо- и машиностроении качество продукции всегда было наиболее актуальным вопросом в виду роли изделий этих отраслей в народном хозяйстве любой страны. Качество и, в первую очередь, надежность изделий, в основном, обусловлены безотказностью работы их подвижных сочленений, а она, в свою очередь, определяется точностью размеров, формы и взаимного расположения сопрягаемых поверхностей деталей, а также состоянием их поверхностного слоя. Именно решение проблем, связанных с состоянием поверхностного слоя, является одним из средств повышения качества выпускаемой продукции, а, как известно, в условиях конкурентной рыночной экономики качество продукции играет важную роль. Доказано, что на два десятка функциональных свойств поверхности, таких как износостойкость, коррозионная стойкость, отражаемость световых лучей, теплопроводность, электропроводность, контактная жесткость, и др., существенно влияет ее микрогеометрия, поэтому одной из основных задач является обеспечение оптимальной микрогеометрии поверхностей для их конкретных функциональных свойств в определенных условиях эксплуатации [1].

Современное приборо- и машиностроение характеризуется сложными условиями эксплуатации, связанными с высоким уровнем действующих напряжений, вибраций, широким температурным интервалом, агрессивными средами и т.п. В связи с этим необходимо соблюдение особых требований к качеству поверхностей для обеспечения надежности и долговечности деталей. Естественно, что именно на создание оптимального микрорельефа поверхностей деталей, практически пока случайного способа повышения их качества, и делают ставку ведущие приборостроительные и машиностроительные корпорации мира.

Очевидно, что для поиска рациональной шероховатости необходимо иметь критерии, описывающие ее достаточно точно, что создаст предпосылки для более точных оценок и прогнозов относительно будущей эксплуатации изделий. Традиционно отечественные и зарубежные исследования шероховатости проводятся с использованием параметрического описания профиля. В настоящее время наиболее часто используемый критерий Ra был бы достаточным для полного описания геометрии профиля, если бы по нему можно было вычислить форму функции распределения ординат профиля, распределения выступов, средний наклон профиля, средний радиус заострения и т.д. Однако этого невозможно сделать. В рамках параметрического подхода технологическое обеспечение функционального свойства поверхности сводится к достижению значения параметра шероховатости, указанного на чертеже. А это фактически означает невозможность оптимизации микрорельефа для конкретного функционального свойства поверхности, так как для полного описания профиля требуется от 3 до 25 параметров. Ситуация усугубляется еще и тем, что даже совокупность всех стандартных параметров не отражает действительный характер

рельефа. Подтверждается это простым примером: два зеркальных профиля имеют одинаковый набор стандартных параметров, и, безусловно, разные свойства (рис. 1).

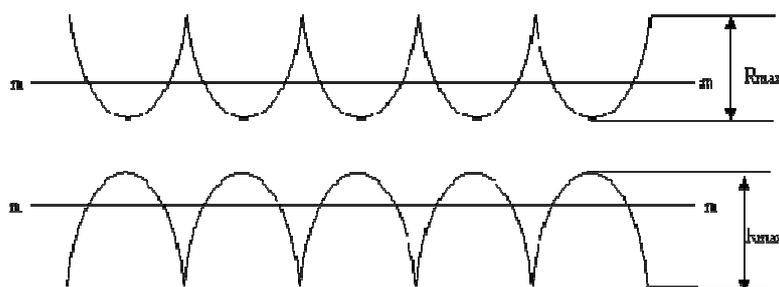


Рис. 1. Два зеркально противоположных профиля поверхностей

Возникла необходимость в создании нового метода описания микрогеометрии функциональных поверхностей. В работах профессора В.А. Валетова [2–4] обоснованы недостатки использования параметрических критериев в процессе оптимизации микрогеометрии поверхностей для их конкретных функциональных свойств и предложены непараметрические критерии оценки и контроля шероховатости.

Успешная реализация оптимизационных задач тесно связана с научным изучением процессов, приводящих к изменению поверхностного слоя функциональных поверхностей. Практическая реализация таких исследований позволит вывести процесс оптимизации микрогеометрии поверхностей на качественно новый уровень, повысив тем самым качество производимых изделий.

Методика определения влияния микрогеометрии на функциональные свойства деталей приборов

Основной целью данной методики является поиск рациональной микрогеометрии функциональных поверхностей, свойства которых зависят от нее. В качестве критериев оценки используются графические изображения функций плотности распределения ординат или углов наклона профилей, а еще лучше – образы самих профилей или микро топографий поверхностей. Главное достоинство данных критериев – в их информативности. Любой стандартный параметр шероховатости содержит недостаточное количество информации для полного описания микрогеометрии, и, будучи реализованным, практически никак не предопределяет структуру микрорельефа. Так, для заданного на чертеже параметра можно получить бесчисленное множество разных микрорельефов поверхности, свойства которых будут разными и чаще всего совсем не такими, как ожидалось.

Известно, что функция плотности распределения ординат или тангенсов углов наклона профиля содержит не менее 95% информации о профиле, т.е. каждой заданной функции соответствует практически только один микрорельеф. Возможное рассеяние микрорельефов для одной заданной функции пренебрежимо мало и не может привести к большому отклонению ожидаемого функционального свойства.

Исследование влияния исходной микрогеометрии на конкретное функциональное свойство поверхности проходит в два этапа. На первом этапе изготавливаются три одинаковых образца, отличающиеся только исходной шероховатостью функциональной поверхности, причем один образец изготавливается с максимально чистой поверхностью (низкой шероховатостью), один – с максимально грубой (высокой шероховатостью) и третий – с промежуточным значением шероховатости поверхности между чистой и грубой. После этого образцы подвергаются испытаниям на конкретное функциональное свойство. По результатам испытания будет очевидно

наличие или отсутствие влияния исходной шероховатости на конкретное функциональное свойство. В первом случае исследование переходит на второй этап, а во втором случае признается, что микрогеометрия поверхности не влияет на изменение данного функционального свойства.

Для проведения исследования на втором этапе изготавливается максимально возможное количество испытуемых образцов, отличающихся только исходным микрорельефом. Это практически означает, что изготавливаются образцы одинаковых размеров и формы, желательно стандартных, из одной и той же партии конструкционного материала, обладающего практически одинаковыми химическими, физическими, механическими и технологическими свойствами. Для создания разного исходного микрорельефа на каждом образце используются разные, из доступных, методы и режимы обработки на конкретном предприятии. Для исключения влияния побочных факторов, например, влияния разной степени наклепа, все образцы после создания на них разного исходного микрорельефа целесообразно подвергнуть термообработке для снятия остаточных напряжений. Для повышения достоверности эксперимента для каждого варианта исходного микрорельефа целесообразно изготовить несколько одинаковых образцов. С помощью профилометра с функциональных поверхностей каждого образца фиксируются профили равной длины. В результате статистической обработки данных о профиле получаем графические изображения опорных кривых, плотностей распределения ординат и тангенсов углов наклона профиля и микро топографию поверхности. Благодаря применению современных приборов вся эта процедура длится несколько секунд, а ее результаты, виды и режимы изготовления образцов – сохраняются на жестком диске.

Все изготовленные вышеуказанным способом образцы подвергаются одинаковому функциональному воздействию, с контролем величины характеристик этого функционального свойства. По результатам исследования определяется образец с лучшим уровнем рассматриваемого функционального свойства. Графическое изображение кривой Аббота, или плотности распределения соответствующей функции, либо сам профиль поверхности образца, у которого зафиксирован лучший результат, принимается в качестве эталона (рис. 2), а технология изготовления этого образца нормируется в технологическом процессе изготовления детали на производстве.

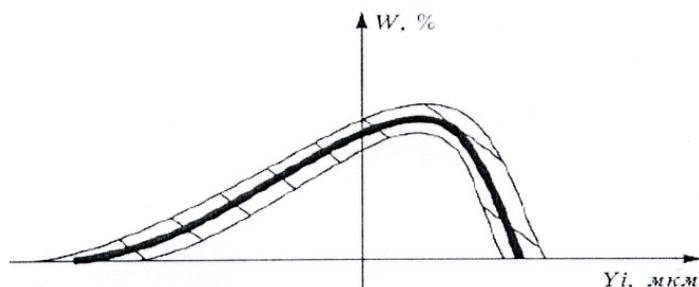


Рис. 2. Плотность распределения ординат профиля оптимальной микрогеометрии поверхности: Y_i – величина i -ой ординаты профиля; W – вероятность появления данной ординаты

При контроле конкретной поверхности можно наложить шаблон, изображенный на прозрачном материале (например, оргстекле) или на дисплее, на графическое изображение функции контролируемой поверхности. Если изображение функции контролируемой поверхности оказывается в пределах допуска на шаблон, то ее функциональное качество, зависящее от микрогеометрии, гарантировано. При выходе непараметрического критерия контролируемой микрогеометрии за пределы допуска изделие следует браковать по требованиям к шероховатости поверхности. Для неотчетливых изделий целесообразно использовать менее информативные, но более простые в графическом изображении, опорные кривые профиля (кривые Аббота) или

функции распределения ординат и углов наклона профиля. Для изделий с жесткими эксплуатационными характеристиками, существенно зависящими от микрогеометрии функциональных поверхностей, в качестве непараметрических критериев следует использовать графики функций плотности распределения ординат или углов наклона профиля, а еще лучше – графические изображения самого профиля или микро топографии поверхности. В последнем случае возвращаемся к эталонам шероховатости, но процесс сравнения с эталоном поручаем не человеческому глазу, а компьютеру, что весьма существенно, так как исключает субъективизм в оценке. При использовании любых графических изображений в качестве непараметрических критериев оценки и контроля микрогеометрии не существует технических трудностей для автоматизации процесса контроля. Таким образом, практическое применение предлагаемого метода такое же простое, как использование предельных калибров при контроле размеров деталей.

При изготовлении образцов для испытаний виды и режимы их обработки должны быть зафиксированы. Определив в результате эксперимента наилучший из возможных микрорельефов для данного функционального свойства поверхности, автоматически получаем и технологические методы его воспроизведения. База данных по установлению рациональной микрогеометрии и технологических методов ее обеспечения со временем может настолько наполниться, что не потребуются проведение специальных экспериментов, а можно будет воспользоваться уже имеющимися в базе данных сведениями. Однако следует отметить, что вид рациональной микрогеометрии напрямую зависит от метода ее получения. Следовательно, найденная на одном предприятии микрогеометрия, отвечающая наилучшим требованиям по заданному функциональному свойству, не во всех случаях сможет быть воспроизведена на других производствах. Это связано с тем, что каждое предприятие имеет различный парк оборудования и методы обработки. В таких случаях необходимо будет проводить испытания для каждого конкретного предприятия.

Для нормирования рациональной микрогеометрии необходимо каждому такому функциональному свойству присвоить постоянный номер. Этот номер следует проставлять на знаке шероховатости, форма которого не имеет принципиального значения. Таким образом, вместо нормирования не отражающих функциональных свойств поверхностей параметров следует нормировать конкретное функциональное свойство поверхности.

Заключение

Предложенная методика определения влияния микрогеометрии на функциональные свойства деталей приборов и машин, основанная на непараметрическом описании геометрии профиля поверхностей, позволяет не только обнаружить влияние микрогеометрии поверхности на функциональные свойства поверхности, но и обеспечить поиск рациональной микрогеометрии – наилучшей из возможных, в заданных условиях производства. Используя данную методику, были проведены исследования изменения микрогеометрии поверхностей трения [5, 6]. Сделан вывод об отсутствии «равновесной шероховатости», что поставило под сомнение теории, базирующиеся на данном понятии. Рассмотрено влияние микрогеометрии поверхности на адгезионные свойства поверхности и способность ее к удержанию смазки [7]. Целью дальнейших исследований является определение влияния микрогеометрии на другие функциональные свойства деталей приборов. Кроме того, в процессе предлагаемых исследований будет создаваться и накапливаться база данных о технологической управляемости непараметрических критериев, которая обеспечит получение нужной микрогеометрии для любого функционального свойства

поверхностей. В будущем это даст возможность коренным образом пересмотреть существующую систему нормативной документации в области описания, технологического обеспечения и контроля микрогеометрии. Установив оптимальную микрогеометрию функциональных поверхностей, станет возможным улучшить качество изделий в целом, возможно, без дополнительных затрат.

Литература

1. Шнейдер Ю.Г. Эксплуатационные свойства деталей с регулярным микрорельефом. – СПб: СПб ГУИТМО (ТУ), 2001. – 264 с.
2. Валетов В.А. О практической пригодности некоторых критериев для оценки шероховатости поверхности // Технология корпусостроения, судового машиностроения и сварки в судостроении. – Л.: ЛКИ, 1978. – С. 62–65.
3. Андреев Ю.С., Валетов В.А. Анализ параметрических методов описания шероховатости поверхности // Фундаментальные и прикладные проблемы техники и технологии. – Орел. – 2011. – № 6. – С. 43–51.
4. Мусалимов В.М., Валетов В.А. Динамика фрикционного взаимодействия. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2006. – 191 с.
5. Андреев Ю.С., Валетов В.А. Определение оптимальной микрогеометрии поверхностей пар трения скольжения на стадии приработки // Десятая сессия международной научной школы «Фундаментальные и прикладные проблемы надежности и диагностики машин и механизмов». Сб. трудов. – СПб: ИПМАШ РАН, 2011. – С. 160–167.
6. Андреев Ю.С., Медунецкий В.В. Исследование изменения микрорельефа поверхностей в процессе их трения скольжения // Изв. вузов. Приборостроение. – Т. 55. – № 9. – СПб: НИУ ИТМО. – 2012. – С. 30–34.
7. Андреев Ю.С. Разработка технологических методов оптимизации микрогеометрии функциональных поверхностей деталей приборов: Автореф. дис. канд. техн. наук. – СПб: НИУ ИТМО. – 2012. – 24 с.

УДК 004.934

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИСТЕМЫ РАСПОЗНАВАНИЯ РЕЧИ ПРИ АНАЛИЗЕ РАБОТЫ ТЕЛЕФОННОЙ СЛУЖБЫ ПОДДЕРЖКИ

П.В. Балакшин, Е.А. Садовников

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.Ю. Тропченко

Кратко описаны проблемы телефонных служб поддержки клиентов (call-центров) крупных компаний. Определены преимущества и недостатки применения систем распознавания речи в работе таких центров. На примере показаны преимущества использования предлагаемой модели.

Ключевые слова: распознавание речи, телефонная служба поддержки, call-центр, перплексия.

Введение

Исследования в области распознавания речи стали производиться с момента появления первых компьютеров, поскольку текстовый командный интерфейс взаимодействия с ЭВМ не обладал приемлемой скоростью и естественностью работы. Более того, ученые продолжают искать новые параметры исходных данных, новые методы, всевозможные ограничения и объединения, позволяющие повысить точность и другие показатели распознавания речи. Действительно, ведь речь – это наиболее

натуральная, удобная, эффективная и экономичная форма человеческого взаимодействия.

Актуальность данных исследований подтверждается большим количеством международных научно-технических конференций (Диалог, SpeCom, Interspeech), крупными программно-техническими разработками (например, Dragon Naturally Speaking, встроенное речевое управление в операционную систему Vista).

Несколько лет назад автоматическое распознавание речи нашло применение в достаточно новой для России области: в работе колл-центров (call center) – телефонных служб поддержки клиентов. В настоящее время ряд колл-центров всерьез рассматривают возможность частичной замены операторов на некие технические устройства, способные распознавать речь, обрабатывать ее и выдавать осмысленный и необходимый ответ клиенту [1]. Целью данной работы являлось исследование возможностей использования систем автоматического распознавания речи при анализе работы колл-центров.

Модель системы распознавания

Следует подчеркнуть, что общение оператора телефонной службы поддержки и клиента происходит в виде живой беседы. Следовательно, распознавание речи должно происходить если не в реальном, то в квазиреальном масштабе времени. Преимуществами использования систем распознавания речи в телефонных службах поддержки являются [2–5]:

1. существенное снижение времени ожидания (handle time), что позволит снизить затраты на работу;
2. сокращение времени звонка в 1,5–2 раза за счет сокращения времени ввода информации оператором;
3. возможность автоматического ответа на простые вопросы, освобождая время работы операторов для работы со сложными звонками;
4. возможность замены сложной и допускающей частые ошибки IVR-системы (Interactive Voice Response), работающей в тональном режиме;
5. возможность использовать распознавание речи в качестве дополнительного источника информации не только при разговоре, но и при дальнейшем анализе работы call-центра. В частности, данный анализ помогает повысить ключевую метрику FCR (First Call Resolution) – разрешение проблемы (вопроса) за один звонок. Это приводит к снижению числа повторных звонков и повышению удовлетворенности клиентов одновременно, что, в свою очередь, приводит к снижению операционных расходов.

К основным недостаткам использования систем распознавания речи следует отнести:

1. невозможность распознавания с точностью 100% из-за большого количества различных особенностей произношения, таких как диалект, дефекты речи, эмоции, и ассоциативным восприятием речи человеком;
2. очень большая начальная стоимость внедрения системы распознавания речи.

Предлагаемая авторами модель системы распознавания речи [6] включает в себя блок обратной связи на изменение размера речевого словаря после обработки полученной информации (рисунок).

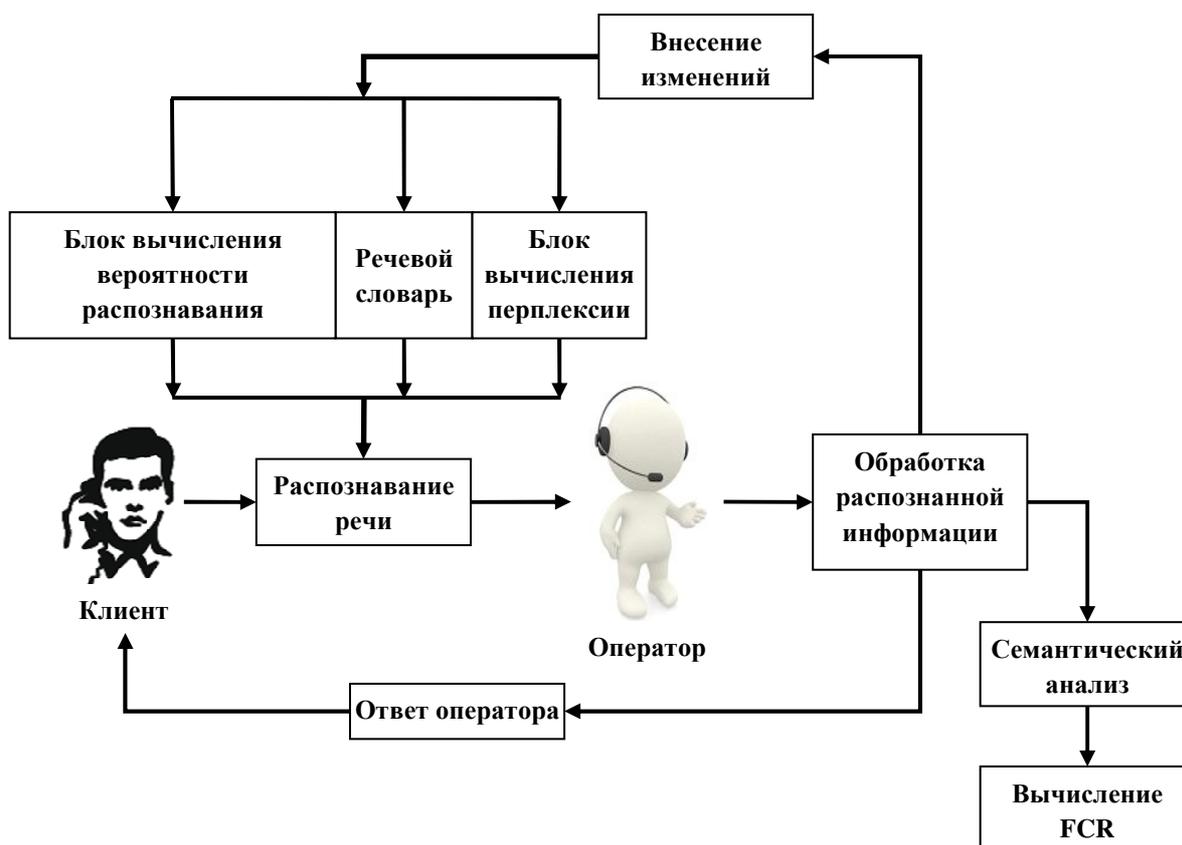


Рисунок. Модель системы распознавания речи

Отметим, что с одной стороны, меньший словарь обеспечит более высокую скорость распознавания. С другой стороны, существует вероятность распознать редкий вопрос с очень плохой точностью. В связи с этим данный параметр, а именно, размер речевого словаря системы распознавания, очень важен: от него зависит скорость вовлечения распознавания речи в работу телефонной службы поддержки.

В рамках проведенных авторами исследований по предлагаемой модели [7] было определено, что для русского языка словарь размером 2500 слов является достаточным для покрытия более 95% информации усредненной предметной области. Исходя из этого, не менее 95% информации будет распознаваться с точностью, присущей используемой модели.

В итоге, возможность модификации размера речевого словаря внутри самой системы в режиме реального (квазиреального) времени становится преимуществом использования распознавания речи. Особенно очевидно данное преимущество в работе телефонных служб поддержки, так как каждая из них имеет строго конкретизированную предметную область [6].

Особенности вычисления и использования перплексии

Выделим еще одну важную особенность предложенной модели. Авторами предложено учитывать в модели связность слов, или так называемую перплексию. Связность учитывает количество слов, которые логически могут встретиться после данного слова. Именно связность повышает точность распознавания речи, поскольку вопросы, задаваемые пользователями, имеют достаточно четкий синтаксис, что особенно ярко выражено в английском языке.

Для этого выделен специальный блок вычисления перплексии (рисунок), который используется во время распознавания, и в который с помощью блока обратной связи вносятся изменения по результатам обработки распознаваемой информации.

Перплексия вычислялась по формуле [8]:

$$PPL = 2^{\sum_{i=1}^N \frac{1}{N} \log_2 q(x_i)},$$

где N – количество состояний модели q ; x_i – состояние модели.

Чем меньше значение перплексии, тем лучше модель предсказывает следующее слово.

Рассмотрим на примере особенности применения связности слов. Компания ОАО «Системные решения» (г. Москва) является системным интегратором, т.е. область их деятельности – все этапы сдачи объекта «под ключ», начиная от проектирования объекта, создания спецификаций, закупки оборудования и заканчивая настройкой программного обеспечения в сданных объектах, обучения персонала и постгарантийного обслуживания.

В работе телефонного центра поддержки компании «Системные решения» (выделенного в самостоятельный отдел) принимают участие 13 операторов. Безусловно, большая часть их работы связана с общими вопросами (такими как уточнение сферы деятельности компании), вопросами о гарантии и первичными вопросами проектирования. Более сложные и конкретные вопросы переводятся на соответствующих менеджеров, например, менеджеров по закупке. Однако даже такой небольшой телефонный центр поддержки позволяет снизить нагрузку на узкоспециализированных специалистов.

Внедрение систем автоматического распознавания речи позволит повысить эффективность работы компании в целом и данного отдела, в частности, по ряду причин.

1. Как было отмечено ранее, такая система позволит более тщательно контролировать работу телефонного центра поддержки, что, безусловно, скажется на удовлетворенности клиентов работой компании.
2. Поскольку в предлагаемой модели используется связность слов в предложении, то это позволит точнее записывать, лучше обрабатывать и анализировать запросы клиентов.
3. Дополнительным преимуществом связности слов (перплексии) является возможность сокращения количества дополнительных и повторных звонков.

Рассмотрим на примере звонка вопрос о покупке расходных материалов. Проведенный нами эксперимент показывает, что в большинстве случаев (74% исследуемых звонков) последовательность вопросов будет прогнозируема (таблица). Таким образом, зная последовательность вопросов, оператор сможет не только отвечать на вопросы, но и задавать уточняющие вопросы. Это поможет избежать повторных звонков и снизить нагрузку на работу отдела.

Таблица. Наиболее вероятная последовательность вопросов

№	Специфика вопроса	Пример
1	Тип материала	Картридж
2	Уточнение	Для принтера
3	Модель	Canon 6120
4	Характеристика	Цветной, оригинальный
5	Цена	1200 рублей/шт.
6	Сроки поставки	3–4 недели
7	Гарантия	Только от производителя
8	Дополнительные скидки или специальные условия	3% при заказе более 1000 штук

Заключение

В работе показано, что применение компьютерных систем распознавания речи, основанных на модели с модификацией словаря, и дальнейший анализ полученной информации позволяют повысить производительность телефонных служб поддержки и снизить затраты на их работу.

Литература

1. Хижинский Д. Распознавание речи взорвет рынок call-центров // cnews.com: сетевой журн. 22.05.2007 [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.cnews.ru/reviews/index.shtml?2007/05/22/251191>, свободн. (дата обращения: 11.05.2010).
2. Contact centres rate call efficiency over customer service // callcentrehelper.com: сетевой журн. 07.04.2010 [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.callcentrehelper.com/contact-centres-rate-call-efficiency-over-customer-service-9921.htm#more-9921>, свободн. (дата обращения 28.04.2010).
3. How is speech recognition applied in call centers? [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.glocall.com/voice-recognition/speech-recognition-in-call-centers.html>, свободн. (дата обращения 19.12.2010).
4. Feldon B. The top five uses of speech recognition technology [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.callcentrehelper.com/the-top-five-uses-of-speech-recognition-technology-1536.htm>, свободн. (дата обращения 19.12.2010).
5. Advanced in Speech Recognition. Mobile Environments, Call Centers and Clinics / Ed. A. Neustein. – Springer Science, 2010. – 370 p.
6. Балакшин П.В., Петров Г.Ю. Некоторые аспекты исследования систем распознавания речи в телефонных службах поддержки // Научно-технический вестник ИТМО. – 2012. – № 1 (77). – С. 71–76.
7. Балакшин П.В., Тропченко А.Ю. Выбор размера словаря при реализации тестовой системы распознавания речи // Интеллектуальные и информационные системы: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. – Тула: Тульский государственный университет, 2009. – С. 51–54.
8. Call Centre Monitoring // callcentrehelper.com: сетевой журн. 2010 [Электронный ресурс]. – URL: http://www.callcentrehelper.com/call_centre_monitoring.htm, свободн. (дата обращения 22.04.2010).

МИКРООПТИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ ЗАЩИЩЕННОЙ ПЕЧАТИ

В.К. Баля

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор И.Ю. Денисюк

Рассмотрены возможности формирования с использованием лазерного гравера микронных структур и оптических микроэлементов, таких как решетки микропризм. Показаны источники физических ограничений при формировании оптической поверхности, определены предельно малые размеры структур, которые можно получить с использованием данного метода записи.

Введение

Лазерная фрезеровка – это технология, использующая лазерное излучение для абляции материалов, при этом материал либо расплавляется, возгорается, сублимируется, либо выдувается струей газа, при этом края структуры после обработки имеют качественную поверхность.

Лазерная фрезеровка (абляция) используется, например, для изготовления микромеханических элементов. Так, в работе [1] рассмотрены процессы существенного уменьшения вязкости полиметилметакрилата (ПММА) при нагревании и абляции, а также связанные с ними искажения формы получаемых элементов. Данная технология изготовления кроме планарных элементов или элементов фиксированной высоты пригодна для получения 3-х мерных структур заданной формы, например, микролинз, посредством послойного дозированного снятия обрабатываемого полимера на заданную глубину путем абляции при воздействии лазерного излучения. Схема реализации данного процесса приведена на рис. 1 в соответствии с работой [2]. В частности, в работе использовался эксимерный лазер с длиной волны 248 нм, обеспечивающий послойное снятие полимера. В результате задания многих последовательных проходов лазерного излучения возможно получение фактически любой желаемой формы 3D-элемента.



Рис. 1. Схема реализации процесса для создания матрицы микролинз

Лазерный гравер в настоящее время является одним из наиболее доступных и эффективных аппаратов для получения двух- и трехмерных микроструктур, однако возможности лазерного гравера, предназначенного для изготовления фотомасок и флексо-форм для высокой печати (спецмодификация), практически не изучены с точки зрения записи микрооптических элементов.

Предполагается, что низкое разрешение лазерного гравера не позволяет изготавливать элементы микрооптики, поскольку создает слишком большую

шероховатость поверхности, однако, с учетом особенностей конкретного лазерного гравера, обрабатываемого материала и процессов, оказалось возможным получение элементов со значительно меньшей шероховатостью поверхности.

Условия эксперимента

В ходе эксперимента использовался лазерный гравер Laser Graver LG 10F15, обеспечивающий формирование структур с разрешением до 2,5 мкм (10160 dpi). Формирование микроструктур проводилось с использованием полиэстеровой пленки с термочувствительным слоем на базе ПММА с наночастицами сажи, обеспечивающими поглощение лазерного излучения. Толщина испаряемого слоя – 8 мкм [3].

Для удаления участков пленки, подлежащих обработке, важно обеспечить разложение материала с испарением летучих продуктов деструкции, а не его сгорание или плавление, что обеспечивается выбором обрабатываемого полимера. Полная деструкция полимерного слоя с выходом летучих продуктов и отсутствием частичного подплавления соседних участков обрабатываемой поверхности обеспечивается при воздействии лазерного импульса на близкий к ПММА акрилат с частичной поперечной сшивкой. Использование ПММА обусловлено полной деструкцией облучаемого материала [1], этот процесс протекал следующим образом.

При нагреве до 115°C ПММА переходит в вязко-текучее состояние, переход в жидкость происходит при 200°C (переход в жидкое состояние называем плавлением [4]), а при 360°C начинается разложение, протекающее в два этапа – разрыв полимерной цепи по виниловой группе и испарение мономера [1]. При лазерной абляции ПММА быстро нагревается до температуры деструкции. При этом под быстрым нагревом понимается нагрев со скоростью, превышающей скорость перетекания обрабатываемого материала.

Экспериментальные результаты

При анализе микроструктур установлено, что основные наблюдаемые искажения формы их поверхности, относительно заданной, обусловлены двумя причинами:

1. построчной записью структуры [3], в результате чего линии изображения, имеющие наклон относительно направления лазерного излучения, состоят из отдельных точек;
2. эффектом нагрева материала и изменения скорости абляции нагретых участков при многократном проходе луча в пределах небольшой площади, поскольку при многократном проходе луча происходит нагрев соседних участков материала и абляция происходит быстрее.

На рис. 2 приведены фотоизображения поверхности микроструктуры, полученной после абляции, характеризующие зависимость формы канавок от взаимного направления формируемой линии и лазерного излучения.

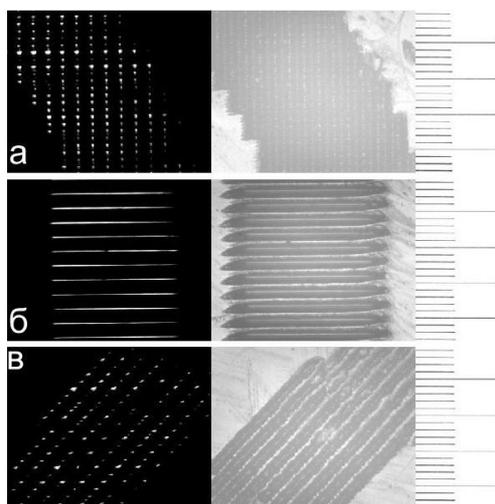


Рис. 2. Фотоизображение поверхности микроструктуры: формируемые линии перпендикулярны лазерному излучению (а); параллельны (б); под углом 45° (в)

Минимальная ширина формируемой линии обеспечивается при однократном проходе лазерного луча вдоль нее. При однократном проходе лазерного луча вдоль обрабатываемой линии в термопленке формируются канавки треугольной V-образной формы, на дне которой можно получить полосу шириной минимально 1,5 мкм. На рис. 3 представлены такие полосы: узкие полосы (1,5 мкм) (рис. 3, а); V-образные канавки, на дне которых видны сквозные (прорезанные на всю глубину материала) полосы (рис. 3, б); объект-микрометр (рис. 3, в). На врезке приведен рисунок сечения V-образной канавки, $l=30$ мкм, $d=1,5$ мкм, $h=8$ мкм (глубина канавки, равна толщине обрабатываемого слоя).

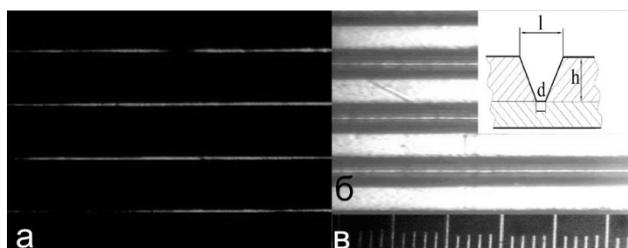


Рис. 3. Минимальная формируемая линия: фотоизображение микроструктуры в проходящем свете (а); в отраженном свете (б); объект-микрометр (в)

Здесь необходимо отметить, что форма V-образной канавки определяется апертурой записывающего луча и положением фокуса объектива гравера относительно поверхности обрабатываемого материала. По этой причине ровная боковая поверхность канавки формируется за счет выбора соответствующего апертурного угла фокусирующего объектива без послышного снятия поверхности, как это выполняется в работе [2] (использовался объектив с фиксированной апертурой $1/2$).

Полученные канавки, имеющие ровные оплавленные боковые поверхности можно использовать как мастер-матрицу для изготовления микропризм и микрозеркал.

При продольном расположении линии относительно излучения лазера (рис. 2, б) формируется наиболее ровная боковая поверхность канавки, имеющая оптическое качество, что обеспечивает получение микропризм с точной величиной угла блеска.

При расположении формируемой линии перпендикулярно ходу луча (рис. 2, а) на пленке прожигаются отдельные точки на расстоянии 2,5 мкм, каждая следующая после полного оборота барабана. Отмеченное выше взаимовлияние близко расположенных канавок здесь не наблюдается, но поскольку формируемая линия состоит из отдельных

точек, боковая поверхность микропризмы не столь гладкая, как в первом случае, и наблюдается высокое рассеяние света при отражении.

Посредством выбора мощности излучения лазера удается обеспечить незначительное оплавление боковых поверхностей и получение оптической поверхности, что подтверждается наблюдаемым углом блеска микропризм.

Формируемые при абляции канавки с фиксированным углом наклона боковых поверхностей также могут быть использованы для формирования периодических решеток микрооптических элементов. Например, на рис. 4 представлены два ортогональных фотоизображения защитного элемента (для защиты документов от копирования), записанные на одной и той же поверхности и видимые под различными углами наблюдения (последовательно: 0° , 45° , 0°), представляющие собой решетки микропризм, повернутые под различными углами.

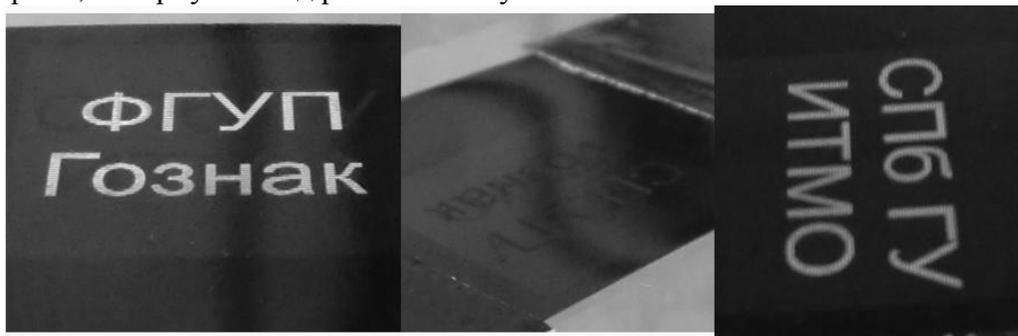


Рис. 4. Фотоизображения защитного элемента

Принцип действия защитного элемента следующий: микропризмы, сформированные на поверхности материала методом абляции, объединены в группы. В каждой группе микропризмы имеют один и тот же угол блеска и одинаковое направление, соответствующее повороту на 0° , 45° , 0° . Следовательно, поворачивая защитный элемент, наблюдатель увидит «вспыхивающие» надписи при совпадении угла наблюдения с углом блеска микропризм.

На рис. 5 приведено микрофотоизображение рельефа поверхности защитного элемента, состоящего из участков разнонаправленных решеток микропризм (они имеют треугольную форму в сечении). Распределение элементов решетки по поверхности создает видимое с некоторого расстояния изображение, а от относительного размера элементов зависит яркость поверхности, что позволяет записывать, в том числе и полутоновые изображения.

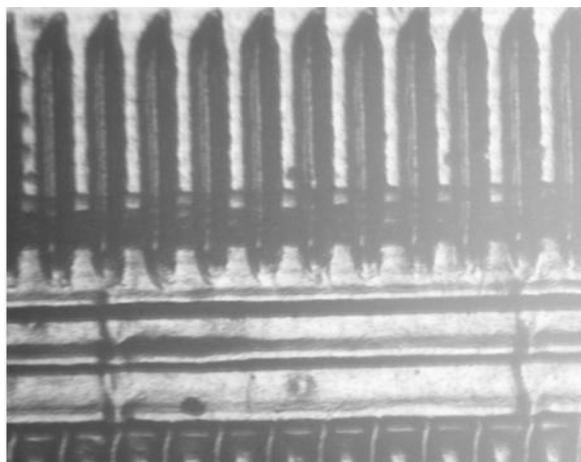


Рис. 5. Фотоизображение рельефа поверхности защитного элемента

На основе комбинации элементов решетки выполняется надпись, видимая под определенным углом. Поскольку ортогональные решетки размещаются в разных областях поверхности, они не накладываются, что позволяет записывать различные изображения.

Выводы

Проведенные эксперименты показали возможность формирования элементов микрооптики с использованием лазерного гравера. Конечно, как и любой метод, лазерный гравер имеет ряд ограничений и особенностей, связанных как со свойствами обрабатываемых материалов, так и с методом записи. Минимальная, полученная в ходе экспериментов, ширина полоски, формируемая на дне канавки – 1,5 мкм. Этот размер, также как и шаг раstra – 2,5 мкм (который лучше традиционной фотолитографии, обеспечивающей шаг раstra 4 мкм) пригоден для выполнения большинства практических задач, включая различные микропризмные и микролинзовые пленочные элементы.

Литература

1. Yuan D., Das S. Experimental and theoretical analysis of direct-write laser micromachining of polymethyl methacrylate by CO₂ laser ablation // *Applied Physics*. – 2007. – V. 101. – P. 024901-1–024901-6.
2. Pedder J.E., Holmes A.S., Boot H.J. Pulsed Laser Ablation of Polymers for Display Applications // *SPIE Proceedings, Proc. Photonics West LASE*. – 2008. – V. 6879. – P. 68790S–68797S.
3. Баля В.К., Денисюк И.Ю. Получение трехмерных оптических микроструктур с использованием лазерного гравера // *Приборостроение*. – 2012. – Т. 55. – № 3. – С. 51–56.
4. *Энциклопедия полимеров в 3 томах. Л-Полинозные волокна*. – М.: Советская энциклопедия, 1974. – Т. 2. – 516 с.

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ И НЕРЕГУЛЯРНАЯ ПРИМЕСЬ НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОЧАСТИЦЫ

И.В. Блинова¹, В.В. Гусаров², И.Ю. Попов¹

¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,

²Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет))

Рассмотрена задача улучшения каталитической активности на поверхности наноструктуры. Показано, что наличие примесей на поверхности приводит к большему улучшению каталитической активности, что может быть вызвано лишь увеличением соотношения поверхность/объем. Предложена простая модель для описания этого эффекта. Модель позволяет найти дискретный спектр оператора Шредингера для модели наночастиц. Благодаря появлению связанных состояний, вызванных наличием примесей, увеличивается электронная плотность у поверхности. Это приводит к увеличению каталитической активности наночастиц с поверхностной примесью.

Ключевые слова: полубесконечный кристалл, спектр оператора, примеси, каталитическая активность, наночастицы.

Введение

Рассмотрена одномерная модель полубесконечного кристалла с потенциалами нулевого радиуса. Оператор Шредингера для электрона в данной системе имеет чисто непрерывный спектр [1]. Наличие же нерегулярной примеси на поверхности кристалла может привести к появлению точечного спектра, т.е. связанных состояний, локализованных в окрестности границ. В результате электронная плотность, а значит, и каталитическая активность, возрастают. Исследован вопрос об условиях возникновения дискретного спектра в рамках указанной модели.

Модель полукристалла

Рассмотрим задачу о связанных состояниях методом матрицы монодромии [2, 3]. Опишем кратко этот подход. В нашей модели рассматриваются точечные потенциалы, поэтому необходимо использовать уравнение свободно летящего электрона:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0.$$

Используя известный вид решения $\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$, по данным Коши в точке $x = 0$, $(\psi(0), \psi'(0))$, находим данные Коши $(\psi(x), \psi'(x))$ при $x = -T$:

$$\begin{pmatrix} \psi(T) \\ \psi'(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos kT & \frac{\sin kT}{k} \\ -k \sin kT & \cos kT \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix}.$$

Матрица этого преобразования

$$M_T = \begin{pmatrix} \cos kT & \frac{\sin kT}{k} \\ -k \sin kT & \cos kT \end{pmatrix} \tag{1}$$

и есть матрица монодромии. Найдем ее собственные значения λ . Легко видеть, что $|\lambda| = 1$. Это соответствует тому, что оператор Шредингера для свободной частицы имеет чисто непрерывный спектр.

Рассмотрим теперь, какая матрица отвечает прохождению через точечный потенциал. Поместим в точку $x = a$ точечный потенциал силы α , т.е. поставим в данной точке следующие условия: $\psi(a-0) = \psi(a+0) = \psi(a)$, $\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = \alpha\psi(a)$.

Тогда изменение данных Коши при переходе от $(a-0)$ к $(a+0)$ задается формулой:

$$\begin{pmatrix} \psi(a+0) \\ \psi'(a+0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(a-0) \\ \psi'(a-0) \end{pmatrix},$$

т.е. соответствующая матрица монодромии имеет вид:

$$M_\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Рассмотрим теперь полубесконечный кристалл, заполняющий полуось $[0, \infty)$. В точке $x = 0$ предполагаем выполненным условие Дирихле. Пусть в точках $x = \frac{T}{2}(2n+1)$, $n \in Z$ находятся точечные потенциалы силы α (рис. 1).

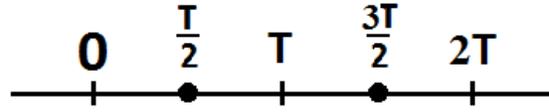


Рис. 1. Модель полукристалла

Данные Коши при сдвиге на период (T) преобразуются следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \psi(T) \\ \psi'(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{kT}{2} & \frac{1}{k} \sin \frac{kT}{2} \\ -k \sin \frac{kT}{2} & \cos \frac{kT}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \frac{kT}{2} & \frac{1}{k} \sin \frac{kT}{2} \\ -k \sin \frac{kT}{2} & \cos \frac{kT}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT & \frac{1}{k} \sin kT + \frac{\alpha}{k^2} \sin^2 \frac{kT}{2} \\ -k \sin kT + \alpha \cos^2 \frac{kT}{2} & \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение для этой матрицы имеет вид:

$$\lambda^2 - 2\lambda \left(\cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \right) + 1 = 0. \quad (3)$$

Значит, собственные значения λ данной матрицы определяются выражением:

$$\lambda = \left(\cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \right) \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2k} \sin 2kT + \left(\frac{\alpha^2}{4k^2} - 1 \right) \sin^2 kT}.$$

Если $\frac{\alpha}{2k} \sin 2kT + \left(\frac{\alpha^2}{4k^2} - 1 \right) \sin^2 kT < 0$, то $|\lambda| = 1$. Это означает, что

соответствующее значение k^2 принадлежит непрерывному спектру оператора Шредингера. Точечному спектру оператора Шредингера отвечают собственные значения λ матрицы монодромии такие, что $|\lambda| < 1$. Заметим, что произведение двух собственных значений матрицы монодромии равно 1 (т.е. если $|\lambda_1| < 1$, то $|\lambda_2| > 1$).

Данная ситуация имеет место при условии $\frac{\alpha}{2k} \sin 2kT + \left(\frac{\alpha^2}{4k^2} - 1\right) \sin^2 2kT \geq 0$, что равносильно неравенству

$$\left| \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \right| \geq 1. \quad (3)$$

Это неравенство выделяет значения k , соответствующие лакунам непрерывного спектра (k^2) оператора Шредингера (рис. 2 с графиком функции $f(k) = \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT$).

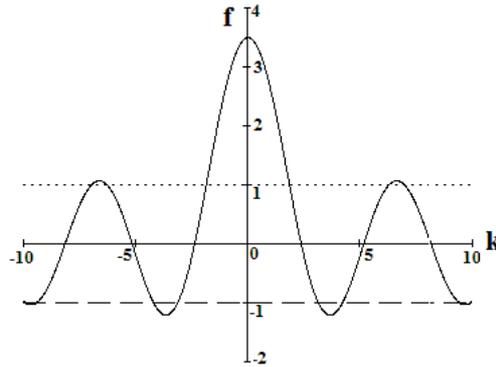


Рис. 2. График функции $f(k)$ при $\alpha=5, T=1$

Возможны два случая:

$$\begin{cases} \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \geq 1 \\ \lambda_1 = \left(\cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \right) - \sqrt{\frac{\alpha}{2k} \sin 2kT + \left(\frac{\alpha^2}{4k^2} - 1 \right) \sin^2 2kT} ; \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \leq -1 \\ \lambda_1 = \left(\cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \right) + \sqrt{\frac{\alpha}{2k} \sin 2kT + \left(\frac{\alpha^2}{4k^2} - 1 \right) \sin^2 2kT} . \end{cases}$$

Уравнение для собственных векторов, отвечающих $\lambda = \lambda_1$,

$$\begin{pmatrix} \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT - \lambda_1 & \frac{1}{k} \sin kT + \frac{\alpha}{k^2} \sin^2 \frac{kT}{2} \\ -k \sin kT + \alpha \cos^2 \frac{kT}{2} & \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT - \lambda_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

дает связь ψ_1 и ψ_2 :

$$\left(\cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT - \lambda_1 \right) \psi_1 + \left(\frac{1}{k} \sin kT + \frac{\alpha}{k^2} \sin^2 \frac{kT}{2} \right) \psi_2 = 0. \quad (5)$$

Здесь $\psi_1 = \psi(0)$, $\psi_2 = \psi'(0)$.

При отсутствии нерегулярной добавки собственных значений у оператора Шредингера нет. Действительно, на границе полукристалла $\psi_1 = 0$, $\psi_2 \neq 0$. Значит, уравнение для собственного вектора (5) будет выполнено, если коэффициент при ψ_2 равен нулю, т.е.

$$\frac{1}{k} \sin kT + \frac{\alpha}{k^2} \sin^2 \frac{kT}{2} = 0.$$

Но тогда определитель становится треугольным и имеем один кратный корень характеристического уравнения (3), т.е. по теореме Виета равный 1, значит, собственного числа матрицы монодромии с $|\lambda| < 1$ в этом случае нет, что и влечет отсутствие точечного спектра у оператора Шредингера для полукристалла.

Модель полукристалла с нерегулярной добавкой на границе

Рассмотрим случай, когда на границе описанного выше полукристалла имеется нерегулярная добавка в точке $x = -L$. Границей образца считаем точку $x = -T$, т.е. предполагаем, что выполнено условие Дирихле: $\psi(-T) = 0$. Предполагаем наличие в точке $x = -L$ точечного потенциала силы α (как и для основного полукристалла).

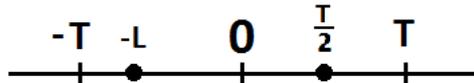


Рис. 3. Модель полубесконечного кристалла с нерегулярной добавкой

Используем матрицы монодромии, и, стартуя с вектора данных Коши $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ в точке $x = -T$, получаем вектор данных Коши на регулярной части полукристалла в точке $x = 0$:

$$M_L M_\alpha M_{T-L} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Достаточным условием существования точечного спектра является выполнение соотношения (5) для следующих данных Коши $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$:

$$\psi_1 = \frac{1}{k} \left(\cos kL + \frac{\alpha}{k} \sin kL \right) \sin(k(T-L)) + \frac{1}{k} \sin kL \cos(k(T-L));$$

$$\psi_2 = \frac{1}{k} (-k \sin kL + \alpha \cos kL) \sin(k(T-L)) + \cos kL \cos(k(T-L)).$$

Будем рассматривать собственные значения, лежащие в первой лакуне непрерывного спектра (рис. 3). Для этой лакуны выполнено условие (4).

Обсуждение результатов

Проведено численное решение уравнения (5) при различных значениях параметра системы (α, L) . Предполагаем $T=1$. Заметим, что $L = \frac{T}{2}$ отвечает случаю отсутствия нерегулярной примеси. Другими словами при этом условии дискретный спектр отсутствует. Показано существование в первой лакуне точечного спектра при $0,65T \leq L \leq T$ и $\alpha \geq 85$. На рис. 4 показана связь k и L .

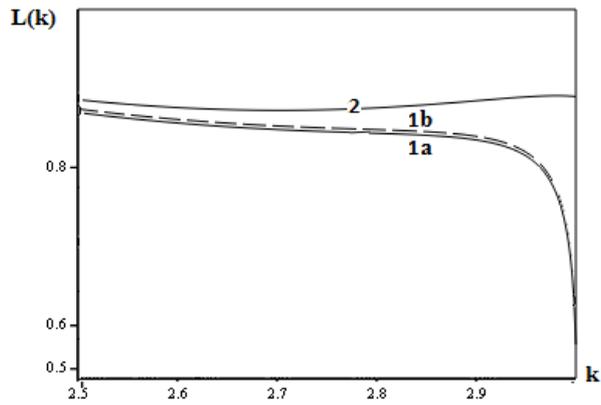


Рис. 4. Связь k и L : 1a – для $\alpha = \beta = 85$; 1b – для $\alpha = 85, \beta = 150$; 2 – для $\alpha = \beta = 150$

На рис. 5 показана связь k и α при различных значениях параметра L .

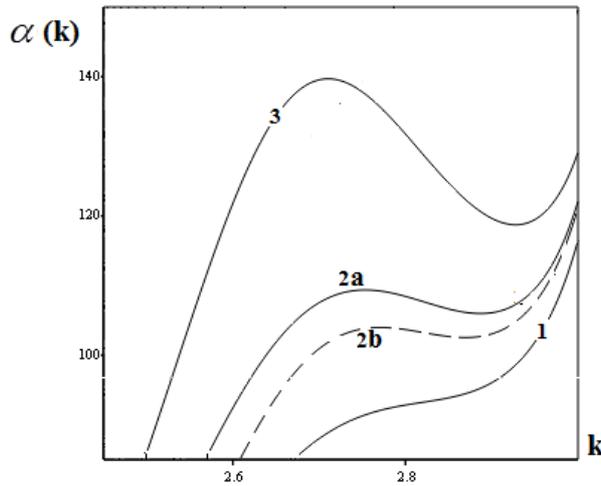


Рис. 5. Связь k и α : 1 – для $L = 0,85, \alpha = \beta$; 2a – для $L = 0,86, \alpha = \beta$; 2b – для $L = 0,86, \beta = 150$; 3 – $L = 0,87, \alpha = \beta$

Легко видеть, что при различных значениях L имеется одно, два или три связанных состояния (значения k^2) при допустимых значениях α .

Можно указать область (рис. 6) на плоскости параметров системы (α, L) , в которой будут собственные значения в первой лакуне.

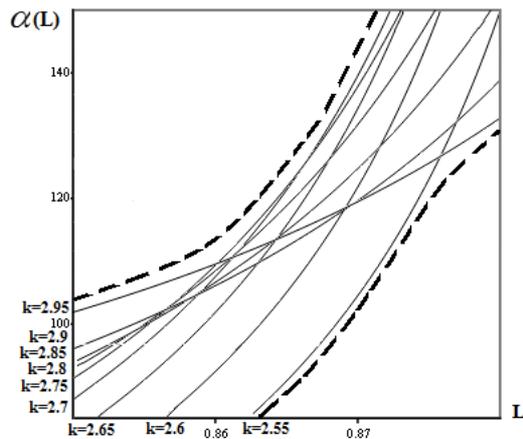


Рис. 6. Область на плоскости параметров (α, L) , отвечающая существованию точечного спектра оператора Шредингера в первой лакуне. Показаны некоторые кривые $\alpha = \alpha(L)$ для различных значений k

Заметим, что наличие связанного состояния, локализованного в окрестности границы (поверхности наночастицы), обеспечивает в этой области повышенную электронную плотность (по сравнению со случаем отсутствия дискретного спектра), что и объясняет более высокую каталитическую активность. Таким образом, для улучшения действия катализатора целесообразно выбирать параметры системы из области, указанной на рис. 6.

Литература

1. Альбиверио С., Хеэг-Крон Р., Гестези Ф., Холден Х. Решаемые модели в квантовой механике. – М.: Мир, 1991. – 568 с.
2. Kurasov P., Larsen J. Spectral Asymptotics for Schrodinger Operators with Periodic Point Interactions // J. Math. Anal. Appl. – 2002. – V. 266. – № 1. – P. 127–148.
3. Korotyaev E. Lattice Dislocations in a 1-Dimensional Model Commun // Math. Phys. – 2000. – V. 213. – № 2. – P. 471–489.

УДК 004.4'242

ПОСТРОЕНИЕ АВТОМАТОВ С НЕПРЕРЫВНЫМИ ВЫХОДНЫМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ ПО ОБУЧАЮЩИМ ПРИМЕРАМ

И.П. Бужинский

Научный руководитель – ассистент Ф.Н. Царев

Описывается метод построения конечных автоматов, управляющих объектами со сложным поведением и имеющих непрерывные выходные воздействия. В качестве входных данных метод использует набор обучающих примеров. Поиск автомата, решающего задачу, производится с помощью муравьиного алгоритма и эволюционной стратегии, которые заменили ранее использовавшийся для решения поставленной задачи генетический алгоритм. Описываемый метод применяется для решения задачи управления моделью беспилотного самолета, при этом полученные результаты тестируются в моделировании.

Ключевые слова: управляющие автоматы, муравьиные алгоритмы, эволюционные стратегии.

Введение

Автоматное программирование [1] – парадигма, в рамках которой программы проектируются в виде систем автоматизированных объектов управления, каждый из которых состоит из системы управления и объекта управления. Система управления может включать в себя один или несколько управляющих конечных автоматов (далее – автоматов). Одна из областей, для которой целесообразно применение автоматного программирования – задачи управления объектами со сложным поведением, т.е. объектами, которые могут демонстрировать различное поведение при одинаковых входных воздействиях. Примерами применения автоматного программирования при решении задач данного класса могут служить работы [2, 3]. В работе [3] процесс построения автоматов выполнялся автоматически, поскольку ручное построение автоматов оказалось затруднительным.

Для автоматизации процесса проектирования автоматов необходимо ввести критерий качества. Один из способов это сделать – задать *функцию приспособленности* (ФП). Поиск автомата с заданным значением ФП осуществляется на основе алгоритмов поисковой оптимизации. В частности, в работе [4] генетический алгоритм был применен для создания автомата, управляющего моделью беспилотного самолета, при этом ФП автомата вычислялась на основе моделирования в авиасимуляторе, а полный

цикл построения автомата занимал несколько недель. В работе [5] был также применен генетический алгоритм, но ФП автомата вычислялась на основе обучающих примеров, что позволило сократить время построения автомата до нескольких часов. Другой отличительной особенностью работы [5] является использование непрерывных выходных воздействий.

В настоящей работе развит метод построения автоматов, примененный в [5]. В качестве алгоритмов поисковой оптимизации используются муравьиный алгоритм и эволюционная стратегия. Их производительность сравнивается с ранее применявшимся для решения обозначенной выше задачи генетическим алгоритмом [6].

Постановка задачи

Задан набор обучающих примеров (в дальнейшем – тестов), на основе которых необходимо построить автомат управления объектом со сложным поведением, имеющим дискретные и непрерывные выходные воздействия. Тесты записываются человеком и являются примерами поведения объекта, но могут содержать отклонения от «идеального» его поведения. В настоящей работе, как и в работе [5], метод рассматривался в применении к модели беспилотного самолета. Для моделирования использовался авиасимулятор, необходимыми требованиями к которому являются возможность записи параметров самолета (скорости, угла крена и т.п.) и положений органов управления, характеризуемых числами. В качестве такого симулятора выбран FlightGear [7].

Как было упомянуто, положение органов управления можно описывать числами: целыми – для таких органов управления, как стартер, и вещественными – для таких органов управления, как руль высоты. Далее будем называть эти числа *значениями органов управления*. Например, положение руля высоты можно задать числами из отрезка $[-1, 1]$. Далее для простоты будем считать, что все органы управления являются непрерывными. При выполнении переходов управляющего автомата выходные воздействия, которыми они помечены, добавляются к значениям органов управления.

Будем также считать, что управляющий автомат является автоматом Мили [1], т.е. представляет собой множество состояний, среди которых выделено начальное, и переходов между ними, помеченных событиями и содержащих выходные воздействия. Работа автомата происходит по тактам. Пример автомата приведен на рис. 1.

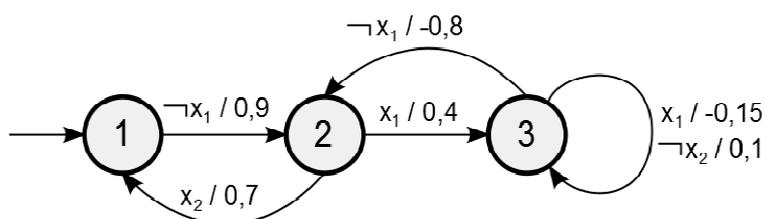


Рис. 1. Пример автомата Мили

Построение автомата осуществляется на основе тестов. Каждый тест представляет собой последовательность параметров полета и значений органов управления самолета. Запись упомянутых чисел производится с некоторой частотой (в настоящей работе частота равна 10 Гц). Тест описывает выполнение некоторого элемента полета, который должен продемонстрировать самолет под управлением автомата.

Формализуем понятие теста. Введем понятие кортежа входных воздействий, как набора из P вещественных чисел. Напомним, что входными воздействиями в рассматриваемой задаче являются параметры полета. Будем обозначать m -й элемент кортежа входных воздействий x как $x[m]$. Аналогично введем понятие кортежа выходных воздействий – набора из S вещественных чисел, являющихся значениями

органов управления. Если z – кортеж выходных воздействий, то под $z[m]$ будем понимать значения m -го органа управления в кортеже z .

Пусть в обучающем наборе N тестов. Обозначим длину i -го теста как $len[i]$. Тест представляет собой две последовательности: последовательность кортежей входных воздействий $in[i]$ и последовательность кортежей выходных воздействий $out[i]$. Будем также рассматривать еще одну последовательность $ans[i]$ – последовательность кортежей выходных воздействий, которую производит управляющий автомат, если ему передают на вход $in[i]$. Элементы упомянутых последовательностей в момент времени t ($t = 1 \dots len[i]$) будем обозначать $in[i][t]$, $out[i][t]$ и $ans[i][t]$ соответственно.

Уже было сказано, что переходы автомата помечены событиями. Каждое событие имеет вид y_1 или \bar{y}_1 , где y_1, \dots, y_1 – предикаты, вычисляемые по входным воздействиям, т.е. по последовательностям $in[i]$, $i = 1..N$. Примерами предикатов являются утверждения «угол крена больше 5° », «самолет снижается» и т.п. Значения предикатов в момент времени t , вообще говоря, могут зависеть и от входных воздействий в предыдущие моменты времени. Например, один из способов вычисления предиката «ускорение больше нуля» в момент времени t заключается в сравнении скорости самолета в моменты времени t и $t-1$.

Алгоритмы поисковой оптимизации

Во всех алгоритмах поисковой оптимизации, применявшихся для решения задачи, использовалась одна и та же функция приспособленности, являющаяся мерой сходства поведения автомата и поведения, показанного в тестах. Она задается формулой:

$$f = 1 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{len[i]} \sum_{t=1}^{len[i]} \frac{1}{C} \sum_{m=1}^C \left(\frac{out[m] - ans[m]}{c_{\max}[m] - c_{\min}[m]} \right)^2 \right)^{1/2},$$

в которой $c_{\max}[m]$ и $c_{\min}[m]$ означают максимальное и минимальное значение m -го органа управления.

Вид функции приспособленности, в частности, обусловлен используемым представлением особи в алгоритмах поисковой оптимизации. В качестве особи используется *каркас* автомата – автомат, на переходах которого не расставлены выходные воздействия. Использование каркаса в качестве особи для алгоритма оптимизации позволяет существенно уменьшить пространство поиска. Выходные воздействия расставляются на каркасе при помощи алгоритма, описанного в [5] и максимизирующего ФП. Алгоритм расстановки выходных воздействий запускается перед каждым вычислением ФП.

Муравьиный алгоритм. В настоящей работе применен подход, предложенный в [8]. Представим пространство поиска в виде ориентированного графа, вершинами которого являются особи алгоритма (в нашем случае – автоматы), а ребрами – мутации между особями. Мутацией будем считать изменение одного перехода автомата. Будем говорить, что один автомат *лучше* другого, если его значение ФП больше. Так как, в силу больших размеров пространства поиска, рассматриваемый граф не представляется возможным хранить в памяти, будем строить его постепенно, начиная с единственной вершины – сгенерированного случайным образом автомата.

Работа алгоритма состоит из последовательности итераций, в начале каждой из которых в некоторые вершины графа помещаются N муравьев, которые далее последовательно перемещаются по графу в поисках лучшей особи. Каждый муравей запоминает лучшую особь среди тех, что он посетил. Размещение муравьев происходит на вершинах пути, который проделал муравей, нашедший лучшую особь из рассмотренных муравьями за все итерации алгоритма.

Путь муравья формируется следующим образом (предполагаем, что муравей находится в некоторой вершине графа). С вероятностью p_{new} в графе создаются N_{mut} новых соседей для текущей вершины, и муравей переходит в новую вершину с лучшей особью. В противном случае, муравей выбирает одну из существующих вершин-соседей и переходит в нее. Вероятность выбора следующей вершины пропорциональна количеству *феромона* на ребре, ведущем в нее из текущей вершины. Феромон – это величина, связанная с ребрами графа, которую муравьи изменяют в процессе работы алгоритма. Пример участка пути муравья приведен на рис. 2.

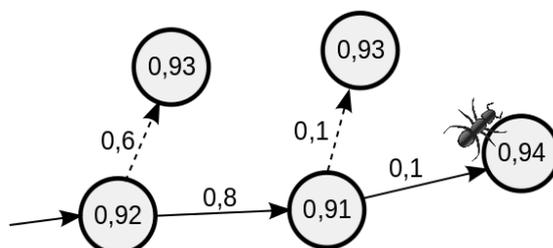


Рис. 2. Часть графа. Внутри вершин показаны ФП автоматов, на ребрах – значения феромона. Путь муравья обозначен сплошными стрелками

Если же посещение предыдущих N_{stag} вершин не привело к улучшению ФП лучшей особи муравья, то муравей прекращает движение. После того, как все муравьи остановились, наступает фаза обновления феромона.

Для каждого ребра uv определим две величины: текущее значение феромона τ_{uv} и максимальное значение $\Delta\tau_{uv}$, которое когда-либо откладывалось на ребре uv . Для каждого муравья на ребрах префикса проделанного им пути, ведущего в вершину с лучшей на пути муравья особью, величина $\Delta\tau_{uv}$ обновляется новым значением феромона, которое зависит от ФП особи. Затем текущее значение феромона каждого ребра графа пересчитывается по классической для муравьиных алгоритмов формуле $\tau'_{uv} = \rho \tau_{uv} + \Delta\tau_{uv}$, где ρ – коэффициент испарения феромона.

Для алгоритма были эвристически подобраны следующие значения параметров: $N_{stag} = 40$; $N_{mut} = 35$; $N = 4$; $p_{new} = 0,25$; $\rho = 0,35$.

Эволюционная стратегия. Эволюционные стратегии – алгоритмы, поддерживающие множество особей, называемое поколением, и использующие оператор мутации для получения новых особей. Различают два вида эволюционных стратегий – так называемые (μ, λ) - и $(\mu + \lambda)$ -эволюционные стратегии, где μ и λ – натуральные числа. Для обоих видов эволюционной стратегии размер поколения равен μ , и при переходе к следующему шагу путем применения оператора мутации к различным особям поколения получается λ новых особей. В (μ, λ) -эволюционной стратегии новое поколение состоит из μ лучших особей среди λ особей, получившихся в результате мутаций. В $(\mu + \lambda)$ -эволюционной стратегии μ лучших особей выбираются как из λ новых особей, так и из μ особей предыдущего поколения.

Было установлено, что применение $(50, 500)$ -эволюционной стратегии обеспечивает лучшую производительность по сравнению с другими рассмотренными вариантами.

Экспериментальное исследование

В симуляторе FlightGear был записан набор из 28 тестов, описывающий выполнение вращения самолета на 360° вокруг своей оси (в дальнейшем будем называть этот элемент полета «вращением»). Для записи тестов использовалась модель

реактивного истребителя *Gloster Meteor* (рис. 3, а). Траектории, сделанные самолетом при записи нескольких тестов, приведены на рис. 3, б.



Рис. 3. *Gloster Meteor*, выполняющий «вращение» (снимок экрана) (а); несколько траекторий из набора тестов для «вращения» (б)

Для решения поставленной задачи ранее применялся генетический алгоритм, но процесс построения автоматов с его использованием требовал большого числа вычислений ФП и мог занимать несколько часов. С целью уменьшения числа вычислений ФП, требуемых для получения автомата, решающего задачу, были реализованы муравьиный алгоритм и эволюционная стратегия.

Было произведено по 20 запусков каждого алгоритма. Во всех запусках строились автоматы, имеющие четыре состояния. Запуски завершались после 10^5 вычислений ФП. Результаты самих запусков представлены в таблице. В левой колонке таблицы приведены несколько контрольных значений ФП, а в остальных колонках – число запусков из 20, на которых контрольные значения ФП были достигнуты.

Таблица. Результаты запусков алгоритмов оптимизации

Значение ФП	Муравьиный алгоритм	Эволюционная стратегия	Генетический алгоритм
0,98375	1	0	0
0,98350	16	12	2
0,98325	19	18	8
0,98300	20	20	17

Из приведенной статистики можно сделать вывод о том, что муравьиный алгоритм и эволюционная стратегия опережают генетический алгоритм по производительности. На персональном компьютере, оснащенный процессором Intel Core 2 Quad Q9400 с тактовой частотой 2660 МГц, один запуск этих алгоритмов в среднем занимает 20 мин. Уменьшение времени, требуемого для решения задачи, по сравнению с 5, связано как с переходом к более эффективным алгоритмам оптимизации, так и с использованием более производительной вычислительной техники.

Автоматы, полученные при помощи алгоритмов поисковой оптимизации, изучались на предмет качества исполнения элементов полета, записанных в тестах. Было установлено, что все рассмотренные автоматы, значение ФП которых лежит в диапазонах, представленных в левой колонке таблицы, оказались способны выполнить вращение. Основное различие между автоматами, имеющими разные значения ФП, заключалось в качестве выполнения финальной части элемента полета. Анализ поведения различных автоматов показывает, что автоматы с более высоким значением ФП в среднем выполняют ее качественней.

Исследования, проводимые в рамках настоящей работы, как и в рамках работы 5, могут найти применение в авиационной промышленности при проектировании систем управления беспилотными летательными аппаратами.

Заключение

Рассмотрена задача построения по обучающим примерам автомата, управляющего объектом со сложным поведением и имеющим непрерывные выходные воздействия. В качестве примера объекта со сложным поведением рассматривается модель беспилотного самолета. Для решения задачи применены муравьиный алгоритм и (μ, λ) -эволюционная стратегия, которые позволили уменьшить число вычислений ФП, требуемое для построения автомата, решающего задачу.

Автоматы, построенные с помощью описанного метода, тестировались в моделировании. Автоматы оказались способны выполнять требуемый элемент полета. Тем не менее, качество управления моделью беспилотного самолета не всегда являлось превосходным. Дальнейшая разработка методов построения конечных автоматов управления объектами со сложным поведением с учетом непрерывных выходных воздействий может быть направлена на повышение качества создаваемых автоматов.

Литература

1. Поликарпова Н.И., Шалыто А.А. Автоматное программирование. – 2-е изд. – СПб: Питер, 2011. – 176 с.
2. Клебан В.О., Шалыто А.А. Разработка системы управления малоразмерным вертолетом // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2011. – № 2 (72). – С. 12–16.
3. Царев Ф.Н. Совместное применение генетического программирования, конечных автоматов и искусственных нейронных сетей для построения системы управления беспилотным летательным аппаратом // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2008. – № 8 (53). – С. 42–60.
4. Поликарпова Н.И., Точилин В.Н., Шалыто А.А. Метод сокращенных таблиц для генерации автоматов с большим числом входных переменных на основе генетического программирования // Известия РАН. Теория и системы управления. – 2010. – № 2. – С. 100–117.
5. Александров А.В., Казаков С.В., Сергушичев А.А., Царев Ф.Н., Шалыто А.А. Генерация конечных автоматов для управления моделью беспилотного самолета // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2011. – № 2 (72). – С. 3–11.
6. Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М. Генетические алгоритмы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 368 с.
7. FlightGear [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.flightgear.org/> свободный. – Яз. англ.
8. Chivilikhin D., Ulyantsev V. Learning Finite-State Machines with Ant Colony Optimization // Lecture Notes in Computer Science. – 2012. – V. 7461/2012. – P. 268–275.

ВЫБОР ФУНКЦИИ ПРИСПОСОБЛЕННОСТИ ОСОБЕЙ ЭВОЛЮЦИОННОГО АЛГОРИТМА С ПОМОЩЬЮ ОБУЧЕНИЯ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ

А.С. Буздalова

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.А. Шалыто

В работе предлагается метод, позволяющий динамически выбирать вспомогательную функцию приспособленности, наиболее выгодную для использования в эволюционном алгоритме. Метод основан на применении обучения с подкреплением. Приведены экспериментально полученные результаты его использования для решения модельной задачи, а также результаты, позволяющие сравнить предлагаемый метод с алгоритмами многокритериальной оптимизации.

Введение

В теории оптимизации известны задачи скалярной и многокритериальной оптимизации [1]. На практике возникает возможность решать модифицированную скалярную задачу оптимизации, в которой присутствуют дополнительные критерии [2]. Целью ее решения является максимизация единственной целевой функции, а дополнительные критерии имеют лишь вспомогательное значение. Целевая функция может некоторым образом зависеть от дополнительных критериев, поэтому в некоторых случаях вместо максимизации целевой функции оказывается выгодным оптимизировать дополнительные критерии.

Важным классом алгоритмов оптимизации являются эволюционные алгоритмы (ЭА), где в качестве критерия выступает целевая функция приспособленности (ФП). При наличии нескольких вспомогательных функций приспособленности выбор наиболее выгодной из них приходится производить вручную [2]. Подобный подход не вполне эффективен, так как предполагает многократный перезапуск ЭА.

Целью описываемых исследований являлась разработка метода, позволяющего автоматически выбирать из заранее подготовленного набора такие вспомогательные ФП, применение которых способствует ускорению «выращивания» особей с высокими значениями целевой ФП. В литературе встречаются разработки по автоматической настройке значений параметров генетического алгоритма (ГА), таких как вероятность применения генетических операторов или число особей в поколении, а также по настройке некоторой фиксированной ФП [3]. Предлагаемый метод отличается от существующих подходов к настройке ГА тем, что предполагает выбор между качественно разными ФП.

Выбор ФП предлагается осуществлять с помощью обучения с подкреплением [5, 5]. Отметим, что применение обучения с подкреплением к оптимизации работы ЭА мало исследовано на данный момент [3]. В предлагаемой работе подобный подход впервые применяется для контроля ФП.

Существуют также подходы к улучшению производительности алгоритмов однокритериальной оптимизации, основанные на введении многокритериальности [6]. Их применение предполагает разработку дополнительных ФП, таких, что получающаяся задача многокритериальной оптимизации решается проще, чем исходная задача. Отличие предлагаемого метода от многокритериального подхода состоит в том, что вспомогательные ФП задаются заранее и могут не коррелировать с целевой функцией. Ниже будут описаны результаты эксперимента, позволяющего сравнить производительность предлагаемого метода и алгоритмов многокритериальной оптимизации.

Описание предлагаемого подхода

Для выбора вспомогательной ФП используется обучение с подкреплением [4, 5]. В алгоритмах этого типа обучение происходит одновременно с применением накопленного опыта, что позволяет выбрать и применить оптимальные ФП в течение одного запуска ЭА.

В алгоритмах обучения с подкреплением агент применяет действия к среде, которая отвечает на каждое действие наградой. В разработанном методе действие агента состоит в выборе ФП для каждого вновь сформированного поколения ЭА. Вознаграждение тем выше, чем существеннее рост значений целевой ФП. На рис. 1 представлена схема предлагаемого метода.



Рис. 1. Схема предлагаемого метода: t – номер поколения ЭА

Алгоритмы обучения с подкреплением нацелены на формирование оптимальной стратегии поведения агента, следование которой приводит к максимизации суммарного вознаграждения, а, следовательно, к ускорению роста целевой ФП.

Результаты экспериментов

Эффективность предлагаемого метода была проверена экспериментальным способом. Было реализовано несколько различных ЭА и контролируемых их алгоритмов обучения с подкреплением, а именно Q-learning [5], Delayed Q-learning [7], R-learning [7] и Dyna [5]. В ходе первого эксперимента предлагаемый метод использовался для решения модельной задачи, в которой на различных этапах оптимизации выгодны различные вспомогательные ФП. В ходе второго эксперимента было проведено сравнение с методами многокритериальной оптимизации на примере задачи H-IFF (Hierarchical-if-and-only-if function) [6], применяющейся для тестирования генетических алгоритмов.

Результаты решения модельной задачи

Рассмотрим постановку следующей модельной задачи. Особи представлены битовыми строками. Пусть x бит равны единице. Определим функции приспособленности. Целевая ФП задается формулой $g(x) = \lfloor x/k \rfloor$. Вспомогательные ФП имеют следующий вид:

$$h_1(x) = \begin{cases} x, & x < p \\ p, & x \geq p \end{cases}, \quad h_2(x) = \begin{cases} p, & x < p \\ x, & x \geq p \end{cases}.$$

Будем называть p точкой переключения.

Можно видеть, что для особей, с числом единиц меньшим значения точки переключения, выгоднее использовать функцию h_1 в качестве текущей ФП. Для особей,

число единиц в представлении которых превышает значение точки переключения, выгодно использовать h_2 .

Поставлен эксперимент, заключающийся в многократных запусках ГА с обучением и обычного ГА. На рис. 2 представлены графики зависимости усредненной целевой ФП, лучшей выращенной в текущем поколении особи от номера поколения. Результаты эксперимента подтверждают, что применение обучения ускоряет получение особей с более высокими значениями целевой ФП.

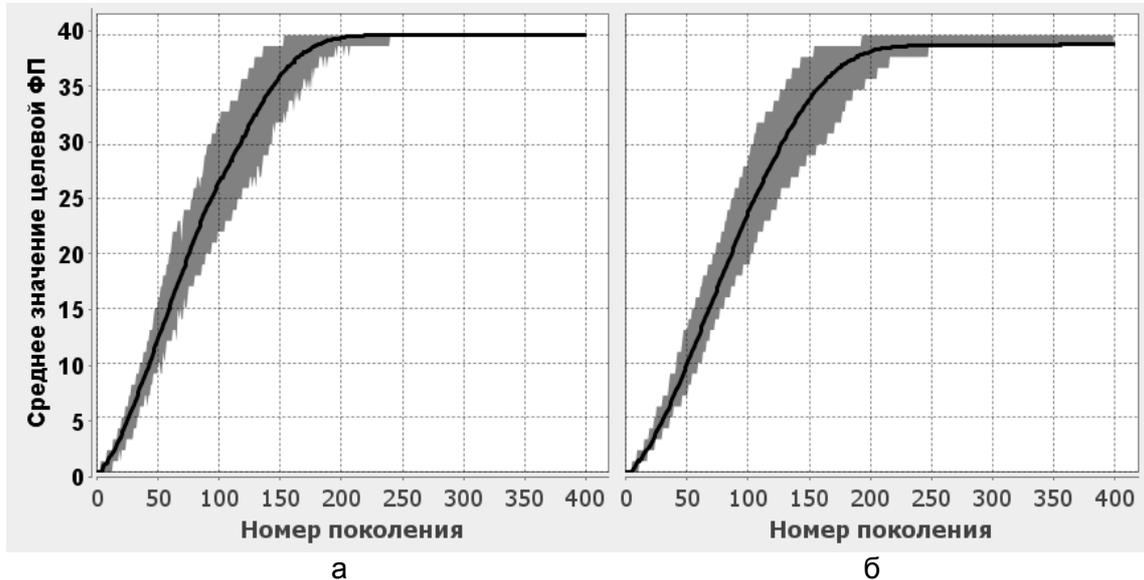


Рис. 2. Сравнительные графики роста ФП лучшей особи во время работы алгоритма, использующего Delayed Q-learning [7] (а) и обычного ГА (б)

Результаты оптимизации функции Н-IFF

Определим задачу скалярной оптимизации функции Н-IFF. Пространство поиска состоит из битовых строк $B = b_1 b_2 \dots b_l$ фиксированной длины l . Требуется максимизировать функцию Н-IFF [6]:

$$f(B) = \begin{cases} 1, & |B| = 1 \\ |B| + f(B_L) + f(B_R), & |B| > 1 \wedge (\forall i \{b_i = 0\} \vee \forall i \{b_i = 1\}) \\ f(B_L) + f(B_R), & \text{иначе} \end{cases}$$

Функция задана таким образом, что существует два оптимальных решения: строка, полностью состоящая из единиц, и строка, полностью состоящая из нулей. Особенностью задачи является то, что поиск оптимального решения с помощью ЭА часто останавливается в локальном оптимуме. Существует подход к решению этой проблемы, при котором скалярная задача оптимизации Н-IFF заменяется многокритериальной задачей оптимизации функции МН-IFF [6]. Вместо исходной функции f вводятся функции f_0 и f_1 :

$$f_n(B) = \begin{cases} 0, & |B| = 1 \wedge b_1 \neq n \\ 1, & |B| = 1 \wedge b_1 = n \\ |B| + f_n(B_L) + f_n(B_R), & |B| > 1 \wedge \forall i \{b_i = n\} \\ f_n(B_L) + f_n(B_R), & \text{иначе} \end{cases}$$

Затем проводится максимизация предложенных функций. Этот подход позволяет найти решения с более высокими значениями исходной функции, чем позволяет подход, основанный на скалярной оптимизации.

В ходе эксперимента было реализовано новое решение задачи оптимизации N-IFF с использованием предлагаемого метода. В качестве целевой ФП выступала функция f . В качестве вспомогательных ФП были взяты функции f_0 и f_1 , применяемые при оптимизации MN-IFF. Использовались два различных эволюционных алгоритма: генетический алгоритм (ГА) и $(1+m)$ -эволюционная стратегия (ЭС). В ГА с вероятностью 70% применялся оператор одноточечного кроссовера и оператор мутации, инвертирующий каждый бит каждой особи с вероятностью 2/1. В ЭС оператор мутации инвертировал один бит каждой особи, выбранный случайным образом.

Параметры эксперимента соответствовали параметрам, примененным в работе [6], что позволяет сравнить новые результаты с результатами, полученными ее авторами. Длина особи составляла 64 бита. Соответствующее максимально возможное значение N-IFF равно 448. В табл. 1 представлены результаты оптимизации MN-IFF с помощью различных алгоритмов. Результаты отсортированы по среднему значению целевой ФП лучших особей, полученных в результате 30 запусков соответствующих алгоритмов. Вычисления запускались на фиксированное число поколений. Алгоритмы 1, 2, 4, 5, 7 реализованы с помощью предлагаемого метода с использованием различных алгоритмов обучения. Результаты 3, 6, 9, 11 получены авторами, причем алгоритмы 3 и 6 (PESA и PAES) являются алгоритмами многокритериальной оптимизации. Можно видеть, что предлагаемый метод в случае использования алгоритма обучения R-learning [7] позволяет преодолеть проблему остановки в локальном оптимуме столь же эффективно, как и метод PESA и более эффективно, чем метод PAES.

Таблица 1. Результаты оптимизации MN-IFF. Алгоритмы 1, 2, 4, 5, 7 реализованы с применением предлагаемого метода

№	Алгоритм	Лучшее значение	Среднее значение	σ	% одного оптимума	% двух оптимумов
1	(1+10)-ЭС + R-learning	448	448,00	0,00	100	40
2	ГА + R-learning	448	448,00	0,00	100	10
3	PESA	448	448,00	0,00	100	100
4	ГА + Q-learning	448	435,61	32,94	87	3
5	ГА + Dyna	448	433,07	38,07	80	0
6	PAES	448	418,13	50,68	74	43
7	ГА + Delayed QL	448	397,18	49,16	53	0
8	ГА + Random	384	354,67	29,24	0	0
9	DCGA	448	323,93	26,54	3	0
10	ГА	384	304,53	27,55	0	0
11	SHC	336	267,47	29,46	0	0
12	(1+10) ЭС	228	189,87	17,21	0	0

В табл. 2 отдельно рассмотрена оптимизация N-IFF с применением ЭС. Применяемая ЭС устроена таким образом, что решает задачу весьма неэффективно.

Однако применение предлагаемого метода позволяет увеличить среднее значение целевой ФП примерно в два раза.

Таблица 2. Результаты оптимизации H-IFF с помощью эволюционных стратегий. Алгоритмы 1, 3, 5 реализованы с применением предлагаемого метода

№	Алгоритм	Лучшее значение	Среднее значение	σ	% одного оптимума	% двух оптимумов
1	(1+10)-ЭС + R-learning	448	448,00	0,00	100	40
2	(1+10)-ЭС	228	189,87	17,21	0	0
3	(1 + 5)-ЭС + R-learning	448	448,00	0,00	100	37
4	(1 + 5)-ЭС	216	179,07	16,99	0	0
5	(1 + 1)-ЭС + R-learning	448	403,49	59,48	73	10
6	(1 + 1)-ЭС	188	167,07	11,98	0	0

Заметим, что целью предлагаемого метода является ускорение получения особей с высокими значениями целевой ФП. Приведенные результаты свидетельствуют о том, что метод успешно справляется с этой задачей. Невысокий процент нахождения обоих возможных оптимумов объясняется тем, что предлагаемый метод не проводит многокритериальную оптимизацию. Ожидается, что в случаях, когда среди вспомогательных ФП есть ФП, некоррелирующие с целевой, предлагаемый метод будет эффективнее методов многокритериальной оптимизации.

Заключение

Предложен метод, повышающий эффективность скалярной оптимизации со вспомогательными критериями. Метод основан на выборе функции приспособленности эволюционного алгоритма с помощью обучения с подкреплением. Работа вносит вклад в исследование применимости обучения с подкреплением для контроля работы эволюционных алгоритмов, настройка выбора функций приспособленности с помощью обучения проведена впервые. В ходе экспериментов подтверждена эффективность метода: метод позволяет динамически выбирать наиболее выгодную функцию приспособленности и избегать остановки в локальном оптимуме. Метод, примененный к $(1+m)$ -эволюционным стратегиям, позволяет в два раза увеличивать значение целевой функции приспособленности особей, выращиваемых за фиксированное число поколений.

Литература

1. Лотов А.В., Поспелова И.И. Многокритериальные задачи принятия решений: Учебное пособие. – М.: МАКС Пресс. – 2008. – 197 с.
2. Буздалов М.В. Генерация тестов для олимпиадных задач по теории графов с использованием эволюционных алгоритмов. Магистерская диссертация. СПбГУ ИТМО, 2011 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://is.ifmo.ru/papers/2011-master-buzdalov/>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 10.05.2012).
3. Eiben A.E., Horvath M., Kowalczyk W., Schut M.C. Reinforcement learning for online control of evolutionary algorithms // Proceedings of the 4th international conference on

- Engineering self-organising systems (ESOA'06). – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg. – 2006. – P. 151–160.
4. Sutton R.S., Barto A.G. Reinforcement Learning: An Introduction. – MIT Press, Cambridge, MA. – 1998. – 322 p.
 5. Gosavi A. Reinforcement Learning: A Tutorial Survey and Recent Advances // INFORMS Journal. – V. 21. – № 2. – 2009. – P. 178–192.
 6. Knowles J.D., Watson R.A., Corne D. Reducing Local Optima in Single-Objective Problems by Multi-objectivization // Proceedings of the First International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization EMO'01. – London, UK: Springer-Verlag. – 2001. – P. 269–283.
 7. Strehl A.L., Li L., Wiewora E., Langford J., Littman M.L. PAC model-free reinforcement learning // Proceedings of the 23rd international conference on Machine learning, ICML'06. – 2006. – P. 881–888.
 8. Mahadevan S. Average reward reinforcement learning: foundations, algorithms, and empirical results // Machine Learning. – 1996. – V. 22. – № 1–3. – P. 159–195.

УДК 535.44; 53.043

ТРЕХМЕРНАЯ ЛИТОГРАФИЯ В ОБЪЕМНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ

В.Г. Булгакова

Научный руководитель – к.т.н., доцент Н.Д. Ворзобова

Исследованы процессы формирования малоразмерных и объемных полимерных элементов в фотоотверждаемых композиционных материалах на основе акриловых мономеров методами глубокой, интерференционной и голографической литографии и факторы, определяющие характеристики элементов и их конфигурации.

Ключевые слова: фотоотверждаемый материал, наноккомпозит, полимерная структура, характеристический размер, аспектное отношение, интерференционная литография, дифракционная эффективность, голография.

Введение

Интенсивное развитие информационных систем, систем связи, вычислительной техники, MEMS и MOEMS выдвигает новые требования к полимерным элементам этих систем, технологиям их получения и материалам [1]. Перспективным направлением в области полимерных технологий является получение малоразмерных и объемных элементов различной конфигурации. Данная работа ориентировалась на разработку основ технологий получения таких элементов с использованием фотоотверждаемых материалов на основе акриловых мономеров [2], имеющих ряд преимуществ, связанных с возможностью изменения их свойств, а также специфическими процессами, определяющими характеристики полимерных элементов.

Экспериментальная часть

В предыдущих работах кафедры рассматривались процессы, определяющие возможность формирования объемных элементов методом глубокой литографии с практически вертикальными гранями в результате процессов самоорганизации, связанных с положительным знаком изменения показателя преломления.

В настоящей работе рассмотрены процессы, определяющие размеры области фотополимеризации и возможности уменьшения характеристических размеров полимерных элементов и увеличения аспектного отношения. Исследована кинетика

роста микроструктурных элементов при фотоотверждении через амплитудную маску и зависимости продольных и поперечных размеров элементов от размеров проектируемой световой области, расстояния между элементами, экспозиционных параметров и толщины слоя. Выявлено различие скоростей роста области фотополимеризации в продольном и поперечном направлениях (высоты и ширины полимерных элементов) – скорость роста элементов микроструктур в ширину значительно ниже (рис. 1). Данный результат обусловлен как самофокусировкой света в материале при фотополимеризации в результате увеличения показателя преломления, так и торможением процесса фотополимеризации кислородом, диффундирующим из промежутков между световыми областями в область фотополимеризации.

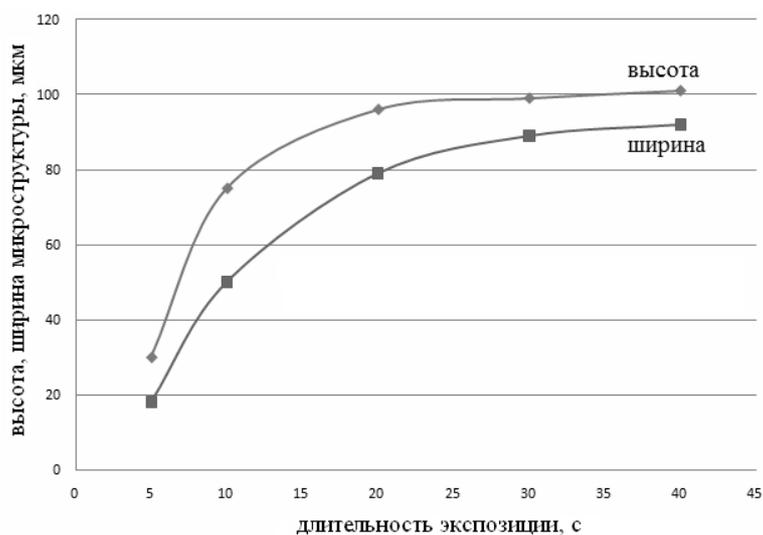


Рис. 1. Кинетика формирования микроэлементов методом глубокой литографии. Толщина слоя 100 мкм. Ширина линии в амплитудной маске 100 мкм

Установлено, что степень уменьшения размеров отвержденной области определяется как количеством поступающего кислорода, определяемого расстоянием между элементами, так и размерами световой области (ширинами линий в амплитудной маске). Результаты представлены на рис. 2. Позитивная роль кислородного ингибирования подтверждена также экспериментом по сравнению характеристик микроструктур, полученных в атмосфере аргона и доступом кислорода.

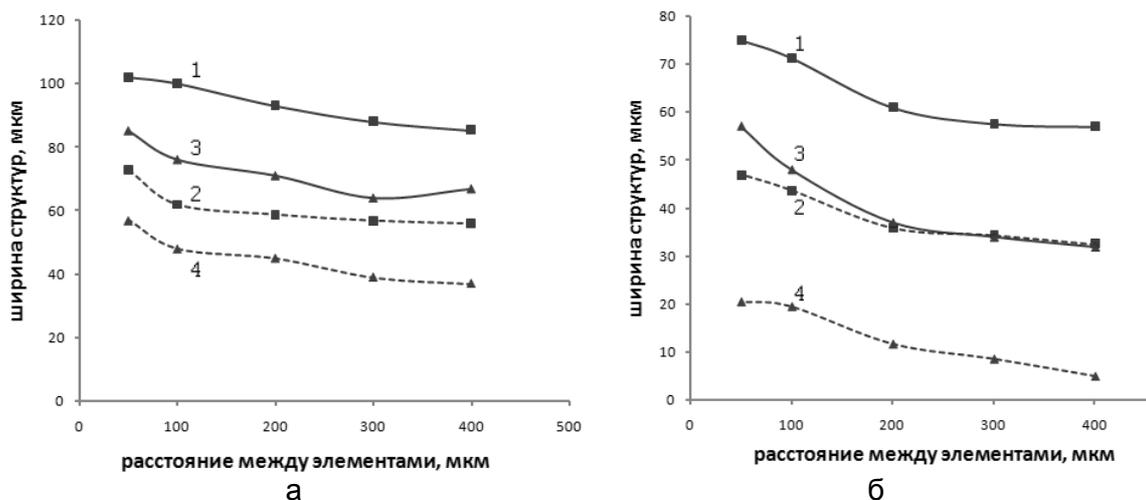


Рис. 2. Зависимость ширины элемента микроструктуры от расстояния между элементами. Ширина линии: 100 мкм (а) и 75 мкм (б). Плотность шаблонов: 1,2 (кривые 1, 2) и 2,5 (кривые 3, 4). Длительность экспозиции: 10 с (кривые 2, 4) и 20 с (кривые 1, 3)

Возможность уменьшения размеров области фотополимеризации относительно наложенной световой области в результате ингибирующего действия кислорода определяет возможность уменьшения характеристических размеров элементов и увеличения аспектного отношения. Установленные закономерности и эффекты позволили получить объемные элементы различной конфигурации с характеристическими размерами 2–200 мкм и аспектным отношением до 1:50 (рис. 3, а, б). Результаты использованы для получения элементов микролазеров и защитных элементов (рис. 3, в, г).

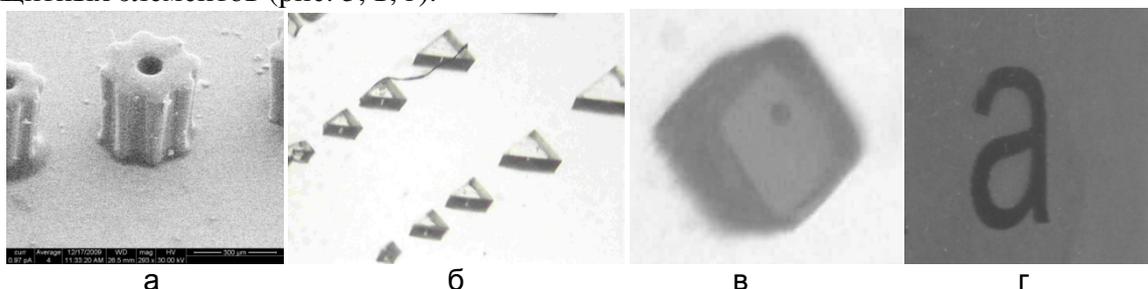


Рис. 3. Примеры полимерных элементов, полученных методом глубокой литографии: элемент MEMC (а); микропризмы (б); элемент микролазера (в); цветоизменяющий защитный элемент (г)

Одной из возможностей уменьшения характеристических размеров элементов и получения структур востребованной периодической конфигурации является ориентация на метод интерференционной литографии [3]. В данной работе исследовались закономерности формирования периодических структур и их характеристики. Получены одномерные и двумерные периодические структуры с размерами элементов 3–0,4 мкм (рис. 4).

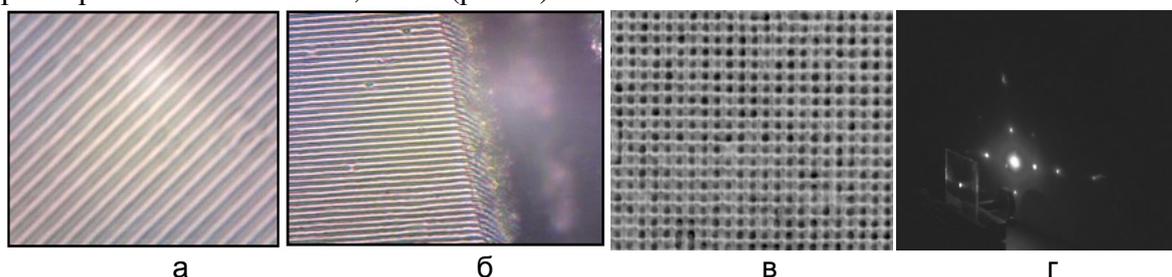


Рис. 4. Фрагмент микрофотографии поверхности (а); среза (б) одномерной структуры; двумерной структуры (в) и картины дифракции на ней (г). Состав BisA/Carb 30/70, ZnO 10%; длительность экспозиции 8 с; период 2 мкм

Получены высокие дифракционные характеристики при формировании структур в результате экспонирования, что определило ориентацию на исследуемые композиции как голографический материал и детальное исследование процесса голографической записи [4]. Проведены исследования динамики изменения дифракционной эффективности в процессе записи для различных фотополимеризующихся композиций. Исследованы зависимости дифракционной эффективности от состава композиций, длины волны и частоты записывающего излучения, толщины слоя, последующей обработки. Получены значения дифракционной эффективности более 60%. На рис. 5, а, приведен вид зависимости дифракционной эффективности от экспозиции и последующей обработки.

Эксперименты показали, что введение наночастиц и увеличение их концентрации приводит к увеличению дифракционной эффективности и принципиально иному механизму формирования структур по сравнению с мономерными композициями, определяемому процессами самоорганизации наночастиц в интерференционном поле. Экспериментально подтвержден механизм диффузии наночастиц из освещенных

областей в неосвещенные [5]. На рис. 6 приведено изображение структуры, полученное методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). В промежутках между элементами видно скопление наночастиц.

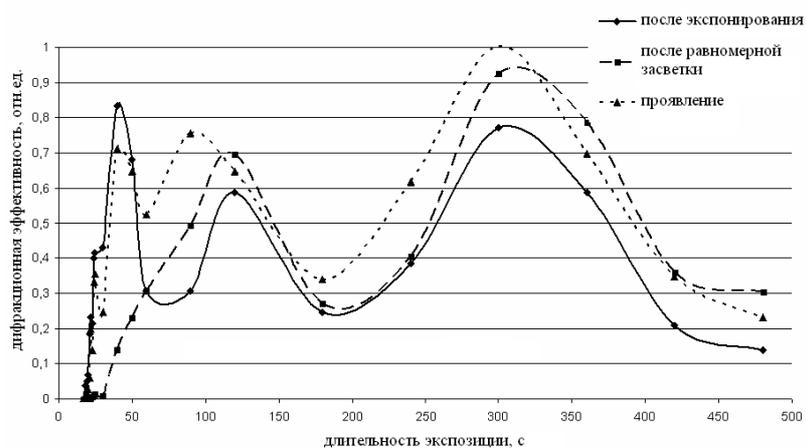


Рис. 5. Зависимость дифракционной эффективности от экспозиции для трехкомпонентного нанокompозита. Длина волны 325 нм, период структур 2 мкм, толщина слоя 20 мкм

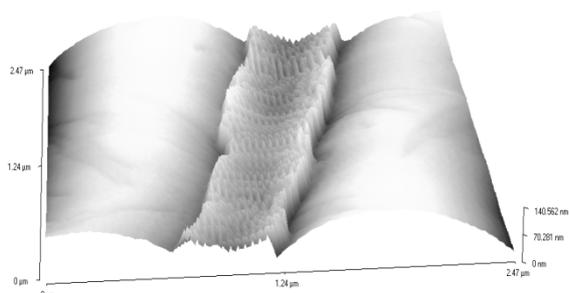


Рис. 6. АСМ-изображение структуры, записанной на нанокompозитном материале

Рассмотренный выше метод глубокой литографии, основанный на проекции двумерного распределения интенсивности излучения на поверхность фотоотверждаемого материала с большой толщиной, позволяет получать объемные полимерные элементы, но с постоянным сечением по высоте. В работе исследована возможность получения объемных элементов произвольной конфигурации. Предлагаемый метод основан на проекции трехмерного распределения интенсивности в объем фотоотверждаемого материала. Трехмерное распределение интенсивности формировалось голографическим изображением. Принцип голографической проекции показан на рис. 7.

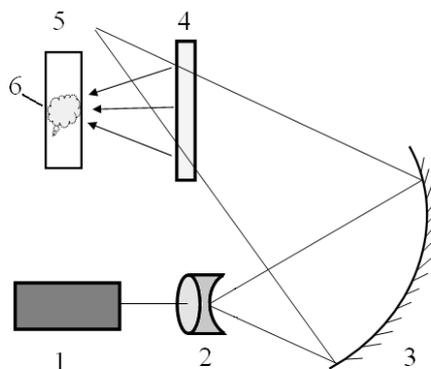


Рис. 7. Схема голографической проекции: 1 – источник монохроматического излучения; 2 – микрообъектив; 3 – сферическое зеркало; 4 – проектирующая голограмма; 5 – восстановленное изображение; 6 – фотоотверждаемый материал

Определены оптимальные схемы голографической проекции. Предложены и реализованы принципы ограничения глубины отверждения. Получены первые образцы объемных элементов. На рис. 8 приведены фотографии проектируемого изображения и полимерных элементов.

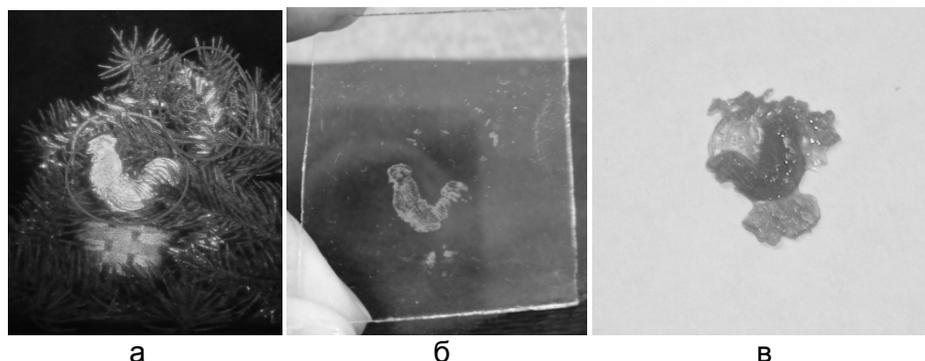


Рис. 8. Вид восстановленного изображения (а) и трехмерных полимерных элементов (б, в)

Предлагаемый метод имеет преимущества по сравнению с методами стереолитографии, основанными на поточечном формировании трехмерных элементов лазерным пучком, а именно – существенное уменьшение трудоемкости процесса.

Заключение

Получены новые закономерности и представления о процессах и механизмах формирования полимерных элементов в фотоотверждаемых композиционных материалах на основе акриловых мономеров методами глубокой интерференционной и голографической литографии. Определены зависимости характеристик полимерных структур от состава фотоотверждаемой композиции и условий записи. Определены основы технологий получения малоразмерных и объемных полимерных элементов. Результаты работы использованы для получения элементов формирования пучков в терагерцовых системах, элементов микролазеров, защитных элементов, фотоннокристаллических волокон, спектральных фильтров.

Литература

1. Romanato F., Businaro L., Tormen M., Perennes F., Matteucci M., Marmioli B., Balsev S., Di Fabrizio E. Fabrication of 3D micro and nanostructures for MEMS and MOEMS: an approach based on combined lithographies // *Journal of Physics: Conference series International MEMS conference 2006.* – V. 34. – P. 904–911.
2. Бурункова Ю.Э., Семьина С.А., Капорский Л.Н., Левичев В.В. Наномодифицированные оптические акрилатные композиты // *Оптический журнал.* – 2008. – Т. 75. – № 10. – С. 54–58.
3. Lai N.D., Zheng T.S., Do D.B., Lin J.H., Hsu C.C. Fabrication of desired three-dimensional structures by holographic assembly technique // *Applied Physics A Material science and processing.* – 2010. – № 100. – P. 171–175.
4. Vorzobova N.D., Bulgakova V.G., Burunkova Yu.E., Moskalenko A.I. The process of periodic structures fabrication in photocurable composite materials // *Physics and Chemistry of Solid State.* – 2012. – V. 13. – № 1. – P. 265–268.
5. Tomita Y., Suzuki N. Holographic manipulation of nanoparticle distribution morphology in nanoparticle-dispersed photopolymers // *Optics letters.* – 2005. – V. 30. – № 8. – P. 839–841.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗМЕРОВ НАНОНЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ПОГЛОЩАЮЩИХ И РАССЕИВАЮЩИХ СРЕДАХ

Д.Н. Вавулин

Научный руководитель – к.ф.-м.н., ст.н.с. С.А. Чивилихин

В работе предложен оригинальный метод определения величины наноразмерных неоднородностей в рассеивающей и поглощающей среде путем сравнения теоретической и экспериментальной зависимостей коэффициента пропускания среды от длины волны света. Метод был опробован на образце нанопористого стекла и дал удовлетворительные результаты. Также были проведены численные оценки данного явления с помощью программного пакета CST Microwave Studio.

Для реализации данного метода была получена теоретическая зависимость коэффициента пропускания от коэффициентов рассеяния и поглощения и экспериментальная зависимость коэффициента пропускания от длины волны света. Основная идея метода заключается в следующем: при больших длинах волн поглощение среды становится пренебрежимо мало и ослабление света происходит за счет рассеяния на неоднородностях среды. Таким образом, можно определить экспериментально коэффициент рассеяния, исследуя пропускание пластины в диапазоне больших длин волн.

Так как характерный размер неоднородностей среды много меньше длины световой волны, рассеяние имеет рэлеевский характер. Следовательно, коэффициент рассеяния обратно пропорционален четвертой степени длины волны. Далее, коэффициенты пропорциональности и поглощения подбираются таким образом, чтобы обеспечить наилучшее согласование между теоретической и экспериментальной зависимостями коэффициента рассеяния от длины волны. А так как рассеяние имеет рэлеевский характер, то полученный коэффициент пропорциональности зависит от шестой степени диаметра пор. Из полученных результатов определяется средний размер пор.

Вывод теоретической зависимости коэффициента пропускания от параметров системы

Был получен коэффициент пропускания среды для случая плоскопараллельной пластины нанопористого стекла толщины h :

$$T = \frac{1}{ch(h\sqrt{3\gamma_a\gamma_s}) + \sqrt{\frac{\gamma_s}{3\gamma_a}}sh(h\sqrt{3\gamma_a\gamma_s})}.$$

Из полученного соотношения в совокупности с экспериментальными результатами предложенный авторами метод позволяет определить характерный размер пор.

Полученные экспериментальные и расчетные зависимости коэффициентов пропускания и поглощения приведены на рисунке.

Коэффициент рассеяния обратно пропорционален четвертой степени длины волны падающего света, $\gamma_s = \frac{C}{\lambda^4}$. Коэффициент C и спектральная зависимость коэффициента поглощения γ_a подобраны так, чтобы обеспечить наилучшее согласование между теоретической и экспериментальной зависимостями коэффициента

пропускания от длины волны света. Полученное при этом значение коэффициента C позволяет приблизительно оценить характерный размер неоднородности среды $D \sim C^{1/6}$.

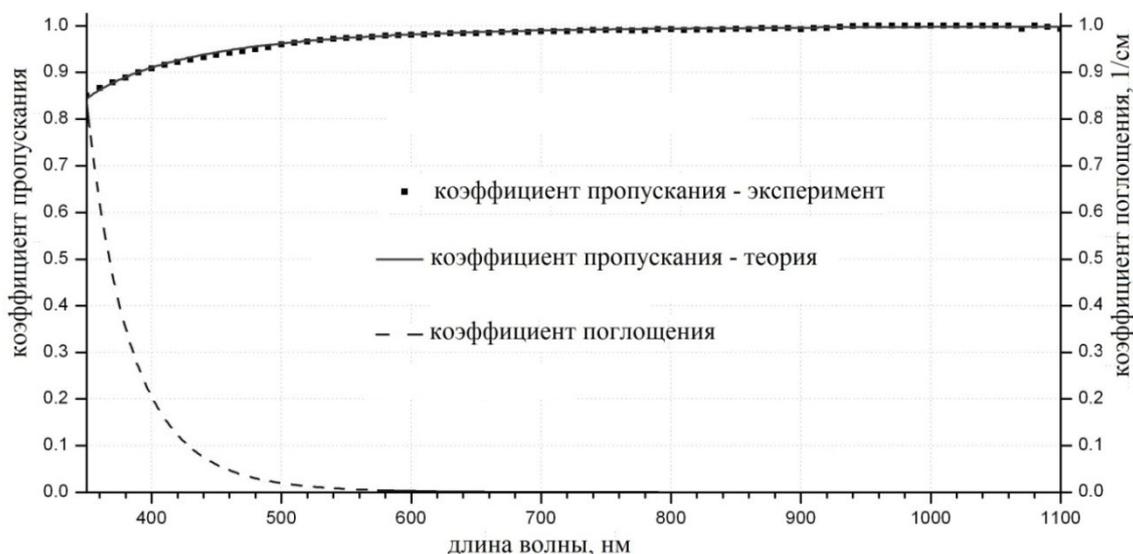


Рисунок. Экспериментальная и расчетная зависимости коэффициента пропускания, а также коэффициента поглощения нанопористого стекла от длины волны света

Расчетное значение среднего диаметра пор $D=13,5$ нм близко к среднему размеру пор (17 нм) нанопористого стекла. Это говорит о том, что предложенный метод обладает сравнительно высокой точностью при своей простоте и наглядности.

Литература

1. Ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами. – М: Издательство иностранной литературы, 1961. – 537 с.
2. Vavulin D.N., Aryslanova E.M. Determination of nanoscale inhomogeneities in scattering and absorbing media // 1st EOS Topical Meeting on Micro- and Nano-Optoelectronic Systems, Ringhotel Munte am Stadtwald. – Bremen: Germany, 2011.
3. Vavulin D.N., Alfimov A.V., Aryslanova E.M., Panteleyev A.V. Determination of nanoscale inhomogeneities in scattering and absorbing media // Rusnanotech. Nanotechnology international forum, Moscow, 2011, October 26-28.
4. Alfimov A.V., Aryslanova E.M., Vavulin D.N., Andreeva O.V., Lesnichiy V.V., Chivilikhin S.A., Popov I.Yu., Gusarov V.V. Light diffusion in colloidal suspensions of nanoparticles // European Optical Society Conferences at the World of Photonic Congress 2011. – Munch. Germany.
5. Альфимов А.В., Арысланова Е.М., Вавулин Д.Н., Андреева О.В., Темнова Д.Д., Лесничий В.В., Альмяшев В.И., Кириллова С.А., Чивилихин С.А., Попов И.Ю., Гусаров В.В. Диффузия света в среде с наноразмерными неоднородностями // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2011. – № 2 (72). – С. 105–109.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ЗА СЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ НАНОАНТЕНН

К.Р. Симовский¹, П.М. Ворошилов¹, М.Е. Гужва¹, Д.К. Мориц²

(¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики,

²Университет Аалто, Финляндия)

Научный руководитель – д.ф.-м.н., гл.н.с. П.А. Белов

(Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики)

В работе представлен новый метод эффективного захвата света в тонкопленочных солнечных элементах, основанный на использовании планарной периодической структуры из металлических наноантенн, работающих вдали от дипольных плазмонных резонансов. Принцип работы такой структуры основан на возбуждении коллективных мод массивами наноантенн и локализации электромагнитной энергии света между соседними металлическими элементами. Показано, что при использовании данного наноструктурированного покрытия происходит существенное увеличение тока короткого замыкания солнечного элемента во всем рабочем спектральном диапазоне фотоэлемента в сравнении с обычным антиотражающим покрытием. Предлагаемый способ повышения эффективности тонкопленочных солнечных элементов является наиболее совместимым с традиционной тонкопленочной технологией и экономически эффективным при массовом производстве.

Введение

В настоящее время ведутся активные разработки тонкопленочных солнечных элементов (ТСЭ) для создания солнечных панелей повышенной эффективности. ТСЭ нового поколения можно размещать на дешевых гибких подложках, а также наносить непосредственно на поверхности других изделий. Важным фактором является то, что при производстве таких фотоэлементов используется сравнительно малое количество очищенного полупроводника на единицу площади [1], что дает положительный экономический эффект и уменьшает загрязнение окружающей среды [1, 2].

Для создания эффективных тонких солнечных элементов следует использовать особое наноструктурированное покрытие, осуществляющее захват и концентрацию света, так как ни одно из простых антиотражающих покрытий (АОП), применявшихся ранее для такого типа солнечных элементов, неспособно предотвратить пропускание света через фотоэлектрический слой. Ранее было предложено несколько вариантов наноструктур для захвата света на основе фотонных кристаллов и нанотекстурированных полупроводниковых покрытий. Однако высокие затраты на изготовление таких структур и низкая совместимость с рулонной технологией препятствуют их использованию для повышения эффективности фотоэлементов. Большинство идей об эффективном захвате света ТСЭ основано на использовании плазмонных поглотителей [3], которые представляют собой планарный массив серебряных или золотых наночастиц, плазмонный резонанс которых приходится на рабочий диапазон солнечных элементов. Плазмонные поглотители можно разделить на два класса. К первому классу относятся неупорядоченные массивы наночастиц, в которых оптимизированы лишь усредненные параметры (средний размер наночастиц и их поверхностная плотность). Общим недостатком таких поглотителей являются высокие потери и значительное рассеяние. Ко второму классу плазмонных поглотителей относятся регулярные решетки серебряных или золотых наночастиц, называемые массивами наноантенн. Такие массивы наноантенн могут проявлять несколько плазмонных резонансов [4, 5], и они способны работать даже в качестве

диэлектрических оптических резонаторов [6]. Наноантенны не только позволяют достичь значительного увеличения фотоэлектрического поглощения, но они также могут концентрировать поле вне металлических элементов, избегая рассеяния солнечной энергии.

В настоящей работе предложен и теоретически исследован новый тип наноструктур, осуществляющих захват света на основе массивов наноантенн, работающих вдали от дипольных плазмонных резонансов. Показано, что такие безрезонансные поглотители могут значительно увеличить фотопоглощение в очень тонких (100–150 нм) полупроводниковых слоях и повысить общую спектральную эффективность солнечных элементов при малой толщине активного слоя.

Численное моделирование структуры

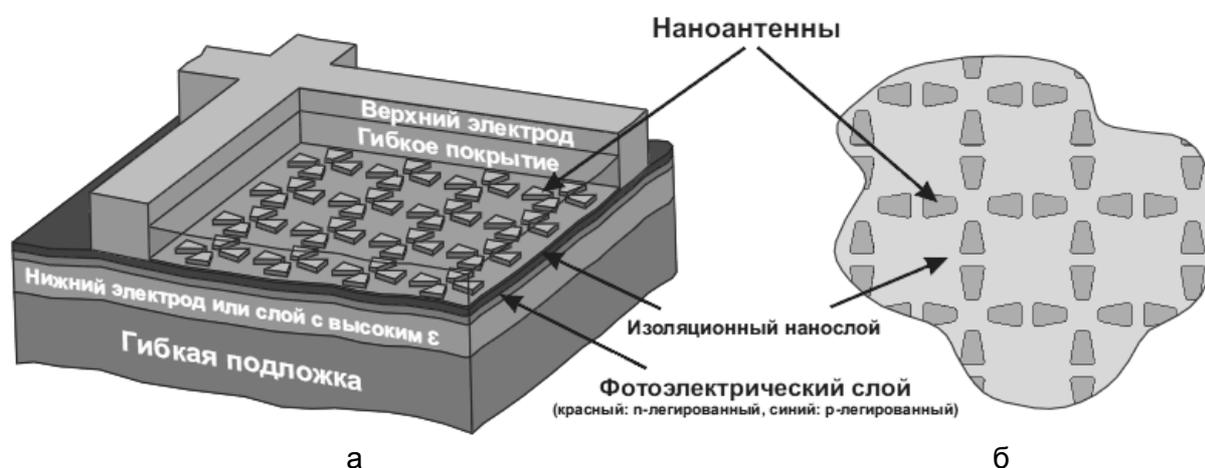


Рис. 1. Схема тонкопленочного солнечного элемента с особым наноструктурированным покрытием, осуществляющим захват и концентрацию света (а) и вид сверху на массив наноантенн (б)

Схематический вид наноструктуры для захвата света показан на рис. 1. Данная конструкция использует преимущества коллективных колебаний, возбуждаемых в видимом или инфракрасном (ИК) спектральном диапазоне плоской волной, падающей на решетку серебряных наноантенн. Шахматные моды, возникающие в данной наноструктуре, аналогичны коллективным осцилляциям, приведенным в работе [7] для массива параллельных металлических нанополосок, возникающих в дальнем ИК-диапазоне, называемом домино моды. Главная особенность таких мод заключается в выгодном распределении электрического поля, которое сконцентрировано в промежутках между нанополосками, и, следовательно, моды проявляют низкие потери.

В моделировании вычислялась энергия, поглощаемая элементарной ячейкой структуры с нанопокрывтием, осуществляющая концентрацию и захват света в рабочем диапазоне $\Delta\omega = [\omega_1, \omega_2]$ фотоэлектрического слоя. Энергия $A(\omega)$, поглощаемая в фотоэлектрическом слое, – интеграл локальной плотности мощности по объему V -слоя элементарной ячейки, а энергия $A_m(\omega)$, поглощаемая в наноантенне, – интеграл по объему металла в элементарной ячейке. В обоих случаях локальное электрическое поле вычисляется для нормально падающей плоской волны единичной амплитуды. Вычисления произведены для случая, когда на солнечном элементе расположена данная наноструктура для захвата света, и для случая, когда фотоэлемент покрыт просветляющим слоем, обладающим оптимизированными диэлектрической проницаемостью и толщиной.

Показано, что увеличение тока короткого замыкания при использовании структуры, осуществляющей захват света вместо просветляющего слоя, равно увеличению поглощенной мощности, усредненной в рабочем диапазоне $[\omega_1, \omega_2]$ с определенной весовой функцией $f(\omega)$. Ток короткого замыкания, собранный сеткой электрода с единичной площади фотоэлемента J_{sc} , равен [8, 9]

$$J_{sc} = \int_{\omega_1}^{\omega_2} A_p(\omega) R_s(\omega) d\omega, \quad A_p(\omega) = \frac{\omega \varepsilon_0 \varepsilon''(\omega)}{2} \int_V |E(\omega, \mathbf{r})|^2 dV. \quad (1)$$

Здесь $R_s(\omega)$ – спектральный отклик фотоэлектрического материала, чья комплексная диэлектрическая проницаемость имеет мнимую часть ε'' , а $E(\omega, \mathbf{r})$ – электрическое поле, создаваемое солнечным излучением в фотоэлектрическом слое. Поскольку задача является линейной, $E(\omega, \mathbf{r})$ может быть выражено через плотность тока солнечного излучения $I_s(\omega)$, как $E(\omega, \mathbf{r}) = \sqrt{I_s(\omega)} \mathbf{E}_n(\omega, \mathbf{r})$, где $\mathbf{E}_n(\omega, \mathbf{r})$ является нормированным полем, т.е. созданным падающей волной единичной амплитуды. Тогда можно написать $A_p(\omega) = A(\omega) I_s(\omega)$, где

$$A = \frac{\omega \varepsilon_0 \varepsilon''}{2} \int_V |\mathbf{E}_n(\omega, \mathbf{r})|^2 dV \quad (2)$$

есть спектральное фотопоглощение. Представим J_{sc} в форме:

$$J_{sc} = \int_{\omega_1}^{\omega_2} I_s(\omega) R_s(\omega) A(\omega) d\omega \equiv \Delta\omega \langle A \rangle. \quad (3)$$

Здесь $\langle A \rangle$ спектральное поглощение, усредненное в диапазоне $\Delta\omega$ с весовой функцией $f(\omega) \equiv I_s(\omega) R_s(\omega)$ – произведением двух известных данных: спектрального фототока материала активного слоя и спектра солнечного излучения у поверхности Земли. Для вычисления тока короткого замыкания было промоделировано поглощение единичной амплитуды в диапазоне $[\omega_1, \omega_2]$, и затем усреднен результат с весовой функцией $f(\omega)$. После вычисления $\langle A \rangle$, в случаях, когда ТСЭ покрыт структурой для захвата света и диэлектрическим АОП, получено усиление при замене АОП-структурой для захвата света:

$$\frac{J_{sc}^{LTS}}{J_{sc}^{ARC}} = G \equiv \frac{\langle A \rangle^{LTS}}{\langle A \rangle^{ARC}}. \quad (4)$$

Результаты и обсуждение

Численное моделирование осуществлялось в программных пакетах Ansoft HFSS и CST Microwave Studio. Элементарная ячейка структуры, осуществляющей захват света, представлена на рис. 2 и соответствует области ТСЭ, расположенной в промежутках между электродами для сбора фототока.

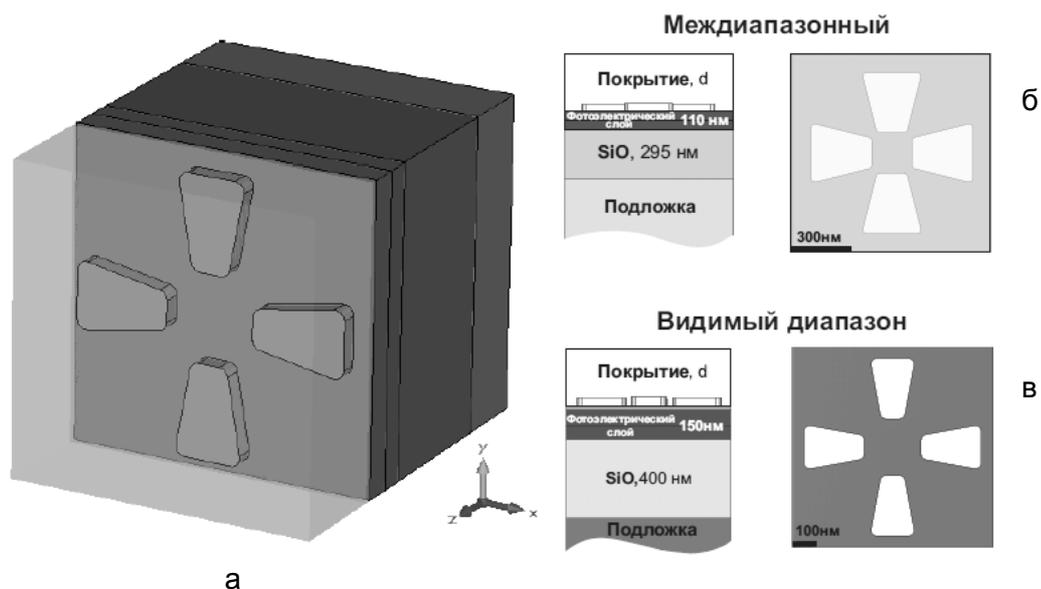


Рис. 2. Элементарная ячейка наноструктуры, используемая в симуляциях (а); междиапазонный (граница ближнего ИК- и видимого диапазонов) солнечный элемент на основе CIGS (б); солнечный элемент на основе Si для видимого диапазона в указанном масштабе (в)

Первой фотоэлектрической структурой, для которой началась оптимизация массива нанополостей, был n-p-слой CuInSe_2 110 нм толщины, расположенный между верхним полимерным покрытием и слоем монооксида кремния. Оптимальная толщина полимерного слоя $d=270$ нм, для SiO – 295 нм. Остальные размеры указаны на рис. 2. В диапазоне 855–665 нм свет улавливается нанополостями, где возбуждаются доминирующие моды (рис. 3).

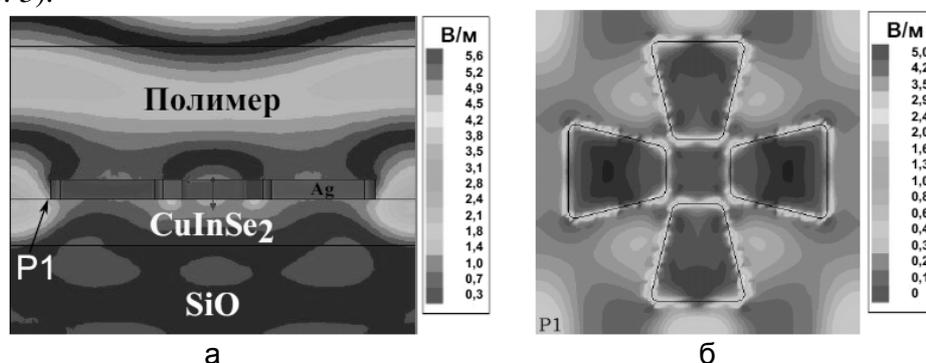


Рис. 3. Распределение электрического поля на длине волны 810 нм, иллюстрирующее концепцию наноструктурированного покрытия, осуществляющего захват и концентрацию света: вертикальное сечение (а); горизонтальная плоскость P1 (над поверхностью CuInSe_2) (б). Амплитуда падающей волны 1 В/м

На рис. 3, а, можно наблюдать сильное отражение поля (коэффициент отражения увеличивается за счет появления серебряных трапеций и на длине волны 810 нм достигает 30%). Несмотря на сильное отражение, эффект захвата света все же довольно значительный. Отмечено, что максимум локального поля, изображенный на рис. 3, расположен вне фотоэлектрического слоя. Важно то, что полезное поглощение полупроводником A значительно превышает вредное поглощение металлом A_m , и полное поглощение $A+A_m$ близко к единице. На длинах волн 1200–855 нм режим захвата света соответствует резонансу Фабри–Перо, когда нанополости возбуждаются слабо, и образуется стоячая волна между нижней поверхностью слоя SiO и верхней

поверхностью структуры. На рис. 4 показано спектральное фотопоглощение $A(\omega)$ для данной структуры. Оптимальное просветление достигнуто для полимерной пленки с показателем преломления $n=1,58$, толщиной $d=440$ нм. Получено, что при использовании данной наноструктуры усредненные в рабочем диапазоне потери на отражение $\Delta\omega$ составляют около 20%, потери на пропускание – 8%, и только 6% падающей энергии поглощается в серебре. Тогда полезное поглощение $\langle A \rangle$ достигает 66% падающей энергии. С АОП потери на отражение равны 15%, однако потери на пропускание возрастают до 36%. В результате этого поглощение составило 49%. Коэффициент усиления наноструктурой достиг 34%. Используя формулу (4), получили $G=1,29$, что обусловлено наличием весовой функции $f(\omega)$ в усредненном поглощении $\langle A \rangle$. В сравнении с фотоэлементом без покрытия наноструктура дала усиление $G=1,7$.

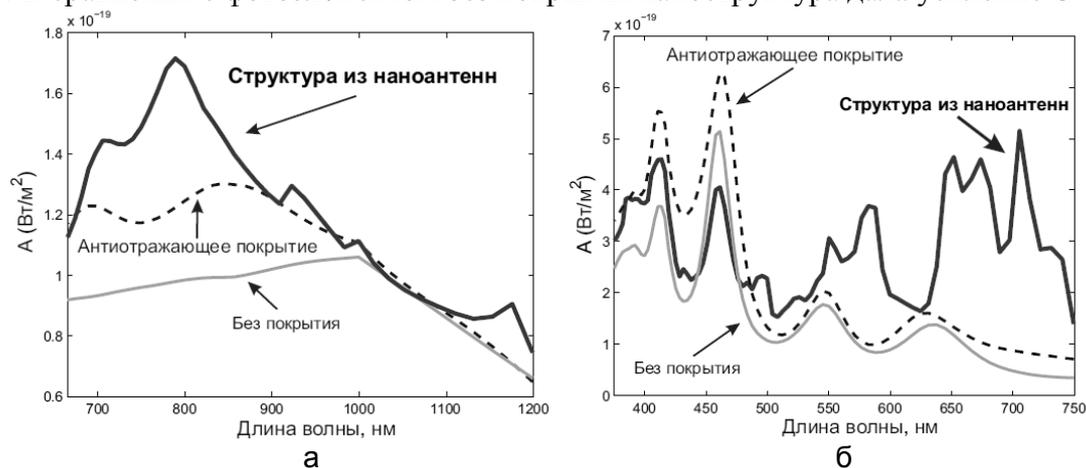


Рис. 4. Поглощение в фотоэлектрическом слое в трех случаях: при использовании наноструктуры, осуществляющей захват света; при наличии однослойного АОП и без применения каких-либо покрытий: для междиазонного солнечного элемента (граница ближнего ИК- и видимого диапазонов) (а); для кремниевого ТСЭ в видимом диапазоне длин волн (б)

Следующий численный образец структуры для захвата света соответствует кремниевому солнечному элементу, рабочий диапазон которого приходится на видимый спектр излучения. Целью этого исследования являлась демонстрация того, что настоящая концепция подходит для различных типов ТСЭ, оперирующих в различных частотных диапазонах. Размеры для данного случая показаны на рис. 2. Диэлектрическим покрытием в структуре для захвата света являлся аморфный кремнезем. АОП в соответствующем солнечном элементе без структуры служил также кремнезем.

На рис. 4 показано фотопоглощение $A(\omega)$ для данной структуры. Лучшая толщина покрытия структуры для захвата света равна $d=325$ нм, однако было получено, что результат слабо зависит от d в диапазоне 325–390 нм. Это означает, что в данном случае нанометровая точность не требуется. При наличии нанополосок эффект захвата света соответствует домино модам в диапазоне 780–500 нм. В районе 500–375 нм нанополоски слабо возбуждаются. В отличие от междиазонного солнечного элемента, второй механизм захвата света (резонанс Фабри–Перо) не может быть реализован в этой конструкции. В связи с этим наличие нанополосок ухудшает фотопоглощение в диапазоне 500–375 нм. Данное обстоятельство соотносится с дополнительным отражением от серебряных элементов. Однако ухудшение поглощения в данном диапазоне не столь существенно, и, в целом, во всем рабочем диапазоне 780–375 нм доминирует эффект захвата света. Усиление фотопоглощения, вычисленное без весовой функции равно 12%. Наличие весовой функции путем

использования формулы (3) дает значение $G=1,17$. По сравнению со случаем без покрытия, данная структура для захвата света дает усиление 64%.

Заключение

В работе был предложен и теоретически изучен новый дизайн наноструктуры, осуществляющей захват и концентрацию света в тонкопленочных солнечных элементах, которая обладает выгодными преимуществами. Данная структура позволяет существенно увеличить фотопоглощение в слоях толщиной около 100–200 нм. Конструкция подходит для различных тонкопленочных солнечных элементов и может быть применена для фотоэлементов, работающих в видимом, на границе видимого и ближнего ИК-, и даже в ИК-диапазонах. Более того, режим захвата света является довольно широкополосным, так как не связан с плазмонными или другими резонансами. Захват света происходит при возбуждении так называемых домино мод в клиновидных нанополосках. Такие моды могут возбуждаться при правильном выборе геометрических параметров металлических элементов. Показано, что данный массив нанополосок работает значительно лучше, чем антиотражающие покрытия. Настоящее конструкторское решение является совместимым с технологией массового производства.

Литература

1. Marti A., Luque A. Next generation photovoltaics. – B&Ph.: Institute of physics publishing, 2004. – 344 p.
2. Nelson J. The Physics of Solar Cells. – Imperial College Press, 2003. – 363 p.
3. Atwater H.A., Polman A. Plasmonics for improved photovoltaic devices // *Nature Mat.* – V. 9. – 2010. – P. 205–213.
4. Pala R.A., White J., Barnard E., Liu J., Brongersma M.L. Design of Plasmonic Thin-Film Solar Cells with Broadband Absorption Enhancements // *Adv. Mater.* – V. 21. – 2009. – P. 3504–3509.
5. Ferry V.E., Sweatlock L.A., Pacifici D., Atwater H.A. Plasmonic Nanostructure Design for Efficient Light Coupling into Solar Cells // *Nano Lett.* – V. 8. – 2008. – P. 4391–4397.
6. Grandidier J., Callahan D.M., Munday J.N., Atwater H.A. Light Absorption Enhancement in Thin-Film Solar Cells Using Whispering Gallery Modes in Dielectric Nanospheres // *Adv. Mater.* – 2011. – V. 23. – P. 1272–1276.
7. Martin-Cano D., Nesterov M.L., Fernandez-Dominguez A.I., Garcia-Vidal F.J., Martin-Moreno L., Moreno Domino E. plasmons for subwavelength terahertz circuitry // *Optics Express.* – V. 18. – 2010. – P. 754–764.
8. Akimov Yu.A., Ostrikov K., Li E.P. Surface Plasmon Enhancement of Optical Absorption in Thin-Film Silicon Solar Cells // *Plasmonics.* – V. 4. – 2009. – P. 107–113.
9. Pala R.A., White J., Barnard E., J. Liu, Brongersma M.L. Design of Plasmonic Thin-Film Solar Cells with Broadband Absorption Enhancements // *Adv. Mater.* – 2009. – V. 21. – № 34. – P. 3504–3509.

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe/ZnS В ПОРИСТОМ СТЕКЛЕ

Ю.А. Громова

Научный руководитель – к.т.н., доцент А.О. Орлова

Изучены спектрально-люминесцентные свойства полупроводниковых квантовых точек CdSe/ZnS, внедренных в боросиликатные пористые стекла из коллоидного раствора. Продемонстрировано, что в пористых стеклах не происходит агломерации квантовых точек и ухудшения оптических свойств.

Ключевые слова: квантовые точки, пористые стекла.

Введение

Коллоидные полупроводниковые квантовые точки (КТ) представляют собой нанокристаллы, в которых наблюдается квантово-размерный эффект. КТ являются уникальными люминофорами, оптические характеристики которых зависят от размера нанокристалла. Немаловажны также высокий квантовый выход люминесценции, высокая фотостабильность и химическая устойчивость [1]. В связи с этим КТ широко используются в качестве люминесцентных меток и сенсорных элементов в экологическом мониторинге и медицине [2]. Широко распространено внедрение КТ в различные пористые матрицы. Важно, чтобы при внедрении КТ в матрицу не происходило агломерации нанокристаллов, что приводит к расплыванию полосы люминесценции, красному сдвигу спектра и снижению квантового выхода люминесценции [3]. Поиск новых матриц для внедрения КТ без ухудшения оптических свойств является актуальной исследовательской задачей.

Перспективной матрицей для внедрения коллоидных нанокристаллов из раствора являются пористые стекла [4]. Нанопористые силикатные стекла обладают свойствами, широко востребованными в современных научно-технических разработках:

- высокая механическая прочность в сочетании с химической стабильностью;
- прозрачность в видимой и ближней ИК-областях спектра;
- возможность варьировать размер пор и свободный объем пор в широком диапазоне;
- возможность получения образцов различных геометрических размеров [5].

Внедрение ярко люминесцирующих полупроводниковых КТ в пористые стекла позволит получить новый композиционный материал, уникальный по своим свойствам.

В работе исследованы спектрально-люминесцентные свойства гидрофобных CdSe/ZnS квантовых точек, внедренных в пористое боросиликатное стекло. Показано, что при внедрении КТ в пористое стекло не происходит ухудшения оптических характеристик КТ, а полученные образцы перспективны для дальнейших исследований.

Материалы и методы

Используемые в работе коллоидные полупроводниковые квантовые точки CdSe/ZnS синтезированы согласно процедуре, описанной в работе [6]. КТ имеют следующие характеристики: диаметр ядра 2,5 нм; положение длинноволновой полосы поглощения ~510 нм, полосы люминесценции ~530 нм; молярный коэффициент экстинкции $\varepsilon_{510}=4,7 \cdot 10^4 \text{ М}^{-1} \cdot \text{л} \cdot \text{см}^{-1}$; квантовый выход люминесценции в растворе хлороформа – 13%.

В качестве матрицы было использовано пористое стекло НПС-17 [5]. Средний размер пор – 17 нм, свободный объем образца 55%, удельная поверхность пор 100–120 м²/г. В работе использовались образцы размером 10×10 мм, толщиной 1 мм.

Внедрение полупроводниковых квантовых точек CdSe/ZnS со средним диаметром ядра 2,5 нм в пористые стекла осуществлялся многократным пропитыванием образцов стекол раствором КТ в хлороформе ($C_{QDs} \sim 10^{-6}$ М/л).

Спектры поглощения и люминесценции образцов регистрировались на спектрофотометре UV-Probe (Shimadzu, Japan) и спектрофлуориметре «ПАНОРАМА» (Люмэкс, Россия) соответственно. Для регистрации времен затухания люминесценции образцов использовался сканирующий люминесцентный микроскоп Micro Time 100 (PicoQuant, Germany). Для возбуждения люминесценции образцов использовался полупроводниковый импульсный лазер с длиной волны 405 нм с частотой следования импульсов 2,5 МГц. Область регистрации люминесценции выделялась с помощью интерференционных светофильтров с шириной на половине высоты 10 нм в диапазоне длин волн 500–570 нм. Среднее время затухания люминесценции рассчитывалось по формуле: $\langle \tau \rangle = \sum A_i \tau_i^2 / \sum A_i \tau_i$, где A_i и t_i – амплитуда и время затухания i -ой компоненты соответственно.

Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены спектры поглощения и фотолюминесценции образца пористого стекла, пропитанного коллоидным раствором CdSe/ZnS КТ в хлороформе.

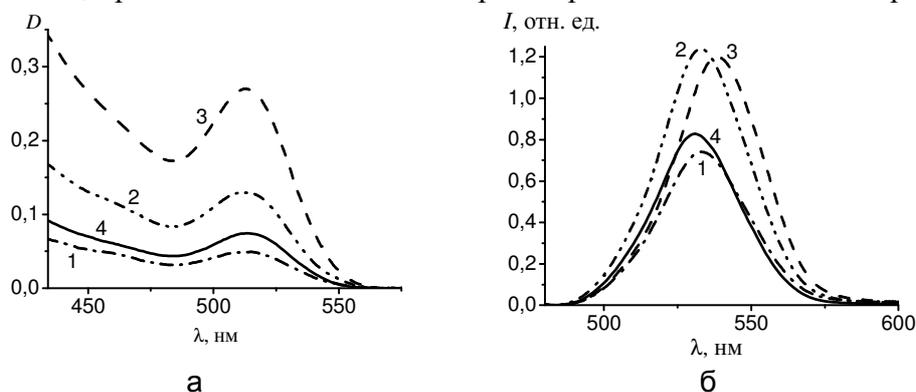


Рис. 1. Спектры поглощения (а) и спектры фотолюминесценции (б) CdSe/ZnS КТ с диаметром ядра 2,5 нм, внедренных в пористое боросиликатное стекло: кривые 1–3 результат последовательного пропитывания образца пористого стекла коллоидным раствором КТ в хлороформе (3, 7, 18 – число погружений образца в раствор КТ соответственно); кривая 4 – раствор КТ в хлороформе

В результате последовательного пропитывания образцов пористого стекла раствором КТ в хлороформе в образце наблюдается увеличение концентрации КТ. Об этом свидетельствует увеличение оптической плотности в спектрах поглощения образца пористого стекла (рис. 1, а), которое сопровождается увеличением интенсивности фотолюминесценции КТ. Однако рост интенсивности люминесценции квантовых точек непропорционален концентрации нанокристаллов в образце. С увеличением оптической плотности в образце свыше 0,13 наблюдается снижение интенсивности сигнала люминесценции и сдвиг максимума полосы фотолюминесценции КТ в длинноволновую область до 8 нм по сравнению с положением полосы в растворе хлороформа (рис. 1, б). Такое поведение обычно связывают или с агломерацией нанокристаллов [3], или с реабсорбцией [7].

Хорошо известно, что ансамбль квантовых точек, характеризуемый средним размером ядра нанокристаллов содержит КТ слегка отличных размеров, которые излучают на различных длинах волн внутри контура фотолюминесценции всего ансамбля. Таким образом, регистрация фотолюминесценции в узком спектральном диапазоне внутри полосы фотолюминесценции ансамбля КТ предоставляет

информацию о люминесценции подансамбля КТ с более узким распределением размеров. Использование интерференционных фильтров – один из способов выделения люминесценции подансамбля КТ определенного размера.

На рис. 2 приведены зависимости среднего времени затухания люминесценции CdSe/ZnS КТ в растворе хлороформа и в образце пористого стекла от длины волны регистрации. В обоих случаях распад люминесценции КТ аппроксимировался биэкспоненциальной зависимостью.

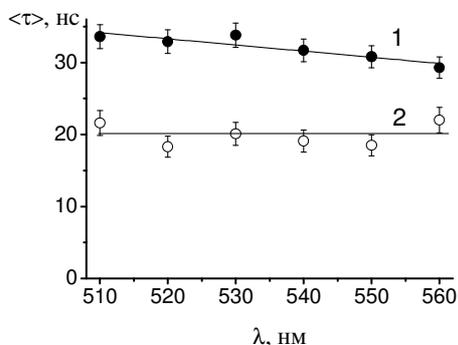


Рис. 2. Зависимость среднего времени затухания люминесценции CdSe/ZnS КТ с диаметром ядра 2,5 нм от длины волны регистрации, возбуждение импульсным полупроводниковым лазером с длиной волны 405 нм: кривая 1 – в пористом стекле; кривая 2 – в растворе хлороформа

Видно, что в пористом стекле среднее время затухания люминесценции КТ увеличилось на 40% по сравнению с раствором, и появилась зависимость от длины волны регистрации. Важно, что среднее время затухания люминесценции нанокристаллов не зависит от концентрации нанокристаллов в образце. Таким образом, снижение интенсивности сигнала люминесценции и сдвиг максимума люминесценции в длинноволновую область при увеличении концентрации КТ в образце однозначно связывается с реабсорбцией, а не с образованием макроагрегатов.

Авторы полагают, что при внедрении КТ в образец пористого стекла происходит адсорбция КТ на внутреннюю поверхность пор, что приводит к частичной пассивации поверхности КТ и, как следствие, к уменьшению числа каналов безызлучательной дезактивации возбужденного состояния КТ, а также к увеличению среднего времени затухания люминесценции КТ. При этом КТ меньшего размера могут более эффективно встраиваться в микронеровности на стенках пор, что приводит к лучшей пассивации поверхности и большему росту среднего времени затухания люминесценции (рис. 2, кривая 1). Таким образом, экспериментальные данные свидетельствуют о том, что CdSe/ZnS КТ, внедренные в пористые стекла из коллоидного раствора, находятся в квази-изолированном состоянии и не взаимодействуют друг с другом.

Заключение

Пропитывание образцов пористого боросиликатного стекла коллоидным раствором полупроводниковых квантовых точек CdSe/ZnS в хлороформе приводит к адсорбции квантовых точек на внутренней поверхности пор стекла в квази-изолированном состоянии. При этом на стенках пор за счет частичной пассивации поверхности квантовых точек наблюдается 40% увеличение среднего времени затухания люминесценции квантовых точек за счет частичной пассивации поверхности.

Исследование показало, что боросиликатные пористые стекла являются подходящей матрицей для внедрения гидрофобных нанокристаллов. В дальнейшем планируется провести исследование взаимодействия квантовых точек, внедренных в

пористые стекла с различными органическими молекулами, с целью изучения вопросов, связанных с переносом энергии в системе квантовые точки/органическая молекула и поиска возможных практических применений данной системы.

Литература

1. Resch-Genger U. et al. Quantum dots versus organic dyes as fluorescent labels // Nat Meth. – 2008. – V. 5. – № 9. – P. 763–775.
2. Schröder G.F., Grubmüller H. FRETsg: Biomolecular structure model building from multiple FRET experiments // Computer Physics Communications. – 2004. – V. 158. – № 3. – P. 150–157.
3. Kagan C.R., Murray C.B., Bawendi M.G. Long-range resonance transfer of electronic excitations in close-packed CdSe quantum-dot solids // Physical Review B. – 1996. – V. 54. – № 12. – P. 8633–8643.
4. Enke D., Janowski F., Schwieger W. Porous glasses in the 21st century – a short review // Microporous and Mesoporous Materials. – 2003. – V. 60. – № 1. – P. 19–30.
5. Андреева О.В., Обыкновенная И.Е. Нанопористые матрицы НПС-7 и НПС-17 – возможности использования в оптическом эксперименте // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2010. – Т. 1. – № 1. – С. 37–53.
6. Dabbousi B.O. et al. (CdSe)ZnS Core–Shell Quantum Dots: Synthesis and Characterization of a Size Series of Highly Luminescent Nanocrystallites // The Journal of Physical Chemistry B. – 1997. – V. 101. – № 46. – P. 9463–9475.
7. Parker C.A. Photoluminescence of solution. – Amsterdam-London-New York: Elsiliver puplisher company. – 1968. – 510 p.

УДК 535.317

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ЦЕНТРАЛЬНОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ ВХОДНОГО ЗРАЧКА НА ФУНКЦИЮ ПЕРЕДАЧИ МОДУЛЯЦИИ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

К.В. Ежова

Научный консультант – д.т.н., профессор В.А. Зверев

Рассмотрено влияние коэффициента центрального экранирования зрачка на качество изображения системы. Приведены зависимости величины остаточной волновой аберрации от коэффициента центрального экранирования.

Ключевые слова: оптическая система, коэффициент экранирования.

Введение

Важным параметром зеркальных и зеркально-линзовых оптических систем является величина коэффициента центрального экранирования зрачка. Принято считать, что если волновая аберрация изображения удовлетворяет критерию Рэля (не превышает $0,25\lambda$), то коэффициент экранирования k_3 не должен превышать 0,3.

Основная часть

Для компенсации сферической аберрации, как показано в работе [1], в схемы зеркальных и зеркально-линзовых оптических систем вносят плоскопараллельные пластины.

В предельном случае, толщина пластинки равна:

$$d = \frac{n^3}{n^2 - 1} \frac{1 - k_3}{4\alpha}. \quad (1)$$

Очевидно, что чем меньше величина коэффициента экранирования, тем больше требуемая толщина пластинки. Большая толщина пластинки может оказаться важным недостатком рассматриваемой оптической системы [2–4]. Однако во многих случаях нет необходимости в предельной разрешающей способности изображения, но требуется достаточно высокая освещенность его. При этом волновая aberrация может существенно превышать критерий Рэлея. Можно предполагать, что в этом случае характер влияния центрального экранирования на качество изображения будет отличаться от характера влияния при предельной разрешающей способности.

Для исследования этого явления применена оптическая система, состоящая из отражающей поверхности сферической формы. Для определенности в знаках величин дополним сферическое зеркало плоским. Пусть фокусное расстояние такой системы равно $f' = 1000$ мм. Пусть при равной нулю на краю зрачка волновая aberrация на зоне зрачка равна $W = 2,5\lambda$. Тогда, используя в качестве коррекционных параметров диаметр входного зрачка и величину смещения плоскости наилучшей установки, получаем оптическую систему, конструктивные параметры и aberrационные характеристики которой представлены в табл. 1 и табл. 2.

Таблица 1. Конструктивные параметры системы

N	r , мм	d , мм	n
			1,00
1	-2000	-500	-1
2	0	64,45	1,00

Таблица 2. Aberrационные характеристики системы

S0	Z0	Z'0(0)	S'0(0)	F'(0)	V3P(0)	S'A		
	0	-500,0	500,00	1000,0	1,000	499,17		
MU=0	H	ДС'(0)	TGC'	Y'(0)	W(0)	ЭТА %		
	115	-0,828	0,115	-0,0956	$0,113 \cdot 10^{-5}$	0,331		
	99,5	-0,414	0,0998	-0,0413	1,88	0,248		
	81,2	$0,323 \cdot 10^{-3}$	0,0814	$-0,279 \cdot 10^{-4}$	2,5	0,165		
	57,5	0,414	0,0575	0,0238	1,87	0,0826		
MU	Z	Z'	TGC'	Y'(0)	ДИС	Z'M	Z'S	Z'M-Z'S
$0,707 \cdot 10^{-4}$	0	-500,0	$-0,71 \cdot 10^{-4}$	0,0707	0	0,827	0,827	$-0,500 \cdot 10^{-5}$
$0,100 \cdot 10^{-3}$	0	-500,0	$-0,10 \cdot 10^{-3}$	0,0999	0	0,827	0,827	$-0,100 \cdot 10^{-4}$

Изменяя в масштабе конструктивные параметры системы, получаем требуемую величину волновой aberrации на зоне зрачка при сохранении условий формирования изображения. Нулевая волновая aberrация в гауссовом изображении точки достигается заменой сферической поверхности отражающим параболоидом вращения.

На рис. 1 приведены кривые функции передачи модуляции (ФПМ) изображения при трех значениях волновой aberrации: при $W=0$, при $W=0,25\lambda$ и при $W=1,00\lambda$. Анализируя вид кривой 3, можно считать, что при $W=1,00\lambda$ предельное разрешение соответствует пространственной частоте 80 лин/мм.

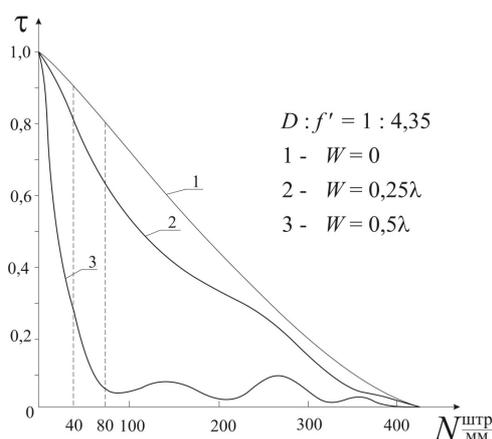


Рис. 1. Кривые ФПМ изображения при трех значениях волновой aberrации: 1 – $W = 0$; 2 – $W = 0,25\lambda$; 3 – $W = 1,00\lambda$

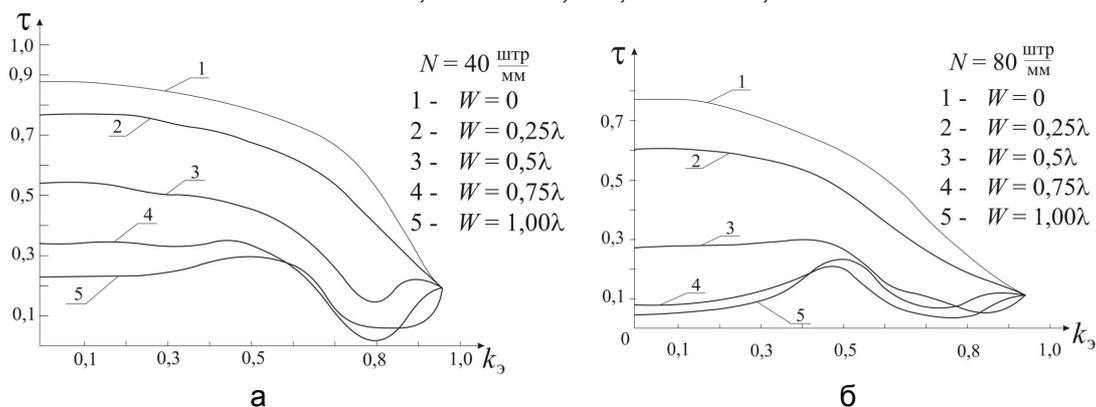


Рис. 2. Зависимость значения ФПМ изображения при пространственной частоте 40 лин/мм (а) и 80 лин/мм (б) и при волновой aberrации $W = 0; 0,25\lambda; 0,50\lambda; 0,75\lambda; 1,00\lambda$ от коэффициента центрального экранирования зрачка по диаметру

На рис. 2 представлены кривые зависимости ФПМ изображения от величины коэффициента центрального экранирования зрачка при волновой aberrации $W=0; 0,25\lambda; 0,50\lambda; 0,75\lambda; 1,00\lambda$ при пространственной частоте изображения $N=40$ лин/мм и $N=80$ лин/мм соответственно. Из вида кривых следует, что при волновой aberrации $W=0,50\lambda$ при изменении коэффициента экранирования в диапазоне $0 \leq k_3 \leq 0,5$ ФПМ изображения при частоте $N=40$ лин/мм уменьшается от нуля до 14%, а при частоте $N=80$ лин/мм остается практически неизменной. При волновой aberrации $W=0,75\lambda$ при изменении коэффициента экранирования в том же диапазоне ФПМ изображения при частоте $N=40$ лин/мм остается практически неизменной и равной $\tau=0,34$, а при $N=80$ лин/мм при начальном значении $\tau=0,08$ увеличивается в 2,5 раза. При остаточной волновой aberrации $W \geq 1,00\lambda$ при изменении коэффициента экранирования в диапазоне $0 \leq k_3 \leq 0,5$ ФПМ изображения при частоте $N=40$ лин/мм при начальном значении $\tau=0,23$ становится равной $\tau=0,30$, а при $N=80$ лин/мм при начальном значении $\tau=0,04$ увеличивается в 6 раз.

Из анализа результатов выполненных вычислений следует, что при остаточной волновой aberrации $W \geq 0,75\lambda$ экранирование центральной зоны зрачка при $k_3 \approx 0,5$ повышает контраст изображения. При этом толщина пластинки уменьшается примерно в полтора раза.

Однако в этом случае угловое увеличение изображения, образованного оптической системой, тоже уменьшится в полтора раза, а, следовательно, снизится эффективность ее применения.

Важно заметить, что основную роль в компенсации сферической aberrации изображения, образованного отражающей сферической поверхностью, играет первая поверхность плоскопараллельной пластинки. Заменяем вторую поверхность пластинки сферической поверхностью внутреннего отражения, образовав афокальную систему, как показано на рис. 4.

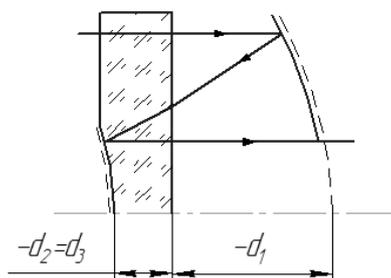


Рис. 4. Афокальная насадка на основе плоскопараллельной пластины с зеркалом внутреннего отражения

Толщина пластины в такой системе, наоборот, слишком мала. Исходя из этого, уменьшая экранирование в системе, можно выдержать достаточную толщину пластины и добиться больших значений углового увеличения.

Схема и aberrационные характеристики объектива на основе афокальной насадки второго типа представлены на рис. 5 и в табл. 3 соответственно.

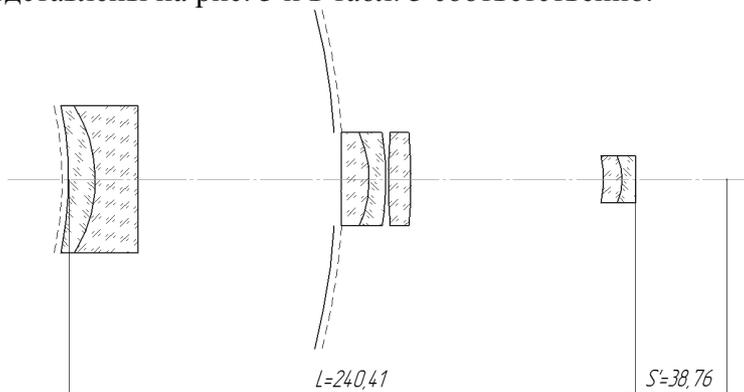


Рис. 5. Схема зеркально-линзового объектива на основе афокальной насадки с использованием плоскопараллельной пластины с зеркалом внутреннего отражения.
 $f'=500$, $2\omega=3^\circ$, $1:k = 1:5$

Таблица 3. Абберационные характеристики полученного объектива

S0	Z0	Z'0(0)	S'0(0)	F'(0)	V3P(0)	S'A			
	1217	-53,99	33,761	500,16	0,1854	38,761			
MU=0	H	ДС'(0)	TGC'	Y'(0)	W(0)	ЭТА %	Y'(1-0)	Y'(2-0)	Y'(2-1)
	50	0,139	0,1	0,0139	-0,0071	$0,933 \cdot 10^{-3}$	-0,0114	0,0156	0,027
	43,3	0,0215	0,0869	0,00187	-0,177	0,0224	-0,00681	0,0094	0,0162
	35,4	-0,0354	0,0709	-0,0025	-0,15	0,0289	-0,00346	0,00474	0,0082
	25	-0,0404	0,0501	-0,002	-0,0544	0,0213	-0,00116	0,00154	0,0027
MU	TGC'	Y'(0)	ДИС	Z'M	Z'S	Z'M-Z'S	Y'(1-0)	Y'(2-0)	Y'(2-1)
0,0124	-0,0668	6,19	0,00357	-0,0073	-0,0073	-0,00458	0,00372	0,00361	$-0,108 \cdot 10^{-3}$
0,0175	-0,0946	8,76	0,00995	-0,0058	-0,0058	-0,00292	0,00518	0,00524	$0,645 \cdot 10^{-4}$

Литература

1. Зверев В.А., Хлусова Н.И. Применение плоскопараллельной пластинки для исправления сферической aberrации // ОМП, ОНТИ ГОИ. – 1972. – № 9. – С. 24–25.
2. Зверев В.А. Оптическая система сферического зеркала с плоскопараллельной

- пластинкой // ОМП, ОНТИ ГОИ. – 1986. – № 11. – С. 30–32.
3. Зверев В.А. Основы геометрической оптики. – СПб: СПб ГИТМО (ТУ), 2002. – 218 с.
 4. Романова Г.Э. Композиция зеркально-линзового объектива, основанная на применении свойств плоскопараллельной пластины // Вестник конференции молодых ученых СПбГУ ИТМО. Сборник научных трудов. – 2004. – Т. 1. – С. 80–90.
 5. Романова Г.Э. Разработка теоретических основ композиции оптических систем зеркальных и зеркально-линзовых объективов. Кандидатская диссертация. – СПб: СПбГУ ИТМО. – 2005 – 135 с.

УДК 535.317

РАЗРАБОТКА ОСНОВ КОМПОЗИЦИИ И ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ СОВРЕМЕННЫХ ПРИБОРОВ ГРАЖДАНСКОГО И СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ

В.В. Ежова

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.А. Зверев

Рассмотрены основы композиции и параметрический синтез оптических систем на основе двухкомпонентной системы. Приведен анализ коррекционных возможностей элементов оптических систем, построенных на основе известных схем.

Ключевые слова: оптическая система, аберрации.

Введение

Развитие современного оптического приборостроения основано на применении высокоразрешающих и высокочувствительных приемников излучения, более совершенных электронных систем управления и обработки информации. Для изготовления несущих конструкций, механизмов и элементов крепления применяются новые, более прочные и легкие материалы, и предполагается ужесточение требований к параметрам оптических систем: величине относительного отверстия и углового поля изображаемого оптическими системами пространства. Возможность такого развития оптико-электронных устройств невозможна без создания оптических систем, формирующих изображение дифракционного качества, обладающих предельно малыми габаритами и предельно достижимой простотой конструкции. Формальное усложнение известных конструкций оптических систем приводит к повышению трудоемкости их изготовления (к снижению технологичности изготовления) и к дополнительным проблемам достижения требуемого качества изображения.

Для решения этой задачи необходимо проведение достаточно широкого и глубокого исследования габаритных и аберрационных свойств известных конструкций оптических систем и определения возможных путей их развития.

Основные положения

Любая оптическая система должна соответствовать своему функциональному назначению, т.е. должна формировать изображение требуемой величины и качества, иметь необходимую светосилу и т.д. При этом важно иметь в виду, что оптимальность компоновки прибора, его минимальные габариты и масса, удобство применения и, в конечном счете, потребительские свойства и стоимость определяются степенью обоснованности выбора параметров оптических компонентов и их расположения, взаимной обусловленностью применяемых базовых (силовых) и коррекционных

оптических элементов. Практический опыт разработки оптических систем показал, что, зная свойства отдельных оптических элементов, можно компоновать исходную оптическую схему системы путем сочетания в ней только тех элементов, свойства и возможности которых необходимы для удовлетворения требований, предъявляемых к ней. Такой подход исключает существование в системе бесполезных элементов.

Метод разработки оптических систем посредством компоновки их из необходимых базовых и коррекционных конструктивных элементов и узлов впервые был предложен профессором НИУ ИТМО М.М. Русиновым и получил развитие в его трудах [1]. Важно отметить, что удовлетворение требований, предъявляемых к разрабатываемой оптической системе, в общем случае может обеспечиваться различными конструкциями оптических систем, что свидетельствует о существовании нескольких возможных решений. Следовательно, в результате синтеза оптической системы из ряда выбранных конструктивных элементов получаем один из возможных вариантов конструктивного решения задачи.

Если предмет расположен на бесконечно большом расстоянии от тонкого компонента, то такую схему называют базовой оптической схемой первого вида. Если предмет расположен в передней фокальной плоскости тонкого компонента, то такую схему называют базовой схемой второго вида. Оптическую схему, образованную тонким компонентом, совмещенным с плоскостью предмета, называют базовой схемой третьего вида.

В результате композиции путем сочетания базовых схем различного вида с учетом требуемого расположения плоскостей предмета и изображения, входного и выходного зрачков и диафрагм, их ограничивающих, можно получить вариант оптической схемы прибора любой сложности. Таким образом, введение понятия базовой схемы позволяет распространить идеи синтеза и композиции на разработку оптических схем. Представление оптических систем в виде сочетания тонких компонентов может оказаться полезным для оценки сложности задач коррекции аберраций и выбора необходимых средств для этого.

В простейшем случае оптическая система состоит из одного тонкого компонента, формирующего изображение при апланатической коррекции аберраций, т.е. при требуемом качестве изображения предмета в пределах малого углового поля изображаемого пространства предметов [2]. Увеличение углового поля приводит к появлению недопустимой величины остаточного астигматизма и кривизны поверхности изображения. Дополнив этот компонент, принятый в качестве базового, вторым компонентом, расположив его на конечном расстоянии от первого, можно решить задачу коррекции не только сферической аберрации и комы, но и астигматизма, а при определенных условиях и кривизны поверхности изображения. Сочетание тонкого компонента с отрицательным апланатическим мениском позволяет получить апланатическую в области аберраций третьего порядка оптическую систему, при этом при малой кривизне поверхности изображения апланатическая поверхность второго вида компенсирует астигматизм, вносимый тонким компонентом.

Двухкомпонентная система вполне может быть принята в качестве базовой для построения целого ряда современных оптических систем различного назначения и различной сложности: телеобъектив, обратный телеобъектив, объектив Петцваля, триплет и оптические системы других объективов [3].

Оптическая сила двухкомпонентной системы (рис. 1) равна:

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 - \varphi_1 \varphi_2 d ,$$

где φ_1 – оптическая сила первого компонента; φ_2 – оптическая сила второго компонента; d – расстояние между компонентами.

$$\text{При } \varphi_1 = -\varphi_2 = \varphi_0 : \varphi = \varphi_0^2 d .$$

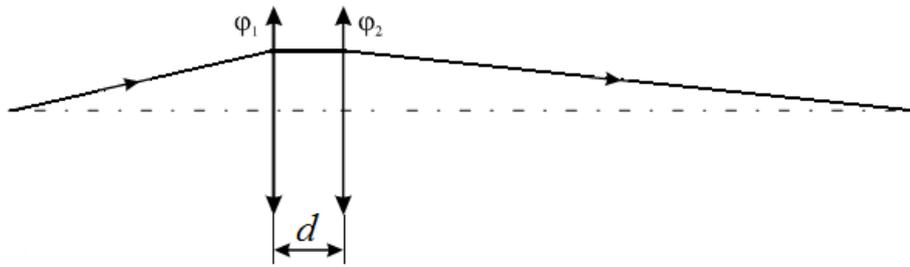


Рис. 1. Двухкомпонентная система

Оптическая система из двух тонких линз, разделенных конечным воздушным промежутком (рис. 2), принципиально обладает коррекционными параметрами для плананастигматической коррекции aberrаций: $S_I=S_{II}=S_{III}=0$ и $S_{IV} \neq 0$, где S_I , S_{II} , S_{III} и S_{IV} – коэффициенты, определяющие сферическую aberrацию, кому, астигматизм и кривизну поверхности; зависят только от конструктивных параметров системы. Такая конструкция оптической системы возможна при малых относительном отверстии и угловом поле изображаемого пространства при работе в узком спектральном диапазоне длин волн излучения.

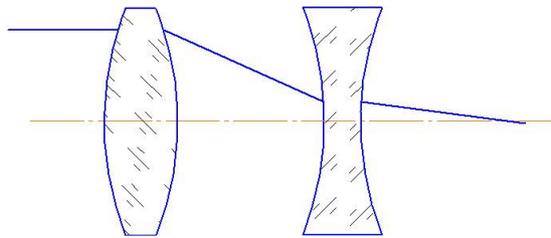


Рис. 2. Оптическая схема из двух тонких линз

При отрицательной силе первой по ходу лучей линзы имеем оптическую систему обратного телеобъектива (рис. 3).

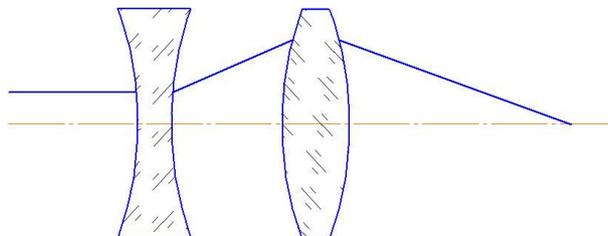


Рис. 3. Оптическая схема обратного телеобъектива

Главные плоскости толстого отрицательного мениска вынесены в пространство вогнутой поверхности [3]. В связи с этим сочетание тонкой линзы с толстым отрицательным мениском формально можно рассматривать в качестве двухкомпонентной системы (рис. 4), обладающей более благоприятными коррекционными возможностями.

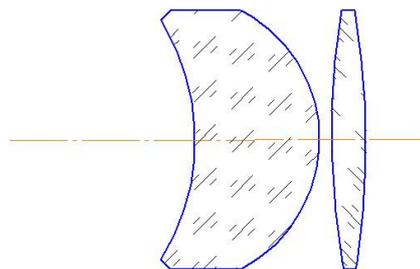


Рис. 4. Оптическая система, состоящая из отрицательного мениска и тонкой линзы

Дополнив эту систему такой же, образуем симметричную систему (рис. 5), формирующую изображение с поперечным увеличением, равным минус единице. Применяв метод сохранения углов излома апертурного луча, определим конструктивные параметры системы при положении предмета на бесконечно большом расстоянии от нее. Такая система позволяет достичь максимальных значений параметров.

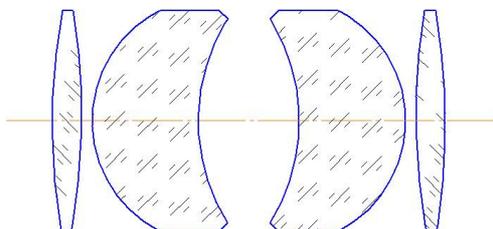


Рис. 5. Оптическая схема симметричной системы

Очевидно, что для воплощения идеи композиции в практику проектирования оптических систем необходимо располагать достаточно развитым набором базовых и коррекционных элементов [1]. Можно сформулировать следующие направления исследований, решающих эту задачу:

- изучение абберационных свойств сферических поверхностей при больших апертурных и полевых углах, анализ их коррекционных возможностей;
- определение оптимального сочетания свойств (показателей преломления и дисперсии) перспективных марок стекол, обладающих требуемыми возможностями коррекции aberrаций, исследование проблем применения вновь созданных оптических материалов;
- изучение абберационных свойств несферических поверхностей, анализ проблем композиции оптических систем на основе их применения, разработка принципиальных схем контроля несферических поверхностей в процессе их изготовления.

Выводы

В связи с успехами, достигнутыми в области изготовления несферических поверхностей, проблемы изучения их абберационных свойств и композиции оптических систем на основе применения несферических поверхностей приобретают все большую актуальность. В настоящее время несферические поверхности применяются не только в осветительных устройствах и в крупных астрономических инструментах, но и в составе сложных оптических систем (в фотографических объективах и в объективах съемочных телевизионных камер, в окулярах зрительных труб и т.д.), где они позволяют существенно повысить характеристики оптических приборов и в то же время упростить их оптическое устройство (применить меньшее количество оптических элементов), обеспечивая при этом высокое качество изображения.

Литература

1. Русинов М.М. Композиция оптических систем. – 2-е изд. – М.: Эдиториал УРСС, 2011. – 384 с.
2. Зверев В.А. Основы геометрической оптики. – СПб: СПбГИТМО (ТУ), 2002. – 218 с.
3. Ежова В.В., Зверев В.А. Абберационный анализ двухкомпонентной схемы оптической системы объектива // Оптический журнал (в печати).

4. Зверев В.А. Идеи композиции как принцип построения рациональной конструкции оптической системы // Научно-технический вестник СПб ГИТМО. – 2002. – № 1 (5). – С. 56–71.

УДК 004.588

ТЕХНОЛОГИЯ RLCP-СОВМЕСТИМЫХ ВИРТУАЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРИЙ

Е.А. Ефимчик

Научный руководитель – к.т.н., доцент А.В. Лямин

Приведено описание, назначение компонентов среды разработки виртуальных лабораторий, использующих протокол RLCP и совместимых с системой дистанционного обучения AcademicNT. Описан алгоритм разработки и тестирования RLCP-совместимых виртуальных лабораторий с помощью каркаса виртуальной лаборатории и среды тестирования виртуальных лабораторий, указаны результаты применения этих средств в учебном процессе, а также описаны планы дальнейшего развития.

Ключевые слова: виртуальная лаборатория, AcademicNT, RLCP, дистанционное обучение, электронное обучение.

Введение

Виртуальная лаборатория (ВЛ) представляет собой электронную среду, позволяющую создавать и исследовать модели реальных явлений. ВЛ достаточно сложны в разработке, но предоставляют уникальные возможности в образовательном процессе [1]. Для упрощения процессов разработки и применения виртуальных лабораторий в НИУ ИТМО был предложен протокол взаимодействия с виртуальными лабораториями RLCP (Remote Laboratory Control Protocol). Введение этого протокола позволило унифицировать и в значительной степени автоматизировать процессы разработки и применения ВЛ.

Протокол RLCP поддерживается системой дистанционного обучения AcademicNT [2], применяемой в НИУ ИТМО и некоторых других вузах. Первая версия протокола предусматривала выполнение испытуемыми заданий, варианты которых были заранее разработаны методистами курса. Вторая версия протокола предусматривает автоматическое построение заданий в реальном масштабе времени [3].

Состав и структура RLCP-совместимой ВЛ

В состав любой RLCP-совместимой ВЛ, кроме лабораторной установки и проверяющего сервера, должен входить RLCP-клиент, обеспечивающий взаимодействие составных частей лаборатории и пользователя. Таким клиентом, например, является AcademicNT. Структурная схема ВЛ приведена на рис. 1.



Рис. 1. Структурная схема ВЛ

При запросе на получение задания виртуальной лаборатории RLCP-клиент передает пользователю страницу, которая содержит описание задания и интерактивный элемент – апплет, который реализует функции виртуальной лабораторной установки. Такая страница называется кадром задания. Кадр задания может быть либо выбран из банка заданий RLCP-клиента, либо построен с помощью RLCP-сервера ВЛ (рис. 2). В последнем случае RLCP-клиент создает по протоколу RLCP-запрос на RLCP-сервер, в котором указываются инструкции для формирования варианта задания, получает от него ответ, содержащий необходимые данные.

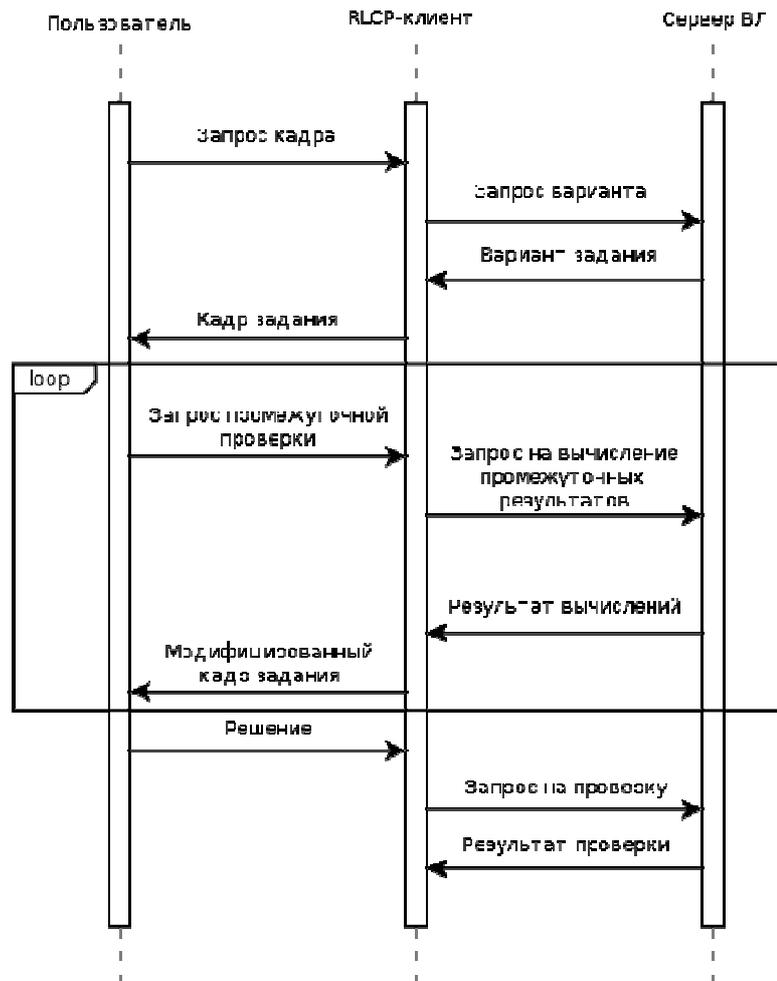


Рис. 2. Диаграмма последовательности действий при выполнении лабораторной работы

В общем случае ответ на задание ВЛ содержит описание некоторой системы с определенным набором входов и выходов. Эта система конструируется в соответствии с заданием с помощью виртуальной лабораторной установки из объектов и отношений предметной области. Знание о правильном ответе может быть представлено в виде пар проверяющих наборов входных и выходных данных. Для оценки правильности ответа необходимо получить реакцию описанной системы на заданном наборе входных данных и сравнить ее с соответствующим эталонным набором выходных данных. Совпадение реакции системы с эталонным набором выходных данных будет свидетельствовать о правильности ответа. Когда пользователь выполнил предъявленное ему задание, он отправляет ответ с помощью управляющих элементов кадра задания на RLCP-клиента. RLCP-клиент упаковывает ответ пользователя, проверяющие наборы данных и прочие параметры для его проверки в запрос по протоколу RLCP и отправляет его на RLCP-сервер. RLCP-сервер осуществляет проверку ответа пользователя, исходя из заданных параметров, и возвращает результат RLCP-клиенту. После получения ответа RLCP-клиент может сохранить результаты проверки и предоставить их пользователю.

Протокол RLCP

Протокол RLCP служит для обеспечения взаимодействия сервера ВЛ и RLCP-клиента [4]. RLCP-клиент может запросить данные для формирования кадра задания, результаты проверки ответа пользователя или данные промежуточных вычислений. Для каждого типа запроса и соответствующего ему ответа используется свой формат описания. Такой формат называется методом протокола RLCP или RLCP-методом.

В версии 2.0 протокола RLCP представлены следующие методы:

- **Generate**, предназначенный для передачи используемых при построении кадра заданий в режиме реального времени;
- **Calculate**, который предназначен для передачи результатов промежуточных вычислений;
- **Check**, предназначенный для передачи результатов выполнения задания на основе проверяющих наборов.

Пример внешнего вида кадра задания в AcademicNT показан на рис. 3. Полученные после запроса методом **Generate** данные формируют внешний вид кадра. Кроме того, информация о варианте задания будет отправлена и на RLCP-сервер при проверке задания в качестве дополнительных инструкций.

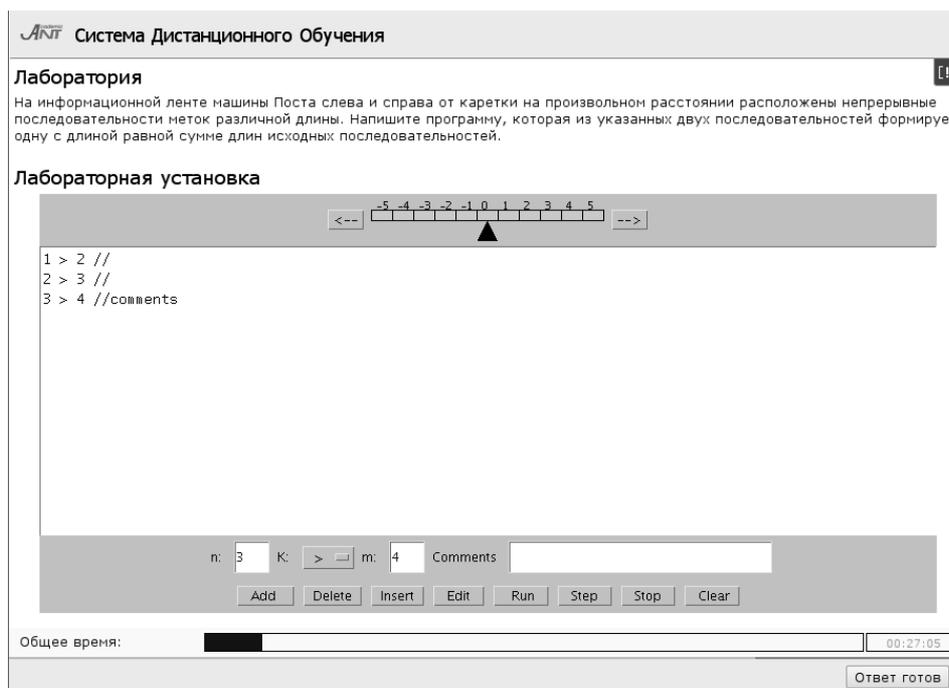


Рис. 3. Внешний вид кадра в AcademicNT

Описание разработки и тестирования ВЛ

Для поддержки протокола RLCP были разработаны две библиотеки: `rlcp` и `rlcp-server`. Первая содержит основные средства для построения и анализа запросов и ответов различных методов и используется как RLCP-клиентами, так и RLCP-серверами. В библиотеке `rlcp-server` реализованы классы для организации сетевого взаимодействия сервера с клиентом. Главным преимуществом этих библиотек является простой и удобный программный интерфейс, позволяющий работать с запросами и ответами протокола RLCP.

На основе этих библиотек был разработан программный каркас, который позволяет максимально быстро создавать ВЛ. Он представляет собой кросс-платформенный проект на языке Java, не привязанный к какой-либо среде разработки на этом языке, но легко интегрируемый в любую из них. Каркас включает в себя полностью функциональный RLCP-сервер, в котором разработчику необходимо описать алгоритмы обработки запросов, и заготовку виртуальной лабораторной установки, которая реализует программный интерфейс Console.

Для тестирования и отладки процесса взаимодействия компонентов RLCP-совместимых ВЛ создана среда, которая представляет собой: RLCP-клиента, поддерживающего управление набором ВЛ, инструменты редактирования, импорта и экспорта ВЛ и заданий для них. Пользовательский интерфейс управления набором ВЛ имеет два режима – просмотра и редактирования, которые представлены на рис. 4 и 5 соответственно.



Рис. 4. Режим просмотра ВЛ

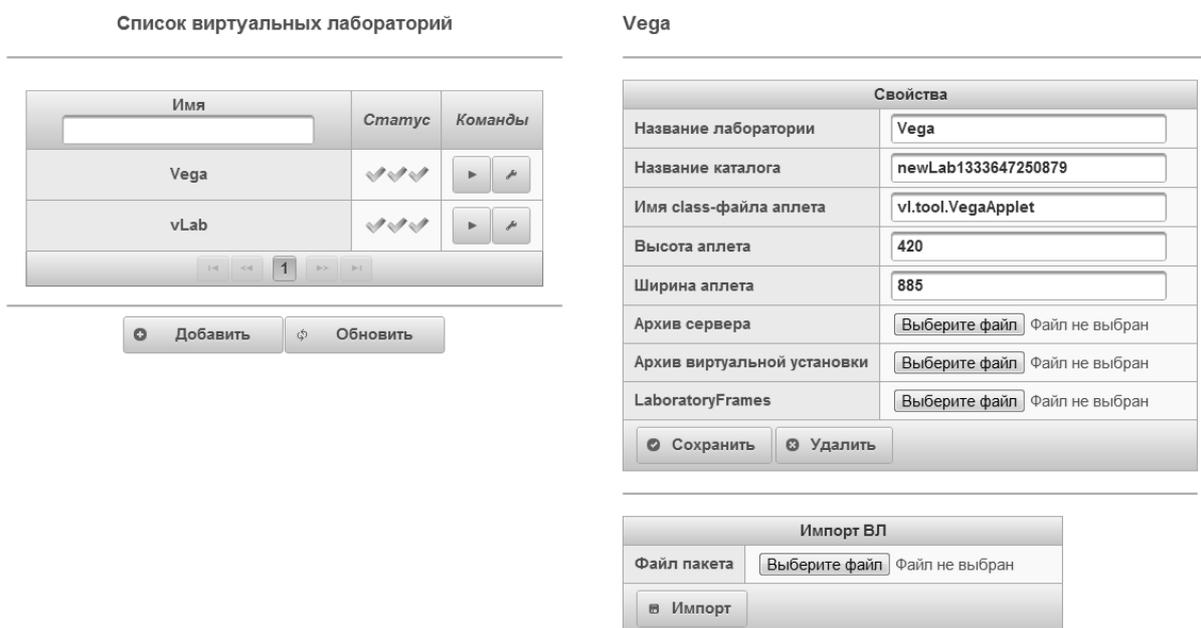


Рис. 5. Режим редактирования ВЛ

Переключение между режимами происходит при нажатии соответствующих кнопок из блока команд. В режиме просмотра можно протестировать набор загруженных заданий и их решений, а в режиме редактирования можно изменять свойства и параметры, программные модули и банки заданий ВЛ.

Заключение

Среда разработки и тестирования виртуальная лаборатория построена с использованием новейших веб-технологий и создает условия для более широкого применения инновационных инструментов в учебном процессе. Она существенно упрощает процесс разработки и внедрения виртуальных лабораторий. Среда тестирования виртуальных лабораторий была включена в учебный процесс в весеннем семестре 2011–2012 годов в рамках дисциплины «Технология разработки виртуальных лабораторий». Проведенная апробация показала, что при использовании среды повышается качество и сокращается время разработки.

Запланированы дальнейшие улучшения средств разработки виртуальных лабораторий – создание независимого RLCP-клиента для расширения области применения и популяризации RLCP-совместимых виртуальных лабораторий. Этот

проект позволит использовать технологию RLCP-совместимых виртуальных лабораторий более широкому кругу разработчиков и пользователей.

Литература

1. Ефимчик Е.А., Лямин А.В. Виртуальные лаборатории в дистанционном образовании и особенности их разработки // Материалы научно-практической конференции «Математические методы и модели анализа и прогнозирования развития социально-экономических процессов черноморского побережья Болгарии». – Поморие, Болгария, 2012. – С. 135–139.
2. Вашенков О.Е., Лямин А.В. Механизм реализации виртуальных лабораторий в информационно-образовательной среде AcademicNT // Открытое образование. – 2009. – № 4. – С. 24–33.
3. Ефимчик Е.А., Лямин А.В. Генерирование заданий для виртуальных лабораторий по дискретной математике // Труды XVIII Всероссийской научно-методической конференции «Телематика'2011». – СПб, 2011. – Т. 1. – С. 169–170.
4. Ефимчик Е.А., Лямин А.В. Схема реализации виртуальных лабораторий с возможностью автоматического построения заданий и оценивания результатов их выполнения // Материалы международной научно-практической конференции «Новые информационные технологии в образовании – 2012». – Екатеринбург, 2012. – С. 143–145.
5. Вашенков О.Е., Волкова А.А., Лямин А.В. Примеры реализации сетевых виртуальных лабораторий в среде системы дистанционного обучения // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2007. – № 11 (45). – С. 157–164.

УДК 539.216.1; 53.03; 53.06; 53.082.12

УСТОЙЧИВОСТЬ РАБОТЫ СКАНИРУЮЩЕГО СИЛОВОГО МИКРОСКОПА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ЗОНДА С НАНОВИСКЕРОМ

В.В. Левичев, М.В. Жуков, И.С. Мухин, А.И. Денисюк, А.О. Голубок

Исследована работа кантилевера сканирующего зондового микроскопа с металл-углеродным вискером на вершине. Металл-углеродные вискеры, выращиваемые с помощью технологии осаждения материала под действием фокусированного ионного пучка в присутствии газов-прекурсоров, имели аспектное отношение $\alpha \sim 10\text{--}200$ и сохраняли свою форму при многократном сканировании в силовом режиме. Экспериментально продемонстрировано преимущество зондов с вискерами при исследовании поверхности с вертикальными стенками и узкими каналами. При больших значениях α обнаружена неустойчивость в работе сканирующего зондового микроскопа, обусловленная взаимодействием боковой поверхности вискера с образцом. Показано, что для устойчивой работы при больших аспектных отношениях необходимо ориентировать ось вискера по нормали к поверхности образца.

Ключевые слова: вискер, аспектное отношение, фокусированный ионный пучок, сканирующая зондовая микроскопия.

Введение

Известно, что изображение, получаемое с помощью сканирующего зондового микроскопа (СЗМ), определяется как рельефом поверхности и свойствами материала образца, так и формой и параметрами материала зонда. Это приводит к существенным искажениям при исследовании объектов с резкими и глубокими перепадами высот, таких как узкие и глубокие каналы. Для уменьшения искажений, возникающих на СЗМ-изображениях при исследовании подобных объектов, следует применять зонды с высоким аспектным отношением $\alpha = l/r$ (l и r – длина и диаметр нитевидного зонда

соответственно). При этом значение α ограничивается сверху общим требованием защиты зондов от механических и акустических шумов. Эффективность защиты определяется соотношением $f_r \gg f_n$, где f_r – резонансная частота собственных колебаний нитевидного зонда; f_n – характерные частоты внешних шумовых колебаний. Поскольку резонансные частоты закрепленной на одном конце балки уменьшаются при увеличении α , то зонды со слишком большим аспектным отношением будут плохо защищены от механических вибраций. При работе в режиме силовой микроскопии нитевидные зонды должны быть также устойчивы относительно продольного сжатия и поперечного изгиба, что накладывает ограничения на величину α и ориентацию зонда. Кроме того, следует учитывать, что слишком длинные зонды подвержены тепловому дрейфу.

Перспективными для исследования образцов с развитым поверхностным рельефом являются зонды, на вершинах которых локализованы одиночные кристаллические или аморфные усы (вискеры) или нанотрубки [1, 2]. Действительно, вискеры и нанотрубки обладают достаточно высокой прочностью и жесткостью $k \sim (4-15)$ N/m, высокой резонансной частотой собственных колебаний $f \sim 100$ MHz, малым поперечным размером $r \sim (5-50)$ nm и высоким аспектным отношением α . В настоящей работе исследовались зонды с высоким аспектным отношением ($\alpha \sim 20$), представляющие собой металл-углеродные вискеры, выращенные на вершине кремниевой пирамидки стандартного кантилевера СЗМ.

Изготовление зондов с высоким аспектным отношением

Для создания металл-углеродных вискероов применялась технология осаждения материала под действием фокусированных электронного или ионного пучков в присутствии газов-прекурсоров [3]. Использовалась установка CrossBeam Neon 40 (CarlZeiss) с интегрированной системой напуска газов $C_9H_{16}Pt$ или $W(CO)_6$. Под действием электронного или ионного пучков металлоорганические молекулы газа-прекурсора разлагаются и содержащиеся в этих молекулах атомы металла осаждаются на вершину кремниевой пирамидки кантилевера (рис. 1, а), формируя вискер, растущий параллельно первичному пучку. Диссоциация молекул газа-прекурсора инициируется вторичными электронами, эмитируемыми материалом подложки. Латеральный размер растущего вискера определяется областью выхода вторичных электронов [4]. При стандартной реализации этой технологии ось первичного пучка остается неподвижной, вискер растет параллельно оси пучка. Следует отметить, что в реальных наноструктурах, созданных данным методом, содержание Pt или W не превышает 30%, а 70% материала вискера состоит из органических остатков газа-прекурсора. В данном случае ось пучка перемещалась в сторону от начальной точки зарождения вискера и рост вискера осуществлялся в направлении, перпендикулярном оси пучка [5]. Преимуществом перпендикулярного роста является возможность задавать направление оси вискера (рис. 1, b, c) и визуализировать процесс роста на экране сканирующего электронного микроскопа (СЭМ). Задавая направление и скорость перемещения первичного пучка относительно начальной точки роста, а также площадь экспонирования, ускоряющее напряжение, ток пучка и поток газов-прекурсоров, можно управлять процессом роста вискера. Характерный поперечный радиус вискероов, используемых в качестве СЗМ-зондов в наших экспериментах, составлял около 15 nm. Длина вискероов могла изменяться в диапазоне (0,15–3) μ m, что соответствует диапазону аспектных отношений $\alpha \sim 10-200$. Радиус закругления вершины стандартного кантилевера составлял ~ 10 nm (вставка на рис. 1, а). Радиус закругления Pt/C вискера, измеренный с помощью СЭМ (рис. 1, b), имел такую же величину (вставка на рис. 1, b).

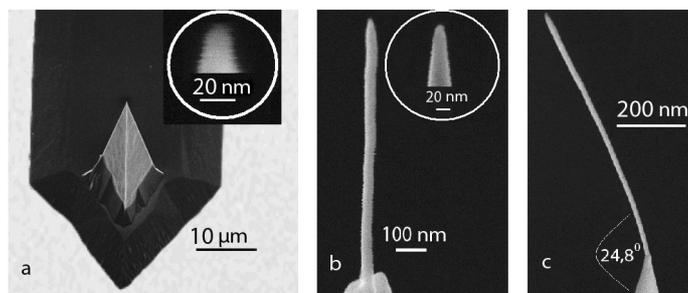


Рис. 1. СЭМ-изображения: кремниевой пирамидки исходного кантилевера (а); Pt/C вискера, выращенного на вершине пирамидки (b) и (c)

Силовое взаимодействие вискера с поверхностью можно описать, пользуясь моделью балки, опертой с двух концов. При этом, как известно [6], имеется критическая сила продольного сжатия F_{cr} , при превышении которой балка теряет устойчивость. Оценив значение F_{cr} через аспектное отношение α , получим:

$$F_{cr} \approx \frac{\pi^4 \cdot E}{4} \cdot \left(\rho \frac{r^3}{\alpha} \right),$$

где E – модуль Юнга материала; ρ – плотность нановискера; r – поперечный радиус вискера.

Положив $\rho \approx 7,8 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$, $E \approx 0,6 \cdot 10^{11} \text{ N/m}^2$ и $r = 3 \cdot 10^{-8} \text{ m}$, получим, что F_{cr} изменяется в диапазоне (1–20)пН при изменении α от 100 до 5. Учитывая, что характерные значения силы взаимодействия «зонд–образец» в сканирующей силовой микроскопии лежат около ~1 нН, можно считать, что зонды-нановискеры должны быть устойчивыми вплоть до $\alpha \sim 100$.

Экспериментальные результаты и обсуждение

Работа зондов исследовалась в СЭМ NTegra Auga при сканировании тестовых образцов в полуконтактном силовом режиме. В качестве тестовых образцов использовались как стандартные калибровочные кремниевые микроструктуры, поставляемые компанией NT-MDT, обычно применяемые в СЭМ-измерениях, так и специально изготовленный образец (рис. 2).

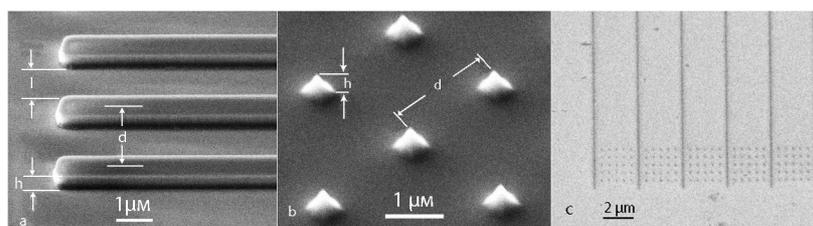


Рис. 2. СЭМ-изображения тестовых образцов: каналы с вертикальными стенками – стандартная TGZ03 – решетка на поверхности Si, $d = 3 \mu\text{m}$, $L = 2 \mu\text{m}$, $h = 500 \text{ nm}$ (a); острые иглы – стандартная TGT01 – решетка на поверхности Si, $d = 2,12 \mu\text{m}$, $h = 600 \text{ nm}$, $R = 10 \text{ nm}$ (b); узкие каналы в электронном резисте на поверхности кремния, глубиной 100 nm, шириной 200 nm (c)

Как уже отмечалось, кантилеверы с вискерами имеют преимущества над стандартными кантилеверами при визуализации образцов с резким поверхностным рельефом. Ранее [5] было показано, что, используя вискеры, можно более точно измерить глубину каналов на поверхности образца. Отметим, что в этих экспериментах направление быстрого сканирования было перпендикулярно стенкам каналов. Вместе с тем известно, что при СЭМ-визуализации глубоких каналов с вертикальными стенками возникают неустойчивости, если направление быстрого сканирования параллельно

стенкам каналов. Исходя из этого именно это «неудобное» направление выбиралось в данной работе для исследования устойчивости и сравнения работы кантилеверов с вискерами и стандартных кантилеверов.

На рис. 3, a–d, представлены СЗМ-изображения и поперечное сечение широких каналов с вертикальными стенками (рис. 2, а). Данные, представленные на рис. 3, a, c, получены в полуконтактном режиме с использованием стандартного Si кантилевера ($\alpha=3-5$, $R=10$ nm). На рис. 3, b, d, представлены аналогичные результаты, полученные с использованием Si кантилевера с Pt/C вискером на вершине ($\alpha=30$, $R<10$ nm). На рис. 4, a–d, представлены аналогичные результаты, полученные при визуализации острых игл на плоской поверхности (образец 2b).

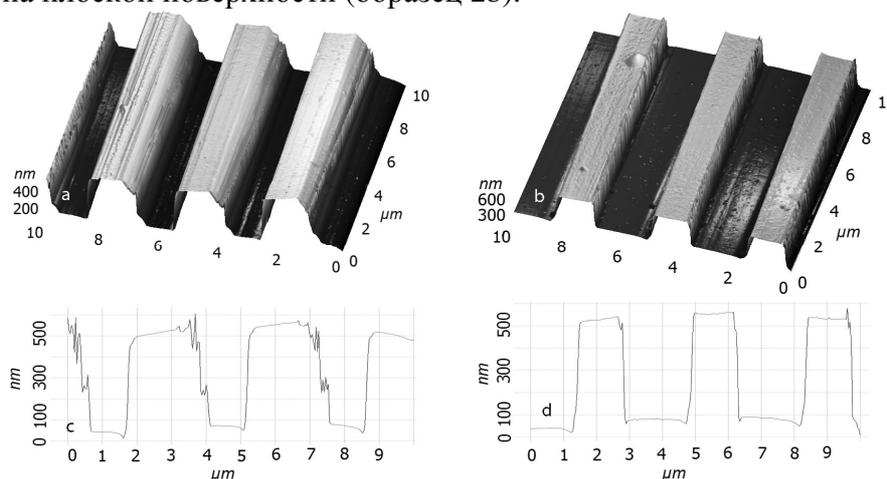


Рис. 3. СЗМ-изображения широкого канала с вертикальными стенками, полученные с помощью стандартного кантилевера (a, c) и кантилевера с Pt/C вискером. 3D-изображения (a, b); поперечные сечения изображений (c, d)

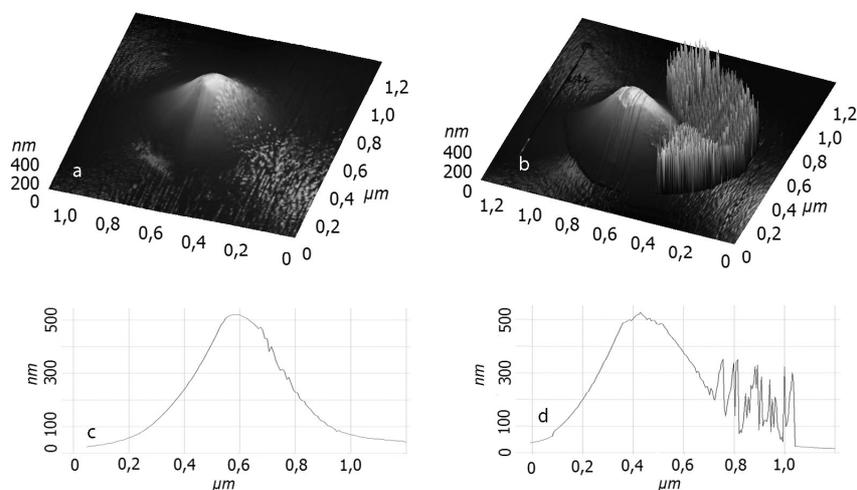


Рис. 4. СЗМ-изображения острой иглы, полученные с помощью стандартного кантилевера (a, c) и кантилевера с Pt/C вискером. 3D-изображения (a, b); поперечные сечения изображений (c, d)

Сравнение рис. 3, a, c, и рис. 3, b, d, показывает, что стандартный кантилевер дает срыв при визуализации «правой» вертикальной стенки канала.

Такое же поведение, но в значительно меньшей степени, демонстрирует кантилевер с вискером.

Учитывая, что СЗМ-изображения представляют собой свертку двух поверхностей (образца и зонда), и, принимая во внимание, что наименьший радиус имеют иглы, расположенные на образце, можно считать, что на рис. 4 визуализированы вершина пирамидки кантилевера (a, c) и вершина вискера (b, d). Сравнение рис. 4, a, c, и

рис. 4, b, d, показывает, что радиус закругления вершины стандартного кантилевера сравним с радиусом закругления вискера, что согласуется с данными, полученными в СЭМ (рис. 1, a, b).

При визуализации образца с острыми иглами на поверхности (рис. 2, b) также имеет место неустойчивая работа СЭМ, особенно отчетливо проявляющаяся в случае кантилевера с вискером – рис. 4, b, d. Наблюдаемые артефакты обусловлены генерацией следящей системы СЭМ. В тех областях на поверхности образцов, где имела место генерация следящей системы (СС), были измерены кривые подвода, т.е. зависимости амплитуды колебаний кантилевера от величины равновесного расстояния между зондом и образцом при разорванной петле обратной связи СС. В отличие от линейных кривых подвода, имеющих место на устойчивых участках, на участках с генерацией СС наблюдались зашумленные ломаные кривые подвода. Изломанность кривой подвода можно связать с перпендикулярной ориентацией оси вискера по отношению к плоскости образца. Действительно, как известно, для исключения касания поверхности образца микробалкой кантилевера последний всегда располагается под некоторым углом к поверхности образца. В СЭМ NTegra-Aura этот угол составляет 20° . Тогда ось вискера, сформированного вдоль оси пирамидки (рис. 1, b) перпендикулярно к поверхности микробалки кантилевера, будет отклоняться от нормали к поверхности образца. В результате при отработке СС развитого рельефа сканер СЭМ будет перемещаться на большие расстояния вдоль оси Z, что, в свою очередь, может привести к касанию между поверхностью образца и боковой поверхностью вискера. Такое боковое касание приведет к появлению силы, перпендикулярной к оси вискера. Поскольку жесткость вискера в направлении, перпендикулярном к его оси, значительно меньше его продольной жесткости, возникшая сила изогнет вискер или даже вызовет его колебания. В результате на кривой подвода появятся шумы и перегибы. В свою очередь, нелинейность кривой подвода будет влиять на фазово-частотную характеристику СС, «сбивая» запас по фазе, необходимый для ее устойчивой работы. Резкие изменения на кривой подвода приведут к изменению знака обратной связи в СС с отрицательного на положительный и, как следствие, к автоколебаниям сканера и появлению артефактов на СЭМ-изображениях.

Для исключения артефактов был изготовлен зонд с вискером, ось которого располагалась под углом $20\text{--}25^\circ$ к оси пирамидки кантилевера (рис. 1, c), следовательно, приближалась к нормали к поверхности образца. На рис. 5 представлено СЭМ-изображение острой иглы на плоской поверхности (рис. 2, b), полученное в полуконтактном режиме с помощью Pt/C вискера, расположенного под углом $\sim 25^\circ$ к оси пирамидки кантилевера. Видно, что в этом случае артефакты на СЭМ-изображении практически отсутствуют.

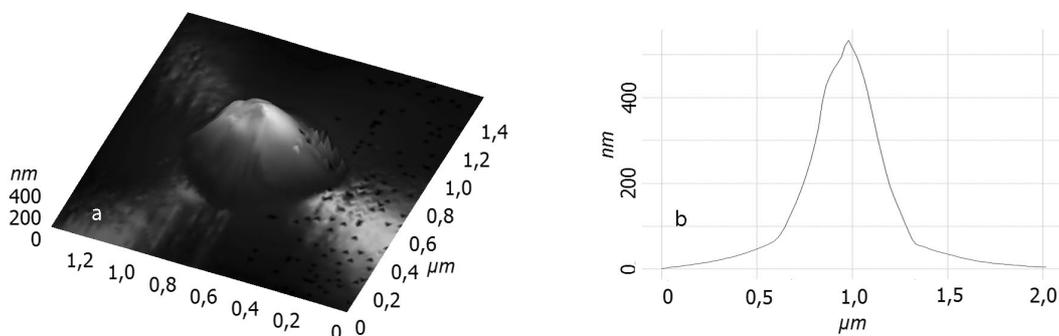


Рис. 5. СЭМ-изображения, полученные с помощью Pt/C вискера, расположенного под углом к оси пирамидки кантилевера: острая игла на плоской поверхности, 3D-изображение (a); поперечное сечение (b)

На рис. 6 представлены результаты визуализации узкого канала шириной 200 нм в электронном резисте (рис. 2, с), полученные с помощью стандартного кантилевера и кантилевера с Pt/C вискером, расположенным под углом 25° к оси пирамидки кантилевера. Видно, что стандартный кантилевер дает для глубины канала значение 40 нм, в то время как кантилевер с вискером, благодаря высокому аспектному отношению, дает для глубины канала в два раза большее значение – 100 нм.

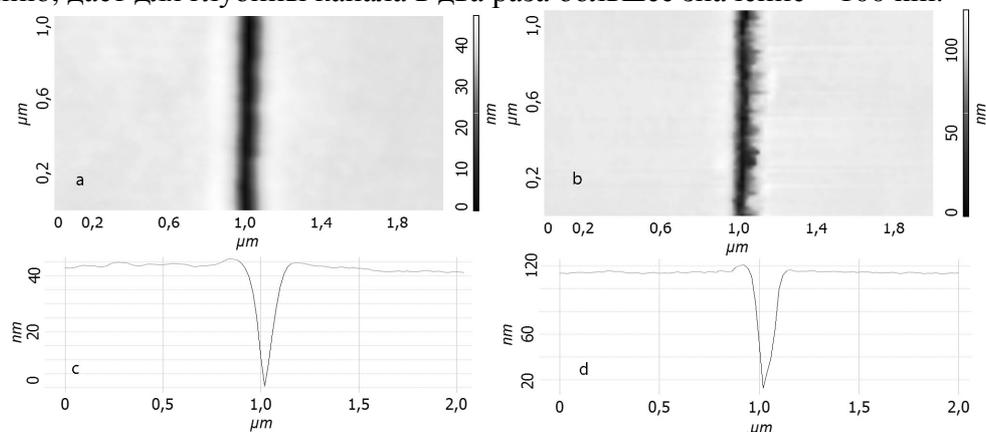


Рис. 6. СЭМ-изображения узкого канала в электронном резисте: стандартный кантилевер, 2D-изображение (а); кантилевер с Pt/C вискером, расположенным под углом к оси пирамидки кантилевера, 2D-изображение (b); поперечное сечение (с); поперечное сечение (d)

Форма Pt/C вискером контролировалась в СЭМ после многократного сканирования. Было установлено, что зонды сохраняют свою форму, т.е. проявляют механическую устойчивость под действием продольного сжатия, присутствующего в полуконтактном силовом режиме.

Заключение

Технология осаждения материала под действием фокусированных электронного или ионного пучков в присутствии газов-прекурсоров позволяет формировать металл-углеродные вискеры с поперечным сечением ~ 15 нм на вершине пирамидок стандартных кантилеверов, обеспечивая высокое аспектное отношение $\alpha = 10\text{--}200$ для СЭМ-зондов. По сравнению со стандартными кантилеверами зонды с вискерами дают меньшее размытие вертикальных стенок на СЭМ-изображениях широких каналов и, проникая в узкие каналы, позволяют измерять их глубину. В отличие от зондов с малым α , на ориентацию зондов с большим α накладываются более жесткие требования. Ось зонда должна достаточно точно совпадать с направлением, вдоль которого перемещается исполнительный элемент следящей системы сканирующего зондового микроскопа в процессе ее работы. При невыполнении этого условия при сканировании рельефных поверхностей будет иметь место взаимодействие образца с боковой поверхностью зонда, приводящее к неустойчивой работе сканирующего зондового микроскопа и артефактам на СЭМ-изображениях. Кантилеверы с Pt/C вискерами, расположенными под углом ~ 25° к оси пирамидки кантилевера, и аспектным отношением $\alpha \sim (10\text{--}100)$ демонстрируют механическую устойчивость под действием продольного сжатия, имеющим место в полуконтактном силовом режиме.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (ГК П557) и централизованного фонда НИУ ИТМО.

Литература

1. Branner S.S. The Growth and properties of whiskers // Science. – 1958. – V. 128. – No. 3324. – P. 569–575.
2. Kucukyildirim B.O., Akdogan Eker A., Eker B. // International Journal of Arts and Sciences. – 2009. – V. 3. – P. 18–26.
3. Евстапов А.А., Мухин И.С., Кухтевич И.В., Букатин А.С. // Письма в ЖТФ. – 2011. – Т. 37. – № 20. – С. 32–40.
4. van Dorp W.F., Hagen C.W. // Journal of applied physics. – 2008. – V. 104. – P. 081301–081301-42.
5. Мухин И.С., Мухин М.С., Феклистов А.В., Голубок А.О. // Научное приборостроение. – 2011. – Т. 21. – № 3. – С. 23–29.
6. Старовойтов Э.И. Сопротивление материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 384 с.

УДК 637.146.3/663.05

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПИЩЕВОЙ ДОБАВКИ ГЛЮКОНО-ДЕЛЬТА-ЛАКТОН НА КАЧЕСТВО ТВОРОГА

Л.А. Забодалова¹, О.В. Иванова¹, Л.В. Новинюк²

¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики. Институт холода и биотехнологий,

²ГУ ВНИИ пищевых ароматизаторов, кислот и красителей Россельхозакадемии)

Научный руководитель – д.т.н., профессор Л.А. Забодалова

(Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики. Институт холода и биотехнологий)

Глюконо-дельта-лактон находит широкое применение в мясной, кондитерской, хлебопекарной промышленности, а также в фармацевтике, косметологии. Данная пищевая добавка имеет ряд преимуществ, благодаря которым может быть использована и в молочной промышленности.

В работе приведены результаты изучения влияния глюконо-дельта-лактона на процесс сквашивания при кислотной коагуляции белков молока, а также на качество готового продукта. Полученные данные позволяют установить целесообразность ее использования при производстве белковых продуктов.

Ключевые слова: глюконо-дельта-лактон, кислотная коагуляция, белки молока.

Глюконо-дельта-лактон (ГДЛ, E575) – это внутренний эфир глюконовой кислоты. В молочной смеси, как и в воде, ГДЛ медленно гидролизует, высвобождая глюконовую кислоту. В процессе данной реакции происходит падение кислотности (Ph) среды реакции в управляемом режиме [1]. Благодаря этому свойству применение пищевой добавки E575 делает возможным: осаждение белка; подкисление продукта только при образовании оптимальной консистенции; стабилизацию консистенции полусухих сырокопченых колбас; получение пекарского порошка с медленным газообразованием [2]. Кроме того, пищевая добавка E575 применяется для ускорения процесса созревания продукции, стабилизации цвета. На основании вышеизложенного можно предположить, что проведение исследований по применению данной добавки в молочной промышленности будет актуальным.

В качестве объектов для исследования было выбрано 6 образцов нежирного творога с различной дозой внесения ГДЛ – от 0,05 до 0,30% от массы заквашиваемой смеси. Изменение титруемой кислотности в процессе сквашивания представлено на рис. 1. При изучении полученных результатов было выявлено, что наиболее активный рост титруемой кислотности наблюдается у образцов с дозой внесения ГДЛ от 0,20 до 0,30%. При внесении добавки в этих пределах продолжительность сквашивания сокращается на 1,5–2,5 ч в зависимости от дозы внесения добавки. Образец с содержанием ГДЛ в количестве 0,05% от заквашиваемой смеси по динамике

кислотонакопления практически идентичен контрольному. При внесении добавки в количестве 0,10–0,15% продолжительность сквашивания уменьшается на 1,0–1,5 ч.

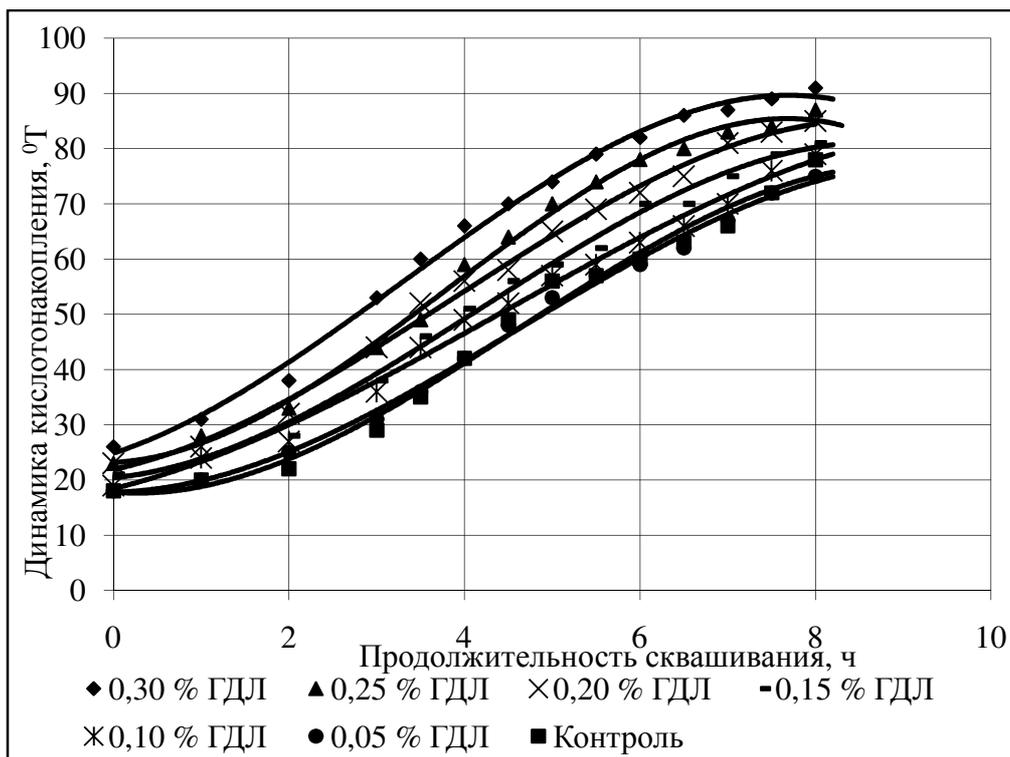


Рис. 1. Динамика кислотонакопления опытных образцов

Данные, полученные при контроле рН, представлены на рис. 2. Они согласуются с результатами изменения титруемой кислотности.

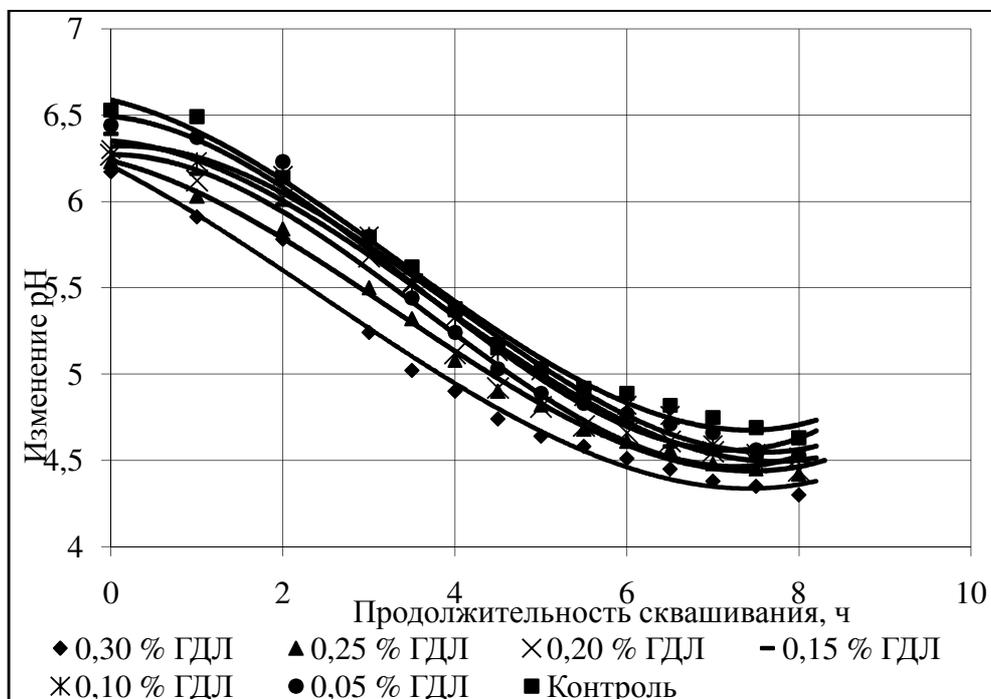


Рис. 2. Динамика изменения рН опытных образцов

Для более объективной оценки готовности сгустка контролировали также эффективную вязкость среды в процессе сквашивания. Результаты эксперимента представлены на рис. 3.

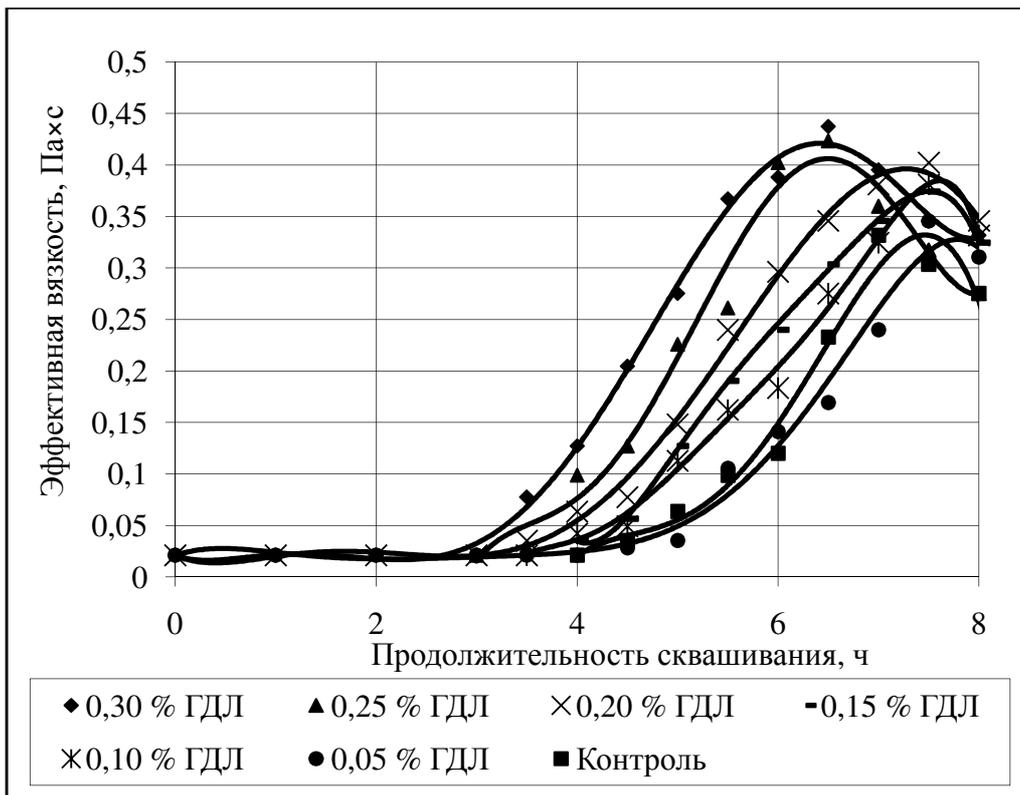


Рис. 3. Изменение эффективной вязкости сгустков в процессе сквашивания

Измерение эффективной вязкости проводили на ротационном вискозиметре «Реотест 2» при градиенте скорости сдвига, равном $48,6 \text{ с}^{-1}$. Как видно из представленных кривых, на начальном этапе процесса сквашивания вязкость не изменяется – это соответствует индукционному периоду, сгусток отсутствует. Затем идет интенсивный рост эффективной вязкости до достижения ее максимального значения. Наиболее активно способны образовывать пространственную структуру образцы с ГДЛ от 0,20 до 0,30%. При этом образуется более плотный сгусток. Эффективная вязкость образцов с содержанием ГДЛ 0,15 и 0,10% также выше, чем у контроля.

Сквашивание всех образцов проводилось до кислотности сгустка $75\text{--}80^\circ\text{T}$ при использовании творожной закваски ЛТГ на основе лактококков и термофильных молочнокислых стрептококков. По окончании сквашивания проводилась обработка сгустка. Сгусток, разрезанный на кубики $2 \times 2 \text{ см}$, подвергали отвариванию при температуре $36\text{--}38^\circ\text{C}$ в течение 15–20 мин и подвергали самопрессованию, в процессе которого контролировалось выделение сыворотки через каждые 5 мин в течение 45 мин. Результаты эксперимента приведены на рис. 4.

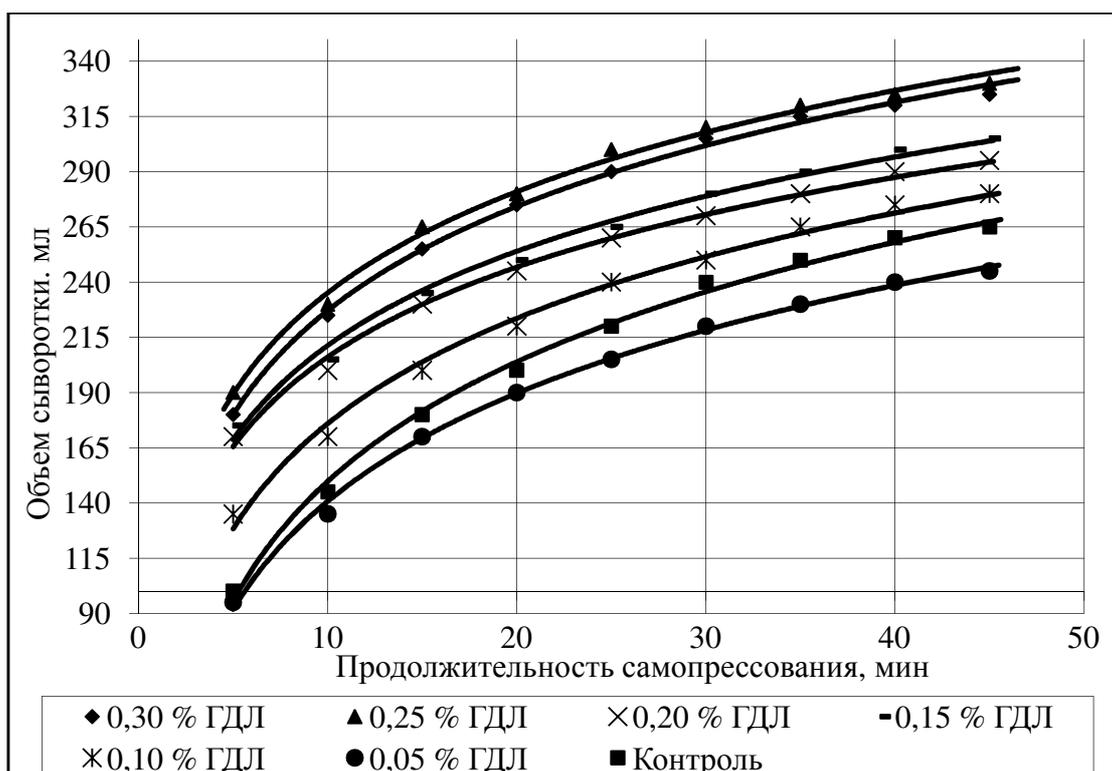


Рис. 4. Отделение сыворотки в процессе самопрессования

Из представленных кривых видно, что наиболее интенсивно сыворотка выделяется в образцах с добавлением ГДЛ в количестве 0,30 и 0,25% от массы заквашиваемой смеси. Образцы с ГДЛ 0,20 и 0,15% по синергетическим свойствам также значительно опережают контрольный образец. У образца с ГДЛ в количестве 0,05% синерезис замедлен относительно контрольного образца.

Затем массовая доля влаги в образцах была доведена до стандартной, т.е. не более 80,0%, а далее образцы готового продукта были исследованы по органолептическим, физико-химическим, структурно-механическим показателям. Результаты представлены в табл. 1 и 2.

Таблица 1. Органолептические показатели готового продукта

Массовая доля ГДЛ, %	Показатель		
	Цвет	Вкус	Консистенция
0 (контроль)	Белый, равномерный по всей массе	Чистый, кисломолочный, без посторонних привкусов и запахов	Мягкая, мажущаяся, нежная
0,05			
0,10			
0,15			
0,20		Имеет слегка кисловатый привкус Сильно выраженный, излишне кислый вкус	Более мягкая, нежная, мажущаяся
0,25			
0,30			

Согласно результатам органолептической оценки, образец с массовой долей ГДЛ 0,30% имел сильно выраженный, можно даже сказать, излишне кислый вкус, обусловленный, очевидно, дозой внесенной добавки. Это явилось причиной исключения данного образца из рассмотрения, несмотря на хорошие результаты по

остальным показателям. Остальные образцы соответствовали требованиям стандарта [3] и не уступали контролю.

Таблица 2. Физико-химические показатели готового продукта

Массовая доля ГДЛ, %	Показатель				
	Массовая доля влаги в продукте, %	Титруемая кислотность творога, °Т	Массовая доля сухих веществ заквашиваемой смеси, %	Титруемая кислотность сыворотки, °Т	Массовая доля сухих веществ сыворотки, %
0 (контроль)	80,1	186	9,3	57	6,3
0,05	79,9	187	9,3	57	6,2
0,10	80,1	192	9,5	59	6,4
0,15	79,8	194	9,5	58	6,6
0,20	80,0	196	9,4	60	6,7
0,25	80,1	198	9,4	61	6,4
0,30	80,0	202	9,5	62	6,6

При рассмотрении физико-химических показателей титруемая кислотность исследуемых образцов выше, чем у контроля, но не превышает пределов по титруемой кислотности для обезжиренного творога (240°Т).

При исследовании влияния массовой доли ГДЛ на структурно-механические свойства в образцах определяли эффективную вязкость в процессе разрушения сгустков с целью определения устойчивости структуры к механическому воздействию, способности ее к тиксотропному восстановлению после разрушения. Результаты исследований представлены в табл. 3.

Таблица 3. Характеристика готовых продуктов при механическом разрушении их структуры

Готовый продукт	η_{II}	η_p	η_v	П η , %	КМС	В η , %
	Пахс $\times 10^{-2}$					
0 (контроль)	14,82	6,59	7,68	55,5	2,2	51,8
0,05	14,82	9,33	7,13	37,0	1,6	48,1
0,10	14,82	9,88	9,33	33,3	1,5	62,9
0,15	15,37	9,88	8,23	35,7	1,5	53,5
0,20	14,82	8,23	7,68	44,4	1,8	51,8
0,25	14,82	8,23	7,13	44,4	1,8	48,1
0,30	17,02	9,88	8,78	41,9	1,7	51,6

Потери вязкости у образцов с добавкой ниже, а коэффициент восстановления выше или приблизительно равен показателю контрольного образца, что доказывает возможность и целесообразность использования добавки при производстве творожных продуктов. Наилучшие показатели имеют образцы с массовой долей ГДЛ 0,10–0,20%.

Таким образом, полученные результаты подтверждают целесообразность использования ГДЛ при производстве творога. ГДЛ сокращает продолжительность сквашивания и способствуют формированию более плотного творожного сгустка. Продолжительность сквашивания сокращается на 1,5–2,5 ч по сравнению с контрольным образцом. При этом отделение сыворотки проходит достаточно интенсивно, по синергетическим свойствам готовый продукт с добавкой превосходит контрольный образец. По органолептическим, физико-химическим, структурно-

механическим показателям опытные образцы удовлетворяют требованиям стандарта и превосходят показатели контрольного образца.

В результате исследований также были получены данные, позволяющие прогнозировать положительное влияние данной пищевой добавки на увеличение выхода готового продукта. Кроме того, ГДЛ позволяет уменьшить количество вносимой закваски стартовых лактокультур для проведения коагуляции молока, что также является предметом дальнейшего изучения.

Литература

1. Орион-продукт. Проспект фирмы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.orion-food.com/>, свободн.
2. ООО «Кирш». Проспект фирмы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://kirsch.ru>, свободн.
3. ГОСТ Р 52096-2003. Творог. Технические условия. – Введ. 01.07.2004. – М.: Стандартинформ. – 2008. – 8 с.

УДК 535.34

НЕЛИНЕЙНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ СВЕТА В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ В УСЛОВИЯХ МНОГОФОТОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Э.Г. Идрисов

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Е.Ю. Перлин

Развита теория нелинейного поглощения фемтосекундных световых импульсов объемными кристаллами и наноструктурами различной размерности. Предполагается, что длительности импульсов малы по сравнению с временами релаксации импульса электронов и дырок. Получены выражения для поглощенной энергии в условиях многофотонных резонансов на переходах между дискретными либо зонными электронными состояниями, а также между состояниями подзон размерного квантования в квантовых ямах и проволоках. Дан анализ зависимостей поглощенной энергии от расстройек многофотонных резонансов и от длительностей импульсов.

Введение

При исследовании предпробойного возбуждения прозрачных широкозонных диэлектриков или полупроводников лазерным излучением с энергией кванта $\hbar\omega$, малой по сравнению с шириной запрещенной зоны E_g материала, широко используются сверхкороткие световые импульсы. Во многих важных случаях возбуждение электронной системы материала происходит за счет многофотонных переходов. К настоящему времени достаточно подробно развита теория n -фотонных переходов с произвольными n между различными состояниями электронной системы кристалла или наноструктуры (см., например, библиографию к [1]). Однако при исследовании процессов взаимодействия прозрачных твердых тел с мощным лазерным излучением в последние 10–15 лет все чаще используются световые импульсы фемтосекундной длительности [2–11]. При продолжительности импульсов τ_i , малой по сравнению со временем релаксации импульса τ_p свободных носителей заряда, результаты, полученные ранее для скоростей многофотонных переходов в случае квазистационарного излучения, строго говоря, неприменимы, и требуется иной подход [12, 13]. Фактически указанная проблема возникает при $\tau_i\delta$, равной 100 фс [14].

Поглощение сверхкоротких импульсов света на переходах между дискретными электронными уровнями

Пусть линейно поляризованный свет с частотой ω и вектором поляризации, ориентированным вдоль оси x , распространяется в среде вдоль направления z между передней ($z=0$) и задней ($z=L$) ее поверхностями. Поскольку, по предположению, в среде отсутствуют однофотонные резонансы, ее можно считать оптически тонкой. В этом приближении можно получить для поглощаемой (либо излучаемой) плотности мощности света выражение [13, 14]:

$$J = -\omega L F_0 P_s, \quad (1)$$

где $F_0 = F_0(t)$ – амплитуда напряженности электрического поля волны; P_s – амплитуда реактивной компоненты поляризации среды, которая определяется формулой

$$P_s = \frac{1}{2} \text{Im} \left\{ S_p(\hat{d}\tilde{\rho}) \right\}, \quad (2)$$

где \hat{d} – оператор дипольного момента, действующий в электронной подсистеме,

$$\tilde{\rho} = \rho e^{i(\omega t - kz)}, \quad (3)$$

ρ – оператор плотности электронной системы; k – волновое число

$$\rho = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \rho^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \quad (4)$$

Здесь \hat{H} – гамильтониан электронной системы в поле электромагнитной волны

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'_t, \quad (5)$$

\hat{H}_0 – гамильтониан электронной системы материала в отсутствие взаимодействия со светом; \hat{H}'_t – оператор взаимодействия электронной системы со светом. В предположении, что все возможные начальные состояния системы $|i\rangle$ заняты, а возможные конечные состояния свободны, $\rho^{(0)}$ в (4) можно представить в виде проекционного оператора:

$$\rho^{(0)} = \sum_i |i\rangle \langle i|. \quad (6)$$

С помощью стандартных преобразований выражение (2) приводится к виду:

$$P_s = \frac{1}{2} \text{Im} \left\{ \sum_{i,j,k} d_{kj} \exp[i(\omega_{kj} + \omega)t] s_{ji} \rho_{ii}^{(0)} s_{ik}^+ \right\}, \quad (7)$$

где E_i – энергия i -го электронного состояния, $\omega_{ij} \equiv (E_i - E_j)/\hbar$, d_{kj} , s_{ji} и s_{ik}^+ – матричные элементы оператора дипольного момента \hat{d} , оператора эволюции системы \hat{s} и эрмитово-сопряженного оператора \hat{s}^+ соответственно. Оператор \hat{s} дается выражением:

$$\hat{s} = T \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{H}'_{t_1}(t_1) \right\}, \quad (8)$$

где T – символ хронологического упорядочения операторов,

$$\hat{H}'_{t_1}(t_1) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1} \hat{H}'_{t_1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}. \quad (9)$$

Оператор взаимодействия электронной системы со светом записываем в дипольном приближении:

$$\hat{H}'_t = \hat{d} F_0(t) e^{i(\omega t - kz)}. \quad (10)$$

Выражение (7) для случая n -фотонного резонанса можно представить в виде:

$$P_s^{(n)} = \frac{1}{2} \text{Im} \left\{ \sum_{i,j,k} \sum_{p=0}^{n-1} d_{kj} \exp[i(\omega_{kj} + \omega)t] s_{ji}^{(2n-p-1)} \rho_{ii}^{(0)} s_{ik}^{(p)+} \right\}, \quad (11)$$

где $s_{ji}^{(2n-p-1)}$ и $s_{ik}^{(p)+}$ – матричные элементы операторов \hat{s} и \hat{s}^+ , рассчитанные в $(2n-p-1)$ -м и p -м порядке по полю электромагнитной волны F_0 соответственно.

Аналитические выражения для поглощенной энергии

Предположим, что световой импульс имеет гауссову форму:

$$F_0(t) = F_0^0 \exp \left[-\frac{(t-t_0)^2}{\sigma} \right]. \quad (12)$$

Представим оператор эволюции системы в виде разложения в ряд:

$$\begin{aligned} \hat{s} &= \hat{T} \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} H'_{t_1} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \right\} = \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^m \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{m-1}} dt_m H'_{t_1}(t_1) H'_{t_2}(t_2) \dots H'_{t_m}(t_m). \end{aligned} \quad (13)$$

Выражение для матричного элемента этого оператора имеет вид:

$$\begin{aligned} s_{ij}^{(n)}(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^t H'_{t_1 ik} e^{-i(\omega_{ik} \pm \omega)t_1 - \gamma t_1} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} H'_{t_2 kl} e^{-i(\omega_{kl} \mp \omega)t_2 - \gamma t_2} dt_2 \times \\ &\times \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} H'_{t_n mj} e^{-i(\omega_{mj} \mp \omega)t_n - \gamma t_n} dt_n, \end{aligned} \quad (14)$$

где γ – обратное время релаксации в электронной системе, вводимое феноменологически.

Для вычисления энергии $J^{(n)}$, поглощенной за время действия сверхкороткого светового импульса, следует проинтегрировать выражение для поглощенной мощности по времени от начала до конца импульса. С учетом формы импульса (12) интегрирование можно распространить на область от $-\infty$ до $+\infty$.

Таким образом,

$$J^{(n)} = \sum_{p=1}^n J_p^{(n)}, \quad J_p^{(n)} = -\omega L \int_{-\infty}^{\infty} Q_p^{(n)} dt, \quad (15)$$

где $Q_p^{(n)}$ даются следующим выражением

$$Q_p^{(n)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k} d_{kj} F_0(t) \exp[i(\omega_{kj} + \omega)t] s_{ji}^{(2n-p-1)}(t) \rho_{ii}^0 s_{ik}^{(p)+}(t). \quad (16)$$

Интегрирование по времени в формулах (14)–(16) оказывается технически весьма непростым. В результате весьма трудоемких вычислений получены следующие приближенные формулы для энергии $J_n = J^{(n)}/\Omega$ (Ω – объем кристалла), поглощенной в единице объема:

$$J_n \approx -\omega L \left| M_{if}^{(n)} \right|^2 n_0 \frac{2^{\frac{7}{2}n - \frac{3}{2}} \pi^{\frac{n}{2}} \sqrt{5} e^{2n}}{\varepsilon_{\infty}^{n/2} c^n \hbar^{2n-1} \sigma^{-1+n/2}} W^n \exp \left(-\frac{\omega_1 n^2}{n \sqrt{\pi}} \sigma \right) \lambda_n, \quad (17)$$

где e – заряд электрона; c – скорость света в вакууме; ε_{∞} – высокочастотная диэлектрическая проницаемость материала; n_0 – количество трехуровневых систем

(квантовых точек или примесных атомов) в единице объема вещества; $\omega_{1n} = n\omega - \omega_{fi}$ – величина расстройки n -фотонного резонанса, причем предполагается, что $\omega_1 \ll \omega$,

$$W = \frac{c(\varepsilon_\infty \sigma)^{1/2}}{8(2\pi)^{1/2}} (F_0^0)^2 \quad (18)$$

– полная энергия, проходящая через единицу площади за время импульса лазерного излучения; $M_{if}^{(n)}$ – составные матричные элементы n -го порядка оператора координаты электрона x между начальным состоянием i и конечным состоянием f :

$$M_{if}^{(2)} = \sum_j \frac{x_{ij} x_{jf}}{(\omega_{ij} + \omega)}, \quad M_{if}^{(3)} = \sum_j \frac{x_{ij} x_{jk} x_{kf}}{(\omega_{ij} + \omega)(\omega_{ik} + 2\omega)}, \quad (19)$$

$$M_{if}^{(4)} = \sum_{i,j,k} \frac{x_{ij} x_{jk} x_{kl} x_{lf}}{(\omega_{ij} + \omega)(\omega_{ik} + 2\omega)(\omega_{il} + 3\omega)} \text{ и т.д.},$$

$$\lambda_n = \sum_{p=1}^n \exp(-\Theta_p^{(n)} \gamma \sqrt{\sigma}). \quad (20)$$

В результате громоздких вычислений были получены следующие аппроксимации для фигурирующих в (20) величин $\Theta_p^{(n)}$:

$$\Theta_1^{(n)} \approx \frac{1}{8}(n+9), \quad \Theta_2^{(n)} \approx \frac{1}{3\sqrt{2\pi}}(1+3\sqrt{7n}), \quad \Theta_3^{(n)} \approx \frac{6\sqrt{2\pi}}{13} \left(1 + \frac{2}{\sqrt{\pi n}}\right), \quad (21)$$

$$\Theta_4^{(n)} \approx \frac{1}{3\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{23\sqrt{3\pi}}{2n}\right), \quad \Theta_5^{(5)} \approx \frac{1}{8} \sqrt{\frac{37\pi}{3}}.$$

В случае четных значений n разрешенными считались однофотонные переходы $0 \rightarrow 2$ и $1 \rightarrow 2$, а в случае нечетных n – переходы $0 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 2$.

Предэкспоненциальный множитель в зависимости (17) поглощенной в условиях n -фотонного резонанса энергии от длительности импульса τ_i при фиксированной значении энергии в импульсе W пропорционален $1/\tau_i^{n-2}$.

Здесь следует заметить, что в случае длинных импульсов ($\tau_i \gamma \gg 1$) поглощаемая энергия $J_n(\tau_i) \sim 1/\tau_i^{n-1}$. В самом деле, в квазистационарном случае поглощенная энергия пропорциональна $|F_0|^2$ и длительности взаимодействия τ_i , а согласно (18) $|F_0|^2 \propto 1/\tau_i$ при фиксированной энергии W в импульсе.

Поглощение фемтосекундных импульсов в системах с непрерывным спектром

В случае межзонного (межподзонного) n -фотонного резонанса в кристаллах при вычислении нелинейной поляризации среды необходимо провести в правой части (17) суммирование по электронным состояниям зоны Бриллюэна, которые характеризуются различными значениями волнового вектора \mathbf{k} и, следовательно, различными значениями расстройки двухфотонного резонанса.

Представим переменную ω_1 в (17) в виде

$$\omega_1 = \Delta_n - \frac{\hbar k^2}{2\mu}, \quad \Delta_n = n\omega - \tilde{E}/\hbar. \quad (22)$$

В случае трехмерного кристалла $\tilde{E} = E_g$, где E_g – ширина запрещенной зоны. В случае квантовых ям или проводов \tilde{E} обозначает энергетический зазор между начальной и

конечной подзонами размерного квантования при $\mathbf{k}=0$, $\mu=m_c m_v / (m_c + m_v)$ – приведенная масса электрона и дырки. Обозначим через D размерность структуры ($D=3$ в случае объемных кристаллов, $D=2$ в случае квантовых ям и $D=1$ в случае квантовых проводов). Тогда энергия, поглощенная D -мерной системой из сверхкороткого импульса в условиях n -фотонного резонанса, определяется формулой

$$J_n^{(D)} = 2 \cdot \Xi_D \int_0^\infty dk \cdot (k^2)^{(D-1)/2} J_n(k), \quad (23)$$

где $\Xi_1 = Ln_1 / (2\pi)$, $\Xi_2 = Sn_2 / (2\pi)$, $\Xi_3 = \Omega / (2\pi^2)$; L – длина (квантового провода); S – площадь квантовой ямы; n_1 – число квантовых проводов на единицу площади, перпендикулярной их направлению; n_2 – число квантовых ям на единицу длины в направлении оси их роста.

Опуская детали вычислений, приведем выражения для энергии, поглощенной в единице объема.

$$J_n^{(D)} = \eta_D \frac{2^{(7n-4)/2} 5^{1/2} \pi^{(2n-1)/4} n^{1/2} \omega \mu^{1/2} e^{2n}}{\epsilon_\infty^{n/2} c^n \hbar^{(4n-1)/2} \sigma^{(n-1)/2}} W^n \lambda_n |M^{(n)}|^2, \quad (24)$$

$$\eta_1 = n_1 / \Delta_n^{1/2}, \quad \eta_2 = (2\mu / \hbar)^{1/2} n_2, \quad \eta_3 = 2\mu \Delta_n^{1/2} / (\pi \hbar).$$

Отметим, что зависимость поглощенной энергии от отстройки резонанса от границы фундаментальной полосы получается такой же, как в случае квазистационарного поля

$$J_n^{(3)} \propto \sqrt{\Delta_n},$$

что соответствует плотности электронных состояний при $D=3$. Зависимости поглощенной энергии от отстройки от резонанса ω_1 в случае двух- и одномерных структур (при большой отстройке частоты света от двухфотонного резонанса) в основном снова совпали с их квазистационарными аналогами, т.е. $|J| \sim \text{const}$ и $|J| \sim \Delta^{-1/2}$.

Заключение

В представленной работе был выполнен теоретический анализ нелинейного отклика объемных материалов и гетероструктур с квантовыми ямами, проводами и точками на сверхкороткие световые импульсы с длительностями, меньшими времен внутризонной (внутриподзонной) релаксации импульса электрона или дырки. Получены аналитические выражения для динамических нелинейных поляризуемостей, которыми определяется энергия, поглощенная из сверхкороткого светового импульса структурами различной размерности в условиях двухфотонного резонанса на переходах между дискретными состояниями, либо между подуровнями (подзонами) размерного квантования. Получены зависимости поглощенной энергии от расстроек многофотонных резонансов для наноструктур различной размерности. Аналогичным образом, для структур различной размерности получены зависимости поглощенной световой энергии от длительности сверхкороткого импульса при фиксированной энергии в импульсе. Показано, что в случае нульмерных объектов (квантовые точки, примесные центры) эти зависимости существенно отличаются от тех, которые имеют место в случае относительно длинных импульсов.

Литература

1. Иванов А.В., Левицкий Р.С., Перлин Е.Ю. Многофотонно-лавинная генерация свободных носителей в многозонном кристалле // Оптика и спектроскопия. – 2009. – Т. 107. – № 2. – С. 272–280.

2. Du D., Liu X., Korn G., Squier J., Mourou G. Laser-induced breakdown by impact ionization in SiO₂ with pulse widths from 7 ns to 150 fs // *Appl. Phys. Lett.* – 1994. – V. 64. – № 23. – P. 3071–3073.
3. Stuart B.C., Feit M.D., Herman S., Rubenchik A.M., Shore B.W., Perry M.D. Nanosecond-to-femtosecond laser-induced breakdown in dielectrics // *Phys. Rev. B.* 1996. – V. 53. – № 4. – P. 1749–1761.
4. Lenzner M., Kruger J., Sartania S., Cheng Z., Spielmann C.H., Mourou G., Kautek W., Krausz F. Femtosecond optical breakdown in dielectrics // *Phys. Rev. Lett.* 1998. – V. 80. – № 18. – P. 4076–4079.
5. Tien A.C., Backus S., Kapteyn H., Murnane M., Mourou G. Short-Pulse Laser Damage in Transparent Materials as a Function of Pulse Duration // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V. 82. – P. 3883–3886.
6. Cerullo G., De Silvestri S., Nisoli M., Sartania S., Stagira S., Svelto O. Few-optical-cycle laser pulses: from high peak power to frequency tenability // *IEEE J. of Selected Topics in Quantum Electronics.* – 2000. – V. 6. – № 6. – P. 948–958.
7. Quere F., Guizard S., Martin Ph. Time-resolved study of laser induced breakdown in dielectrics // *Europhys. Lett.* – 2001. – V. 56. – № 1. – P. 138–144.
8. Simanovskii D.M., Schwettman H.A., Lee H., Welch A.J. Midinfrared optical breakdown in transparent dielectrics // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 91. – № 10. – P. 107601–107605.
9. Efimov O., Juodkazis S., Misawa H. Intrinsic single- and multiple-pulse laser-induced damage in silicate glasses in the femtosecond-to-nanosecond region // *Phys. Rev. A.* 2004. – V. 69. – № 4. – P. 042903–942910.
10. Winkler S.W., Burakov I.M., Stoian R., Bulgakova N.M., Husakou A., Mermillod-Blondin A., Rosenfeld A., Ashkenasi D., Hertel I. V. Transient response of dielectric materials exposed to ultrafast laser radiation // *Appl. Phys. A.* – 2006. – V. 84. – P. 413–422.
11. Bonze J., Bachelier G., Siegel J., Solis J., Sturm H. Time- and space-resolved dynamics of ablation and optical breakdown induced by femtosecond laser pulses in indium phosphide // *J. Appl. Phys.* – 2008. – V. 103. – P. 054910–054916.
12. Shoemaker R.L. Coherent IR Spectroscopy of Transient Processes // *Laser and Coherence Spectroscopy* / ed. by Jeffrey I. Steinfeld. – Plenum Press, New York, 1978. – P. 197–371.
13. Перлин Е.Ю. Оптический штарк-эффект при переходном двойном резонансе в полупроводниках // *ЖЭТФ.* – 1994. – Т. 105. – № 1. – С. 186–197.
14. Перлин Е.Ю., Елисеев К.А., Идрисов Э.Г., Халилов Я.Т. Нелинейное поглощение фемтосекундных световых импульсов при двухфотонном резонансе в объемных кристаллах и наноструктурах // *Оптический журнал.* – 2011. – Т. 78. – № 9. – С. 3–12.
15. Перлин Е.Ю. Нелинейно-оптические поляризационные эффекты в материалах с квантовыми точками // *Оптика и спектроскопия.* – 2000. – Т. 88. – № 6. – С. 987–992.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ В КРЕДИТНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ПУТЕМ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОЦЕНКИ ПЕРЕГРУЗОК В ИНФОРМАЦИОННЫХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

Д.С. Казакова

Научный руководитель – к.т.н., доцент Г.П. Жигулин

В работе освещена проблема операционных рисков, связанных с перебоями в работе автоматизированных банковских систем. Данные риски могут быть минимизированы путем проведения мониторинга и моделирования информационной нагрузки, выявления проблемных участков и прогнозирования сбоев в работе систем. Большое внимание уделено разработке методики обнаружения и прогнозирования сбоев, возникших в результате перегрузок в информационных автоматизированных системах кредитной организации, а также проектированию программного комплекса для повышения их защищенности и эффективности функционирования.

Ключевые слова: операционный риск, автоматизированная система, сбой, перегрузки, моделирование.

Введение

Современные информационные автоматизированные системы, используемые в крупных организациях, характеризуются сложной физической и логической топологией и зачастую построены неоптимальным образом, что ведет к возникновению неизбежных перегрузок, ошибок и сбоев, и как следствие, к росту рисков, связанных с обеспечением информационной безопасности.

Целью работы являлась разработка системы мониторинга, обнаружения и прогнозирования сбоев в каналах связи банковских компьютерных сетей и разработка программного комплекса для повышения их защищенности и эффективности функционирования.

Данная система позволяет на практике выявлять проблемные участки сети и автоматизированных систем, а также прогнозировать возможные сбои, что позволит снизить финансовые, правовые и репутационные риски банка.

Основная часть

Особое место в данной проблеме занимают кредитные организации, где большинство обрабатываемой информации является конфиденциальной и охраняется законом. Приложения, с которыми работают сотрудники банков, могут генерировать трафик, превышающий пропускную способность внутренних каналов связи. Все это приводит к возникновению перегрузок на участках сети, а, следовательно, к нарушению нормального функционирования банковских систем, что является прямым следствием нарушения безопасности передачи информации и снижения качества услуг в целом.

Для достижения поставленной цели необходимо решение следующих задач:

1. анализ существующих методов и базовых средств мониторинга автоматизированных систем кредитной организации и сетей их связывающих;
2. выбор модели сегмента взаимодействия (элементарного элемента), которая позволит определить время обработки данных в любом элементе исследуемого участка [1];
3. разработка метода, позволяющего выявлять загруженность элементов автоматизированной системы;
4. выбор метода прогнозирования операционных рисков в автоматизированных системах и сетях их связывающих.

Разработка механизмов мониторинга и прогнозирования подобных ошибок является актуальной, важной задачей и неотъемлемым элементом комплекса мер по обеспечению безопасной эксплуатации сети любой крупной организации. Мониторинг рискованных событий позволяет отслеживать угрозы, определять время, место и причины возникновения ошибок. Прогнозирование интенсивности трафика в информационных автоматизированных системах дает возможность заранее предпринимать необходимые меры по предупреждению последствий [2].

Методы исследования данной модели базируются на теории математической статистики, теории вероятности событий, теории вычислительных сетей и систем. Научной базой статистических методов прогнозирования является прикладная статистика и теория принятия решений на основе использования временных рядов [3], которые ранее не применялись для проведения подобного анализа. Методы, используемые для прогнозирования зависимостей, исходят из заданной функции, определенной в конечном числе точек на оси времени [4]. Временной ряд при этом часто рассматривается в рамках той или иной вероятностной модели, вводятся другие факторы (независимые переменные), помимо времени, например, объем денежных средств, кредитные параметры. Временной ряд может быть многомерным [5].

Большое внимание уделено реализации подхода к прогнозированию операционных рисков в части перегрузок на основе статистических данных, построенных на основе рядов. Объектом наблюдения является информационная автоматизированная система в кредитной организации и ее системные связи. Для мониторинга загрузки каналов используются возможности управляемого сетевого оборудования [6] – сбор информации о входящем и исходящем трафике на каждом из портов коммутаторов. Для получения полной картины функционирования системы этой информации использован подход к мониторингу локальных каналов путем измерения времени повторного оборота пакетов [7].

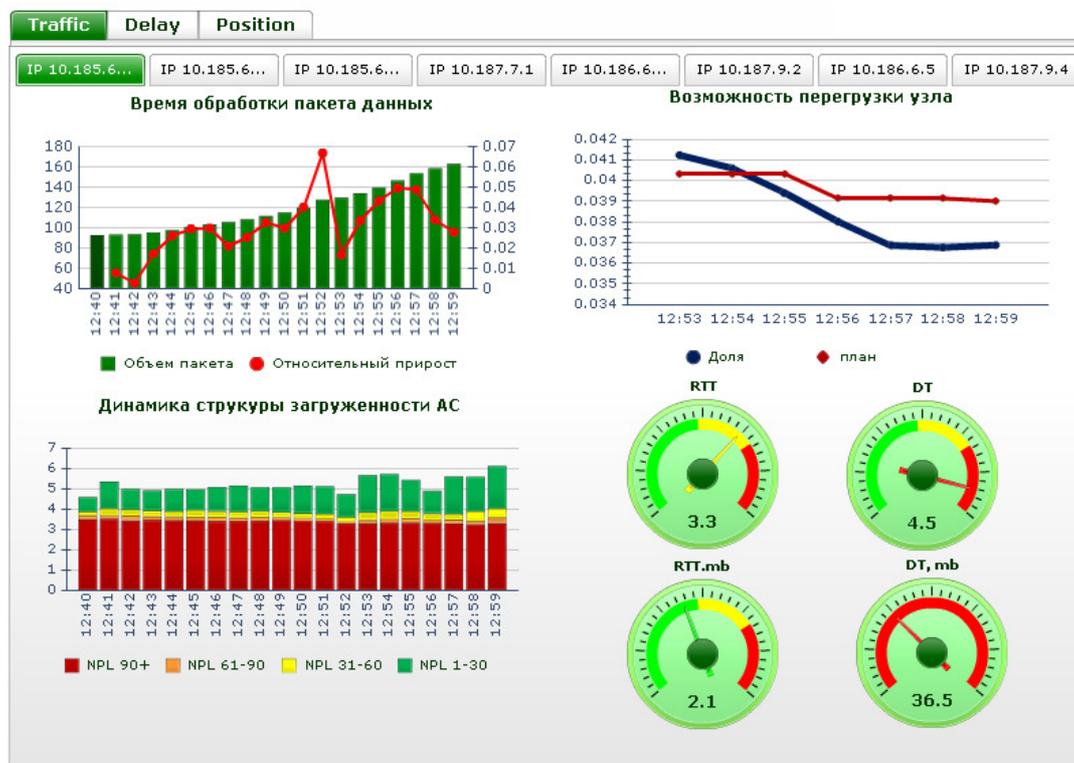


Рисунок. Окно приложения по мониторингу случаев операционного риска

На рисунке показано одно из представлений экрана разработанной системы, которая на данный момент проходит тестирование в одном из коммерческих банков

Санкт-Петербурга и уже получила акт технической экспертизы организации. Как видно на рисунке, разработанная модель позволяет отслеживать трафик, время задержек, местоположение возможной перегрузки. Показанная модель является динамичной, что позволяет проводить оперативный мониторинг банковской сети и выявлять проблемные места в работе автоматизированных систем. Данная модель разработана при помощи программного средства MS Business.Objects.Xcelsius.Engage.2008, что обеспечивает удобные средства визуализации.

Заключение

По результатам работы были решены проблемы по мониторингу и прогнозированию перегрузок и сбоев в автоматизированных системах кредитной организации и разработке программного комплекса для мониторинга и предупреждения операционных рисков, а также повышения защищенности и эффективности функционирования систем банка.

В ходе исследования был проведен анализ существующих методов мониторинга и представлен обзор базовых средств мониторинга автоматизированных систем. Анализ перегрузок на основе применения именно временных рядов и двойного оборота пакетов позволил внедрить новую тактику обнаружения перегрузок в сегменте сети и разработать программный продукт, позволяющий проводить мониторинг бесперебойной работы систем и обеспечивающий работу ее сетей.

Полученные результаты имеют практическую ценность и могут быть внедрены в крупные организации при показании значительного экономического эффекта, который будет возрастать при введении в эксплуатацию дополнительных автоматизированных систем и расширении сети.

Литература

1. Соколов А.С. Моделирование сегмента вычислительной сети и выявление проблемных участков в процессе мониторинга // Научно-практический журнал «Прикладная информатика». – М., 2011. – № 3. – С. 116–120.
2. Бойченко М.К., Иванов И.П. Мониторинг ресурсов узлов корпоративной сети // Вестник МГТУ. Приборостроение. – М., 2009. – № 2. – С. 114–120.
3. Кендалл М., Стьюарт А. Многомерный статистический анализ и временные ряды. – М.: Наука, 1976. – 736 с.
4. Крянев А.В., Лукин Г.В. Математические методы обработки неопределенных данных. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 216 с.
5. Петрунин Ю.Ю. Информационные технологии анализа данных. Data analysis: Учебное пособие. – М.: КДУ, 2008. – 292 с.
6. Уилсон Э. Мониторинг и анализ сетей. Метод выявления неисправностей. – М.: Лори, 2002. – 350 с.
7. Шаньгин В.Ф. Информационная безопасность компьютерных систем и сетей: Учебное пособие. – М.: ИД «ФОРУМ», 2008. – 416 с.

МАГНИТНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ, ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЕ ПРИ ПОМОЩИ СВЕТА

П.В. Капитанова, С.А. Масловский, И.В. Шадривов, П.А. Белов, Ю.С. Кившарь

Предложен новый подход к реализации магнитных метаматериалов микроволнового диапазона частот с характеристиками, перестраиваемыми с помощью света. Исследуются характеристики разомкнутого кольцевого резонатора, в который интегрированы варакторный диод, для обеспечения перестройки и нелинейного отклика, и фотодиод, для подачи постоянного напряжения смещения, зависящего от освещенности. Показано, что изменение освещенности сдвигает резонансный отклик единичного резонатора вверх по частоте. Рассмотрены связанные кольцевые резонаторы и продемонстрировано переключение между темной и яркой модой в такой системе.

Ключевые слова: метаматериалы, кольцевой резонатор, управление светом, СВЧ.

Введение

Искусственные электромагнитные метаматериалы обладают такими уникальными свойствами как искусственный магнетизм в оптическом диапазоне, отрицательный индекс преломления, увеличенная хиральность и многие другие [1–3] (см. также [4, 4]). Метаматериалы находят широкое применение, в частности, для создания суперлизов со сверхразрешением или для устройств, работающих на принципах трансформационной оптики [6, 6].

Большинство разработанных метаматериалов имеют постоянные свойства. В последнее время появляется интерес к метаматериалам с перестраиваемыми характеристиками, перестройка которых может достигаться за счет внешних воздействий [8] или же за счет привлечения нелинейных свойств самих метаматериалов [9].

В диапазоне сверх высоких частот (СВЧ) элементарная ячейка перестраиваемого метаматериала может быть представлена как кольцевой резонатор, нагруженный на варакторный диод. Варакторный диод может работать как в режиме без постоянного смещения, так и при постоянном смещении [10, 11]. Использование такой ячейки позволяет создавать объемные метаматериалы, управляемые мощностью [12]. Кроме того, такие искусственные нелинейные среды обладают различными нелинейными эффектами, доступными при низких уровнях мощности, к примеру, нелинейные оптические зеркала [13, 14].

В настоящей работе представлен новый подход к созданию электромагнитных материалов, управляемых при помощи света. Экспериментально продемонстрировано, что магнитный резонанс кольцевых резонаторов со встроенными фотодиодами, работающими в фотовольтаическом режиме, может перестраиваться при изменении интенсивности источника света.

Структура кольцевого резонатора, перестраиваемого светом

Для того чтобы изучать свойства объемного метаматериала, перестраиваемого при помощи света, сначала нужно изучить свойства единичного кольцевого резонатора, схематическое изображение которого представлено на рис. 1, а. Изучаемый кольцевой резонатор представляет собой два разорванных и вложенных друг в друга кольца. Чтобы обеспечить перестройку включаются варакторные диоды в дополнительный разрыв, сделанный во внешнем кольце. Постоянное напряжение подается на варакторный диод от параллельно подключенного фотодиода, который работает в фотовольтаическом режиме. Для предотвращения шунтирования

варакторного диода большой собственной емкостью фотодиода используются индуктивности, подключенные последовательно по отношению к фотодиоду.

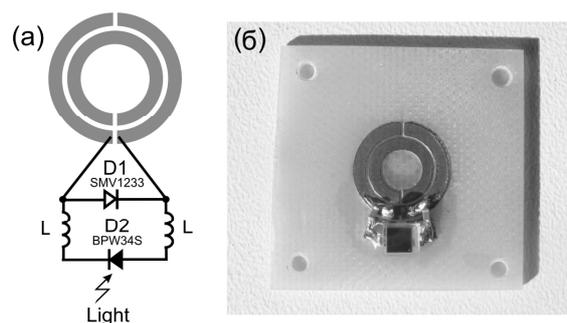


Рис. 1. Кольцевой резонатор, перестраиваемый при помощи света: схематическое изображение (а) и фотография тестового образца (б)

Так как фотоЭДС, возникающая на обкладках фотодиода, зависит от величины освещенности, то получаем зависимость емкости варакторного диода от этой величины. В свою очередь, емкость варакторного диода включена последовательно с емкостью кольцевого резонатора. Изменение емкости варактора приводит к изменению этой суммарной величины и приводит к сдвигу резонансной частоты. Таким образом, резонансная частота кольцевого резонатора становится зависимой от величины освещенности.

Кольцевой резонатор был изготовлен на диэлектрической подложке FR4 с относительной диэлектрической проницаемостью $\epsilon_r = 4,4$ и толщиной 1,5 mm. Фотография тестового образца показана на рис. 1, б. Геометрические размеры резонатора составляют: радиус внутреннего кольца 2,56 mm; ширина кольца 1,44 mm; зазор между внутренним и внешним кольцами и разрывы в кольцах – 0,32 mm. В работе использовались варакторный диод SkyworksTM SMV1233, фотодиод BPW-34-S от Opto SemiconductorsTM и индуктивность LQG18HN22NJ00D фирмы Murata. Варакторный диод впаян в разрыв внешнего кольца, в то время как для индуктивностей и фотодиода сделаны специальные контактные площадки, которые не влияют на характеристики в целом.

Результаты экспериментального исследования кольцевого резонатора перестраиваемого светом. Для того чтобы измерить магнитный резонансный отклик изготовленного образца кольцевого резонатора необходимо возбудить его внешним магнитным полем. Специально для этого была изготовлена симметричная микрополосковая кольцевая антенна, расположенная над исследуемым образцом резонатора на расстоянии 5 mm (рис. 2, а). Антенна подсоединялась к векторному анализатору цепей при помощи кабеля. Измерялся коэффициент отражения S_{11} (в кабеле), когда кольцевая антенна была связана с перестраиваемым резонатором для разного уровня освещенности E_v . Минимум коэффициента отражения соответствует максимуму мощности, которая поступает в резонатор из антенны, что происходит на резонансной частоте резонатора. Из результатов экспериментального исследования (рис. 2, б) можно видеть, что резонансная частота сдвигается с 2,276 GHz на 2,29 GHz при изменении освещенности от 0 lx до 4 klx. Стоит отметить, что ширина полученного сдвига соответствует ширине резонанса.

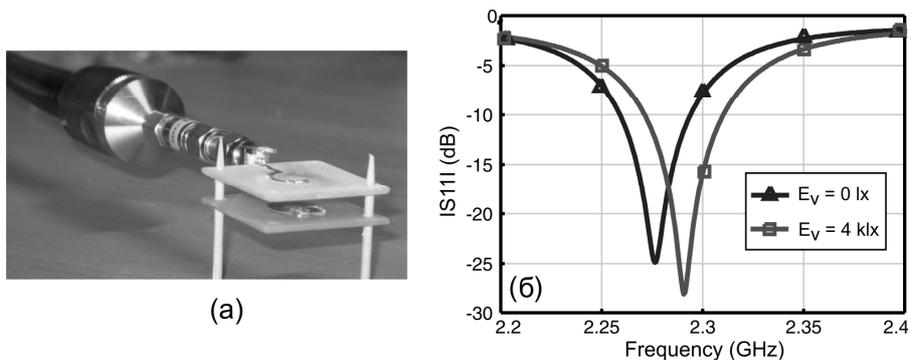


Рис. 2. Фотография тестового образца кольцевого резонатора, возбуждаемого симметричной микрополосковой кольцевой антенной (а); результаты экспериментального исследования коэффициента отражения для разных уровней освещенности E_V (б)

Так как сдвиг резонансной частоты резонатора обеспечен изменением емкости варакторного диода, то можно оценить перестройку с помощью численного моделирования в программном пакете CST Microwave Studio. Рассмотрим структуру резонатора, нагруженного на конденсатор в свободном пространстве. Используем периодические граничные условия. Зададим возбуждение плоской волной, электрическая компонента которой нормальна, а магнитная компонента ортогональна к плоскости частицы. Рассчитав модуль и фазу коэффициента отражения для такой структуры при различных значениях номинала емкости конденсатора, можно извлечь значение магнитной поляризуемости для данного резонатора. Полученные результаты представлены на рис. 3. Можно сделать вывод, что изменение емкости конденсатора составляет примерно 0,75 pF.

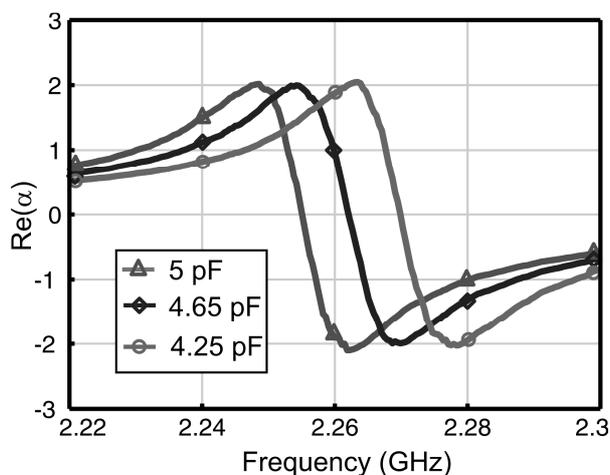


Рис. 3. Вещественная часть магнитной поляризуемости, извлеченная из результатов электродинамического моделирования

Исследование структуры связанных кольцевых резонаторов, перестраиваемых светом

Для того чтобы увеличить чувствительность исследуемых резонаторов к величине освещенности можно использовать другой подход. Вместо рассмотрения единичного кольцевого резонатора можно рассматривать несколько связанных идентичных кольцевых резонаторов. Дело в том, что когда два или более резонаторов объединяют в одну систему, резонанс расщепляется на несколько резонансов, что соответствует различному распределению амплитуды и фазы сигнала вдоль резонатора. Такие резонансы известны, как нормальные моды.

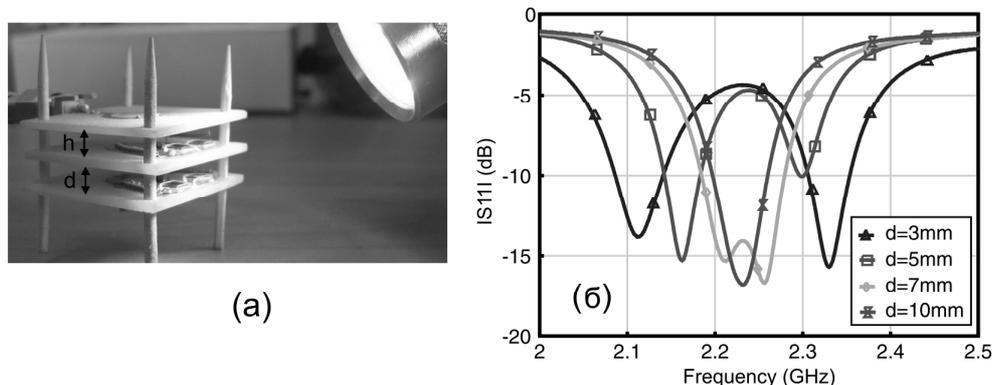


Рис. 4. Структура связанных кольцевых резонаторов, возбуждаемых антенной (а); частотная зависимость расщепления резонансной частоты для разных значений расстояния между двумя связанными кольцевыми резонаторами (б)

В случае двух связанных резонаторов, когда резонаторы расположены друг над другом, как показано на рис. 4, а, возникают две моды. На одной моде токи в резонаторах сонаправлены (четная мода), а на другой моде токи направлены встречно по отношению друг к другу (нечетная мода). Если такая связанная структура резонаторов помещена в однородное магнитное поле, то четная мода имеет сильную связь с внешним полем, а нечетная мода не взаимодействует с внешним полем. Исходя из этого, четную моду еще принято называть яркая мода (она ассоциируется с сильным суммарным магнитным моментом, сильным рассеянием и низкой частотой), а нечетную моду называют темная мода (она ассоциируется с отсутствием магнитного момента, рассеяния и высокой частотой).

Расщепление резонансной частоты зависит от расстояния между двумя связанными кольцевыми резонаторами. Так можно контролировать расщепление резонанса без использования света. Если подобрать расстояние между резонаторами и настроить структуру так, что частотный сдвиг между резонансными кривыми будет соответствовать резонансному сдвигу, получаемому при освещении резонатора, то можно добиться перестройки характеристик между яркой и темной модой при помощи света для фиксированной частоты электромагнитной волны. Кроме того, если пару таких связанных резонаторов поместить в однородное поле, то перестройка при помощи света будет эффективнее за счет большей намагниченности.

Чтобы проверить данное предположение, было произведено экспериментальное исследование пары связанных кольцевых резонаторов (рис. 4, а).

Для возбуждения структуры использовалась симметричная микрополосковая антенна, которая располагалась на расстоянии $h=5\text{ mm}$ над верхним резонатором. Сначала исследовалась зависимость расщепления резонансных частот на четную и нечетную моду от расстояния между резонаторами. Результаты измеренного коэффициента отражения для разных значений d представлены на рис. 4, б. Видно, что когда расстояние между кольцевыми резонаторами велико, связь между ними слабая и наблюдается только один резонансный отклик. По мере уменьшения расстояния между кольцевыми резонаторами, связь между ними усиливается, что приводит к расщеплению резонансной кривой. Чем меньше расстояние, тем больше частотное расщепление резонансов.

Рис. 5, а, показывает перестройку между яркой и темной модой при помощи света в структуре связанных кольцевых резонаторов, когда расстояние между ними равно $d=8\text{ mm}$. Из рисунка видно, что при изменении освещенности от 0 lx до 4 klx резонансный отклик смещается вправо. В результате, если внешняя электромагнитная волна с частотой примерно $2,23\text{ GHz}$ взаимодействует с темной модой при нулевой освещенности, то при освещении фотодиода свойства связанных кольцевых

резонаторов изменяются так, что волна начинает взаимодействовать с яркой модой. Другими словами, изначально немагнитная частица будет приобретать сильный магнитный отклик. Зависимость сдвига частоты темной и яркой моды от освещенности представлена на рис. 5, б.

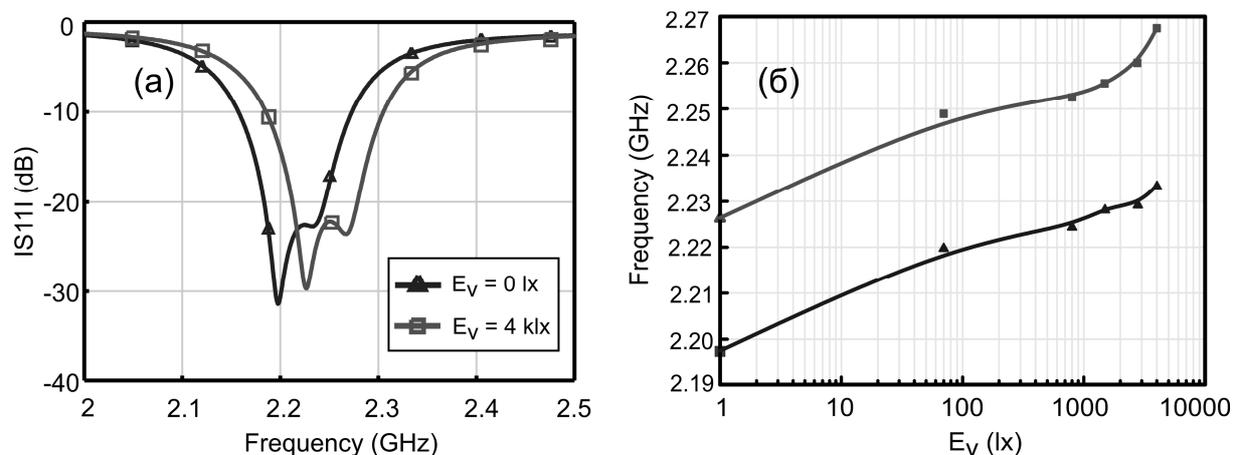


Рис. 5. Перестройка между темной и яркой модой при помощи света (а); зависимость сдвига частоты темной и яркой моды от освещенности (б)

Заключение

Предложен новый подход к созданию перестраиваемых магнитных метаматериалов, в которых перестройка происходит под влиянием света. Был разработан и экспериментально исследован кольцевой резонатор, управляемый светом. Резонатор был нагружен на варакторный диод и питался постоянным напряжением от фотодиода, работающего в фотовольтаическом режиме. Было экспериментально показано, что характеристики резонатора перестраиваются при освещении фотодиода. Было предложено использовать систему связанных кольцевых резонаторов, для того чтобы увеличить чувствительность исследуемых резонаторов к величине освещенности. Авторы уверены, что предложенный метод создания перестраиваемых кольцевых резонаторов позволит создать новый класс метаматериалов, управляемых светом.

Работа была поддержана Министерством образования Российской Федерации, Фондом Династия, Фондом РФФИ, Australian Research Council (Australia). Авторы благодарны за помощь П.М. Ворошилову, Д.С. Филонову, А.П. Слободянюку.

Литература

1. Veselago V.G. The electromagnetics of substances with simuntaneously negative values of ϵ and μ // *Sov. Phys. Uspekhi*. – 1968. – V. 10. – P. 509–514.
2. Pendry J.B. Negative refraction makes a perfect lens // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 85. – P. 3966–3969.
3. Shelby R., Smith D.R., Schultz S. Experimental verification of a negative index of refraction // *Science*. – 2001. – V. 292. – № 5514. – P. 77–79.
4. Soukoulis C.M., Wegener M. Optical metamaterials: More bulky and less lossy // *Science*. – 2010. – V. 330. – № 6011. – P. 1633–1634.
5. Boardman A.D., Grimalsky V.V., Kivshar Yu.S., Koshevaya S.V., Lapine M., Litchinitser N.M., Malnev V.N., Noginov M., Rapoport Yu.G., Shalaev V.M. Active and tunable metamaterials // *Laser Photon. Rev.* – 2011. – V. 5. – № 2. – P. 287–307.

6. Leonhardt U. Optical conformal mapping // *Science*. – 2006. – V. 312. – P. 1777.
7. Pendry J.B., Schurig D., Smith D.R. Controlling electromagnetic fields // *Phys. Rev. B*. – 2006. – V. 312. – P. 1780–1782.
8. Padilla W.J., Taylor A.J., Highstrete C., Lee M., Averitt R.D. Dynamical electric and magnetic metamaterial response at terahertz frequencies // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – V. 96. – P. 107401.
9. Zharov A.A., Shadrivov I.V., Kivshar Yu.S. Nonlinear properties of left-handed metamaterials // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 91. – P. 03740 (1–4).
10. Shadrivov I.V., Morrison S.K., Kivshar Yu.S. Tunable split-ring resonators for nonlinear negative-index metamaterials // *Opt. Express*. – 2006. – V. 14. – P. 9344–9349.
11. Wang B., Zhou J., Koschny T., Soukoulis C.M. Nonlinear properties of split-ring resonators // *Opt. Express*. – 2008. – V. 16. – P. 16058.
12. Shadrivov I.V., Kozyrev A.B., Van Der Werde D.W., Kivshar Yu.S. Tunable transmission and harmonic generation in nonlinear metamaterials // *Opt. Express*. – 2008. – V. 16. – P. 20266.
13. Shadrivov I.V., Zharov A.A., Kivshar Y.S. Second-harmonic generation in nonlinear left-handed metamaterials // *J. Opt. Soc. Am. B*. – 2006. – V. 23. – P. 529.
14. Rose A., Huang D., Smith D.R. Controlling the second harmonic in A phase-matched negative-index metamaterial // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – V. 107. – P. 063902.

УДК 681.5.015, 681.51

АДАПТИВНОЕ ГИБРИДНОЕ УПРАВЛЕНИЕ СУЩЕСТВЕННО НЕЛИНЕЙНЫМИ СИСТЕМАМИ

С.А. Колюбин

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.А. Бобцов

Решается задача синтеза гибридной модели, аппроксимирующей динамику нелинейной системы с достаточной точностью и имеющей удобную структуру для разработки соответствующих алгоритмов управления. Предложенный подход обеспечивает возможность адаптации результирующей модели в режиме реального времени. Рассматривается схема комбинированного управления.

Ключевые слова: нелинейная система, гибридная модель, комбинированное управление, идентификация.

Введение

Для сложных нелинейных систем задача синтеза алгоритмов управления является крайне нетривиальной (например, [1]). В то же время множество реальных технических систем, если не прибегать к существенным модельным упрощениям, являются таковыми.

Если в качестве математических моделей для подобных систем использовать системы дифференциальных уравнений, построенных на основании физических закономерностей, то точность воспроизведения динамики будет высока, однако такое описание является весьма громоздким, что заметно усложняет его использование при синтезе алгоритмов управления.

Альтернативным подходом является использование аппроксимирующих моделей с заранее определяемой структурой, что удобно для разработки регуляторов. В этом случае ключевым моментом является компромисс между точностью модели и ее простотой.

Одним из естественных решений могут быть гибридные модели. Основная идея подхода состоит в том, что нелинейная динамика системы для каждого отдельного режима может быть достаточно точно описана упрощенной локальной моделью.

Результирующая гибридная модель в этом случае определяется как совокупность локальных моделей, объединенных соответствующим правилом переключения.

Наиболее распространенными формами аппроксимации нелинейной динамики являются кусочно-аффинные и смешанные логическо-динамические системы. Эквивалентность различных классов гибридных моделей и методы преобразований между ними анализируются в работах [2, 3].

Результирующая модель, получаемая в настоящей работе, близка по своей структуре к кусочно-аффинным системам. Предлагаемый подход отличается тем, что в качестве локальных используются нелинейные авторегрессионные модели, для разделения по режимам учитываются только значения характерных переменных, а не всех векторов состояния и входов. С другой стороны, представляемая работа имеет общие точки с другим методом аппроксимации нелинейных систем с помощью моделей Такаги–Сугено на основе нечеткой логики [4].

Отдельной задачей является выбор алгоритма переключения между локальными моделями. Будем условно выделять два типа переключения: «жесткое» и «смешанное». Под «жестким» переключением имеются ввиду два метода, получившие распространение в современной теории управления: с задержкой по времени или с гистерезисом [5, 6]. В обоих случаях в момент переключения происходит скачок управления, реакция на который снижает качество регулирования. С целью избежать подобного негативного эффекта, в настоящей работе рассматривается «смешанное» переключение [7, 8].

В большинстве современных систем управления используются цифровые электронные компоненты, составляющие сенсорные блоки и непосредственно управляющий контроллер, что ведет к дискретизации процессов в системе в целом. Далее, в настоящей работе математические модели и алгоритмы управления приводятся в дискретном времени, так как подобная форма представления более соответствует практике.

Итак, пусть задачей управления является стабилизация выходной переменной системы. Это может быть формализовано в виде следующего целевого неравенства:

$$|y(k) - y^*| \leq \varepsilon, \forall k > T,$$

где $y(k)$ – значение выходной переменной на k -ом шаге; y^* – желаемое значение выходной переменной; ε – точность стабилизации; T – время настройки регулятора.

Разработка гибридной модели системы

В качестве локальных используются нелинейные авторегрессионные модели:

$$y(k) = \sum_{i=1}^n a_i y(k-i) + \sum_{j=0}^p \mathbf{b}_j^T \mathbf{d}(k-j), \quad (1)$$

где коэффициенты a_i и векторы коэффициентов b_j предполагаются неизвестными; порядки полиномов $n \geq 1$, $p \geq n-1$, а $\mathbf{d}(k)$ обозначает вектор внешних входов.

Если среди всех сигналов выделяется сигнал управления и необходимо сохранить линейность модели относительно него, то из вектора входов необходимо исключить все компоненты, содержащие его в степени больше единицы. В этом случае для вектора входов в (1) можно записать

$$\mathbf{d}(k) = \left[\mathbf{d}_1^T(k) \quad \mathbf{d}_2^T(k) \right]^T, \quad (2)$$

где $\mathbf{d}_1(k) = \tilde{\mathbf{d}}(k)u(k)$; $\tilde{\mathbf{d}}(k) = [1 \quad \tilde{d}_2(k) \quad \dots \quad \tilde{d}_l(k)]$; $u(k)$ – сигнал управления.

Уравнение (2) показывает, что для вектора внешних входов можно провести декомпозицию на две составляющие, одна из которых $\mathbf{d}_1(k)$ включает в себя входы системы, зависящие линейно от сигналов управления $u(k)$. Для такого типа систем задачи анализа управляемости полученной модели и непосредственно синтеза алгоритмов управления имеют значительно более простое решение.

Для синтеза локальных моделей для каждого j -го режима может быть использован следующий алгоритм.

1. Задать диапазоны допустимых значений для каждого из параметров n_j , p_j и сформировать соответствующий вектор входов.
2. Для модели в форме (1) при текущих значениях n_j и p_j и векторе входа провести идентификацию неизвестных параметров $a_{i,j}$ и $\mathbf{b}_{m,j}$.
3. Оценить качество аппроксимации.
4. Если используемый набор параметров модели обеспечивает лучшее качество аппроксимации по сравнению с предыдущими итерациями, зафиксировать текущие вектор входов \mathbf{d} , порядки полиномов n_j и p_j и оценки параметров $a_{i,j}$ и $\mathbf{b}_{m,j}$ как оптимальные.
5. Повторить предыдущие пункты до осуществления полного перебора параметров модели.

Для идентификации неизвестных параметров $a_{i,j}$ и $\mathbf{b}_{m,j}$ модели (1) может быть использован любой из известных методов [9, 10]. Для этого предварительно перепишем модель (1) в следующей форме:

$$y_j(k) = \theta_j^T \varphi_j(k), \quad (3)$$

где $\theta_j = [a_{1,j} \dots a_{n_j,j} \mathbf{b}_{0,j}^T \dots \mathbf{b}_{p_j,j}^T]^T$; $\varphi_j(k) = [y_j(k-1) \dots y_j(k-n_j) \mathbf{d}_j^T(k) \dots \mathbf{d}_j^T(k-p_j)]^T$.

Идентификация проводится на основе имеющихся массивов из N_j измерений $\mathbf{Y}_j = [y_j(1) \dots y_j(N_j)]^T$. Метод наименьших квадратов для оценки параметров модели (3) дает следующее решение:

$$\hat{\theta}_j = (\Phi_j^T \Phi_j)^{-1} \Phi_j^T \mathbf{Y}_j. \quad (4)$$

Для оценки точности аппроксимации вводятся следующие показатели:

- среднеквадратичная ошибка: $J = \sqrt{N^{-1} \sum_{k=1}^N e^2(k)}$, где $e(k) = y^*(k) - y(k)$; $y^*(k)$ – реальный выход моделируемой системы, например, записанный в результате экспериментов; $y(k)$ – текущий выход аппроксимирующей модели;
- максимальная ошибка: $e_m = \max_{1 \leq k \leq N} |e(k)|$.

Далее пусть для характерной переменной $x(k)$ определены граничные значения для каждого из интервалов $Z_j, j = 1: N_z - 1$, где N_z – общее число интервалов, тогда для одномерного разбиения в каждый дискретный момент времени можно вычислить функцию принадлежности:

$$s_j(k) = \begin{cases} 1, & \text{если } Z_{j-1} \leq x(k) \leq Z_j, \\ 1 - \frac{x(k) - Z_j}{\Delta_Z}, & \text{если } Z_j \leq x(k) \leq Z_j + \Delta_Z, \\ 1 - \frac{Z_{j-1} - x(k)}{\Delta_Z}, & \text{если } Z_{j-1} - \Delta_Z \leq x(k) \leq Z_{j-1}, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (5)$$

где $\Delta_Z < \min_{j=2:N_z} (Z_j - Z_{j-1})$ представляет собой буферную зону между интервалами, которая вводится специально, чтобы сгладить переходы между режимами.

Функция принадлежности, определяемая на основании алгоритма (5), имеет трапецеидальное распределение (рисунок).

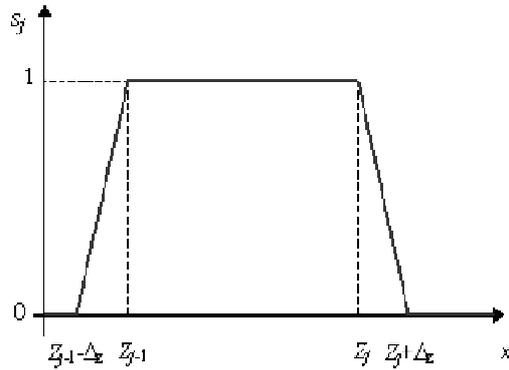


Рисунок. Графики распределения функции принадлежности $s_j(x(k))$ для одномерного случая

Нормировка степени принадлежности проводится на основании соотношения

$$\bar{s}_j(k) = \frac{s_j(k)}{\sum_{i=1}^{N_z} s_i(k)}.$$

Адаптация в системе осуществляется посредством автоматического корректирования значений функции принадлежности на основании величины ошибки между выходом аппроксимирующей модели и текущим значением регулируемой переменной:

$$\begin{cases} \tilde{s}_j(k) = \bar{s}_j(k) J_j^0(k), \\ J_j^0(k) = e^{-\alpha \sqrt{M^{-1} \sum_{i=0}^M (y^*(k-i) - \hat{\theta}_j^T \varphi_j(k-i))^2}}, \end{cases}$$

где параметр $\alpha > 0$ и ширина скользящего окна M выбираются разработчиком, а оценки $\hat{\theta}_j^T$ находятся из алгоритма идентификации (4).

В этом случае выход результирующей модели определяется как взвешенное среднее выходов локальных моделей:

$$y(k) = \sum_{j=1}^{N_z} \tilde{s}_j(k) \hat{\theta}_j^T \varphi_j(k). \quad (6)$$

Синтез алгоритма управления

Рассмотрим систему комбинированного управления, включающую прямую и обратную связи.

Для синтеза алгоритма управления по прямой связи за основу были взяты методы управления, использующиеся при решении обратных задач динамики [11]. Преобразуем систему (6) к следующему виду:

$$y(k+1) = \sum_{i=0}^n \mathbf{W}_{j,i}^y y(k-i) + \sum_{l=-1}^p \mathbf{W}_{j,l+1}^1 \mathbf{f}_1(k-l) + \sum_{l=-1}^p [\mathbf{W}_{j,l+1}^u + \mathbf{W}_{j,l+1}^0 \mathbf{F}_0(k-l)] u(k-l), \quad (7)$$

где $\mathbf{W}_{j,i}^y$, $\mathbf{W}_{j,l+1}^1$, $\mathbf{W}_{j,l+1}^u$, $\mathbf{W}_{j,l+1}^0$ – значения векторов неизвестных параметров, зависящие от времени, а $y(k)$, $u(k)$, $\mathbf{f}_1(k)$ и $\mathbf{F}_0(k)$ – выходы, управления и дополнительные входы системы соответственно в каждый дискретный момент времени k . Векторы $\mathbf{f}_1(k)$ и $\mathbf{F}_0(k)$ формируются на основании компонент исходного вектора входов модели $\mathbf{d}_2(k)$ и $[\tilde{d}_2(k) \dots \tilde{d}_l(k)]$ соответственно (2).

Инвертируя систему (7) относительно сигнала управления, получаем выражение

$$u(k+l) = [\mathbf{W}_{j,0}^u + \mathbf{W}_{j,0}^0 \mathbf{F}_0(k+1)]^{-1} \{ y^*(k+1) + \sum_{i=0}^z \mathbf{A}_i (y(k-i) - y^r(k-i)) - \sum_{i=0}^n \mathbf{W}_{j,i}^y y(k-i) - \sum_{l=-1}^p \mathbf{W}_{j,l+1}^1 \mathbf{f}_1(k-l) - \sum_{l=0}^p [\mathbf{W}_{j,l+1}^u + \mathbf{W}_{j,l+1}^0 \mathbf{F}_0(k-l)] u(k-l),$$

где y^* – обозначает желаемый выход системы, а матрица коэффициентов \mathbf{A}_i выбирается таким образом, чтобы гарантировать устойчивость модели ошибки $e(k) = \sum_{i=0}^z \mathbf{A}_i e(k-i)$.

Для синтеза управления по обратной связи был использован нелинейный пропорционально-интегрально-дифференциальный регулятор (ПИД-регулятор):

$$u_{fb}(k) = k_1 e(k) + k_2 \sum_{i=0}^k e(i) + k_3 \sum_{i=1}^k (e(i) - e(i-1)) + k_4 \text{sign}(e(k)) + k_5 e^3(k), \quad (8)$$

где коэффициенты регулятора $k_1 \dots k_5$ настраиваются, исходя из требований устойчивости замкнутой системы.

Данный алгоритм содержит две нелинейные функции от ошибки. Кубический член в уравнении (8) позволяет обеспечить наиболее быструю реакцию по ошибке по сравнению с пропорциональной составляющей, и в тоже время нечетная степень позволяет учесть знак ошибки. В свою очередь, введение функции знака позволяет гарантировать робастность динамики ошибки регулирования по отношению к малым шумам в канале управления.

Заключение

В работе рассмотрен оригинальный подход к синтезу гибридных аппроксимирующих моделей для нелинейных систем. Предполагается использование локальных нелинейных авторегрессионных моделей для отдельных динамических режимов системы и организация переключения между ними на основе «смешивания».

Адаптация в системе осуществлялась за счет коррекции весовых функций принадлежности к отдельным режимам в процессе функционирования.

Предлагается схема комбинированного управления. Синтез управления по прямой связи проводится решением обратной задачи динамики. В свою очередь, в обратной связи используется нелинейным ПИД-регулятор.

Вывод моделей и синтез регуляторов проводится в дискретном времени, что соответствует на практике динамике современных систем с цифровыми электронными компонентами.

В качестве направлений дальнейшей работы можно обозначить исследование методов автоматического выделения динамических режимов в системе и разработку более эффективных схем переключения, позволяющих обеспечить одновременно робастность системы и высокие показатели качества регулирования.

Литература

1. Мирошник И.В., Никифоров В.О., Фрадков А.Л. Нелинейное и адаптивное управление сложными динамическими системами. – СПб: Наука, 2000. – 549 с.
2. Heemels W.P.M.H., De Schutter B., Bemporad A. Equivalence of hybrid dynamical models // *Automatica*. – 2001. – № 37. – P. 1085–1091.
3. Bemporad A. Efficient Conversion of Mixed Logical Dynamical Systems Into an Equivalent Piecewise Affine Form // *IEEE Transaction on Automatic Control*. – 2004. – V. 49. – № 5. – P. 832–838.
4. Takagi T. and M. Sugeno. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control // *IEEE Trans. Syst., Man, Cybern.* – 1985. – V. 15. – № 1. – P. 116–132.
5. Liberzon D. *Switching in Systems and Control*. – Boston: Birkhauser, 2003. – 233 p.
6. Efimov D.V. Uniting Global And Local Controllers Under Acting Disturbances // *Automatica*. – 2006. – № 42. – P. 489–495.
7. Han Z. and K.S. Narendra. Multiple Adaptive Models for Control // *Proc. 49th IEEE Conference on Decision and Control*. – 2010. – P. 60–65.
8. Kuipers M. and P. Ioannou. Multiple model adaptive control with mixing // *IEEE Transactions on Automatic Control*. – 2010. – V. 55. – № 8. – P. 1822–1836.
9. Льюнг Л. Идентификация систем. Теория для пользователя. – М.: Наука, 1991. – 432 с.
10. Эйкхофф П. Основы идентификации систем управления. Оценивание параметров и состояния. – М.: Мир, 1975. – 684 с.
11. Крутько П.Д. Обратные задачи динамики в теории автоматического управления. Цикл лекций: Учеб. пособие для вузов. – М.: Машиностроение, 2004. – 576 с.

РАЗРАБОТКА ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ДЕКЛАРАЦИИ ПРОДУКЦИИ ДЕТСКОГО ПИТАНИЯ НА ОСНОВЕ ОЦЕНКИ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА

С.Е. Копыльцова

Научный руководитель – к.т.н., доцент О.И. Сергиенко

Рассматривается применение оценки жизненного цикла для разработки экологической декларации на примере молочной продукции детского питания. Показано, что в настоящее время в России, несмотря на наличие необходимых стандартов, отсутствует методика и практический опыт создания экологических деклараций. Приводятся результаты оценки жизненного цикла, позволяющие определить наиболее значимые экологические характеристики исследуемой продукции.

Ключевые слова: экологическая декларация, оценка жизненного цикла, категории воздействия, молочная продукция детского питания.

Введение

В условиях модернизации российской экономики приоритетной целью становится улучшение качества жизни и здоровья населения, оздоровление экологической обстановки, в том числе за счет повышения природоресурсной эффективности производства, способствующего сокращению негативного воздействия на окружающую среду. Особое значение при этом приобретают вопросы формирования современной государственной политики в области продовольственной безопасности.

Экологическая маркировка информирует потребителей продукции об экологических аспектах ее производства. Знаком эко-маркировки отмечается та продуктовая группа, которая отвечает установленным критериям и является наиболее экологически безопасной.

В соответствии с классификацией, предложенной Международной организацией по стандартизации, эко-маркировку можно разделить на три основные группы: тип I – экологический знак, выдаваемый третьей стороной; тип II – самодекларируемые экологические заявления и тип III – экологические декларации. Основные принципы и требования ко всем типам эко-маркировки приведены в международных (и российских) стандартах серии ИСО 14020 [1]. Процесс эко-маркирования обычно состоит из разработки соответствующей методики и критериев, а также проведения экспертизы продукции и производства, присвоения экологического знака.

В мировой практике наибольшее распространение получила экологическая маркировка непищевой продукции, в частности, предметов потребления. Специальные правила и схемы добровольной эко-маркировки продукции уже существует во многих странах, например, немецкий «Голубой ангел», скандинавский «Белый лебедь», американская «Зеленая печать», эко-знак Европейского Союза «Евроцветок». В России также появляются знаки эко-маркировки. Так, например, в Санкт-Петербурге в 2002 г. был зарегистрирован специальный знак «Листок жизни», а также разработаны для него процедура эко-маркирования и методики для различных продуктовых групп [2].

Рассматриваемая в настоящей работе экологическая декларация представляет собой количественную информацию, предоставляемую потребителю производителем об экологических характеристиках продукции. Такая информация основана на оценке данных, выраженных в виде набора параметров для определенной группы однородной продукции и независимой верификации (например, третьей стороной).

Программы экологических деклараций существуют или находятся на стадии разработки в ряде стран. Наиболее известная программа была создана в Швеции. В первую очередь были разработаны экологические декларации энергоемких продуктов, таких, как холодильники, стиральные машины, насосы и т.д. В настоящее время

существует Глобальная сеть по экологическим декларациям (Global Network on Environmental Declarations, GEDNET), в которую входят различные компании и организации из девяти стран мира – Швеции, Дании, Норвегии, Германии, Нидерландов, США, Кореи, Японии и Китая [3].

Большинство всемирно известных знаков экологической маркировки (за исключением самодекларируемых заявлений) основывается на принципах экологической оценки жизненного цикла (ОЖЦ) продукции. В зарубежной практике данный подход стал применяться в США и Европе в начале 1970-х гг., а в последнее десятилетие получил признание не только на уровне исследовательских центров или крупных промышленных предприятий, но и в органах власти, ответственных за принятие государственных решений в Японии, Швеции, Германии, Швейцарии и других странах. Однако, несмотря на то, что в России в начале 2000-х годов был принят ряд национальных стандартов в области ОЖЦ (серия ГОСТ Р ИСО 14040 [4]), заметного развития и практического применения данное направление не получило. Опубликовано лишь несколько отечественных исследований по применению ОЖЦ в промышленности – в области автомобильного, авиационного транспорта, строительных и упаковочных материалов. Таким образом, в России изначально отсутствует научно-методическая база для проведения ОЖЦ пищевой продукции, в том числе и молочной, и, следовательно, затруднено внедрение знаков экологической маркировки, в том числе и экологических деклараций, основанных на анализе воздействия на окружающую среду не только на стадии производства, но и во всей продовольственной цепочке [5].

Разработка экологической декларации молочной продукции

Молокоперерабатывающие предприятия являются одними из наиболее ресурсоемких в пищевой промышленности. Их деятельность характеризуется высоким потреблением энергетических и водных ресурсов на единицу продукции, а также вызывает образование значительного количества загрязненных сточных вод и накопление большого объема отходов упаковочных материалов. При этом молочная отрасль обладает высоким потенциалом для внедрения наилучших доступных технологий (НДТ) и повышения эффективности использования природных ресурсов.

Таким образом, определенный интерес представляет применение системного подхода для рассмотрения вопросов экологической безопасности молочной продукции на всех этапах ее производства, хранения, транспортировки, реализации, потребления и утилизации отходов.

Целью работы являлась разработка первой отечественной экологической декларации молочной продукции детского питания на основе результатов экологической оценки жизненного цикла.

Для достижения указанной цели были поставлены и решены следующие задачи:

– анализ существующего мирового и отечественного опыта по разработке методик экологической маркировки (в том числе составления экологических деклараций) пищевой продукции и изучение НДТ производства молочной продукции;

– выполнение экологической ОЖЦ молочной продукции детского питания;

– формулирование основных требований для снижения негативного воздействия жизненного цикла молочной продукции на окружающую среду с учетом НДТ и разработка первой отечественной экологической декларации для данной продукции с учетом требований российских стандартов в области экологической маркировки (серия [1], ГОСТ Р 51956-2002 [6]), определения аспектов экологической безопасности продукции (серия ГОСТ Р 14), оценки жизненного цикла (серия [4]), а также нового международного стандарта ISO 14045:2012 [7].

В качестве *объекта исследования* рассматривается молочный продукт для питания детей раннего возраста – творожок с фруктовым наполнителем. Выбор объекта исследования не случаен – детское питание является тем видом продукции, которому уделяется повышенное внимание с точки зрения пищевой безопасности. Кроме того, многие производители детского питания для продвижения собственной продукции ищут различные способы повышения доверия потребителя к ее качеству и безопасности.

На первом этапе ОЖЦ в качестве исследуемой производственной системы было выбрано производство творожка с фруктовым наполнителем для питания детей раннего возраста. Границы производственной системы определены по принципу «от колыбели до ворот». Функциональная единица, т.е. количественная характеристика производственной системы, определялась исходя из фактического годового объема производства творожка детского в ОАО «Владивостокский молочный комбинат» (филиал ОАО «Вимм-Билль-Данн»). За функциональную единицу был принят вес готовой продукции, расфасованной в полистироловые стаканчики по 100 г, закупоренной с помощью фольги и упакованной в гофролотки, который согласно данным предприятия составил 93 т.

На втором этапе ОЖЦ был проведен инвентаризационный анализ входных и выходных материальных и энергетических потоков для каждого единичного процесса рассматриваемой производственной системы.

На третьем этапе была выполнена оценка воздействия производственной системы на окружающую среду и выбраны категории воздействия и их показатели, приведенные в таблице [2]. Для определения категории воздействия «истощение природных ресурсов» (для входных потоков) использовалась концепция MIPS, для определения остальных категорий воздействия (для выходных потоков) – специализированный программный продукт LCALTools, разработанный Шведским институтом экологических исследований (Swedish Environmental Research Institute, IVL).

Таблица. Категории воздействий и показатели категорий для исследуемой производственной системы

№	Категория воздействия	Результаты ИАЖЦ	Показатель категории	Характеристический коэффициент
1.	Истощение природных ресурсов	Входные потоки (сырьевые, водные, энергетические ресурсы, упаковочные материалы, др.)	MIPS, кг/кг	MI-число, кг/кг, кг/кВт
2.	Образование отходов	Навоз на стадии получения молока, отходы гофрокартона, фольги и полистирола на стадии производства творожка	Образование отходов	Показатель образования отходов (ПОО), кг/кг ФЕ
3.	Образование фотохимического смога	Выбросы CO, ЛОС и других углеводородов на стадиях транспортировки; выбросы CH ₄ на стадиях получения молока и производства творожка детского; выбросы CO, формальдегида, уксусной кислоты, ацетальдегида на стадии производства творожка	Образование фотохимического смога в тропосфере	Потенциал образования фотохимического смога (ПФОС), кг-экв. этана/кг ФЕ
4.	Закисление	Выбросы NO _x , SO ₂ на стадиях транспортировки, выбросы NO _x , аммиака и сбросы хлоридов со сточными водами на стадии производства творожка	Накопление кислотных примесей	Потенциал закисления (ПЗ), мол. H ⁺ /кг ФЕ

№	Категория воздействия	Результаты ИАЖЦ	Показатель категории	Характеристический коэффициент
5.	Эвтрофикация	Сбросы в сточные воды азота, фосфора, биохимическое потребление кислорода (БПК) и химическое потребление кислорода (ХПК), на стадиях получения молока и производства творожка	Накопление биогенных веществ	Потенциал эвтрофикации (ПЭ), кг O ₂ /кг ФЕ
6.	Изменение климата	Выбросы CO ₂ на стадиях транспортировки и производства творожка; выбросы CH ₄ на стадиях получения молока и производства творожка; выбросы фреона на стадии производства творожка	Поглощение инфракрасного излучения	Потенциал глобального потепления (ПГП), кг-экв. CO ₂ /кг ФЕ

Результаты расчета показателей категорий воздействия входных и выходных потоков для всех стадий исследуемой производственной системы в относительных единицах представлены на рисунке ниже [2].

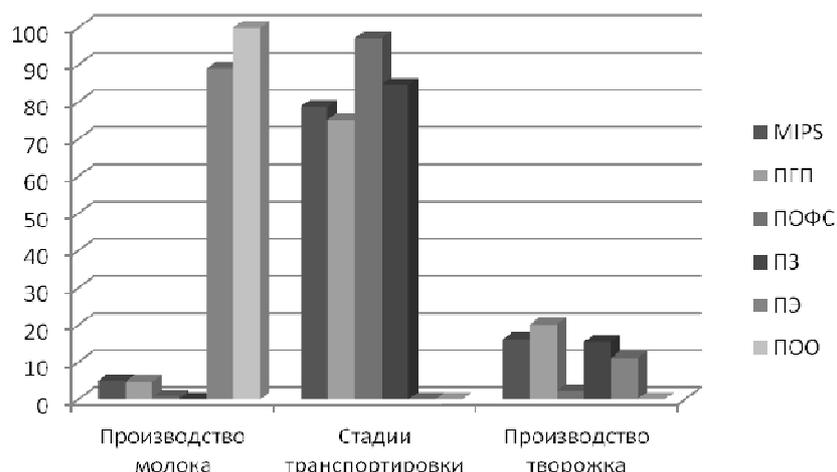


Рисунок. Вклад основных стадий жизненного цикла рассматриваемой продукции в категории воздействия на окружающую среду, %

На четвертом, заключительном этапе ОЖЦ, посвященном интерпретации жизненного цикла, были обобщены данные инвентаризационного анализа и оценки воздействия на окружающую среду и на их основе сформулированы выводы и рекомендации.

В ходе выполнения работы получены следующие результаты [2].

1. Наиболее значительный вклад в загрязнение окружающей среды вносит стадия транспортировки сырья и готовой продукции, при этом наибольшие значения показателей категорий воздействия наблюдаются на стадиях транспортировки фольги и фруктового наполнителя железнодорожным транспортом – на данные стадии приходится около 99% выбросов загрязняющих веществ от всех процессов транспортировки. Кроме того, вклад стадий транспортировки сырья и готовой продукции в значение показателя истощения природных ресурсов также составляет около 99%, что в первую очередь связано с большими объемами потребления дизельного топлива и воздуха, необходимого для осуществления процесса горения.

Таким образом, важным направлением для снижения экологического воздействия является сотрудничество с поставщиками и производителями сырья и других пищевых ингредиентов, включая фермеров и перевозчиков, для которых могут быть установлены отдельные требования к качеству сырья и транспортировке для снижения загрязнения окружающей среды. Внедрение НДТ будет способствовать кооперации партнеров для создания цепочки для информирования и развития экологической ответственности производителей.

2. Еще одной проблемой, выявленной в ходе исследования жизненного цикла рассматриваемой продукции, является заметный вклад стадии получения молока в загрязнение окружающей среды по таким категориям, как эвтрофикация и образование отходов (89 и 99% от общего воздействия на окружающую среду на всех стадиях жизненного цикла соответственно).

Одним из перспективных направлений эффективной утилизации навоза и навозосодержащих сточных вод, образующихся на молочных фермах, является строительство биогазовых установок, позволяющих как обезвредить данный вид отходов, так и произвести полезную продукцию – тепловую, а при достаточном количестве биогаза – электрическую энергию.

3. Среди рассмотренных стадий жизненного цикла производство творожка детского не оказывает мощного воздействия на окружающую среду, однако, вносит вклад в загрязнение в таких категориях, как изменение климата, закисление и эвтрофикация (20, 15 и 11% от общего экологического воздействия на всех стадиях жизненного цикла рассматриваемой продукции соответственно).

Воздействие на окружающую среду в такой категории, как эвтрофикация, связано с большими объемами соединений азота, фосфора, БПК и ХПК в сточных водах молочного предприятия. Поскольку в настоящее время на молокозаводе отсутствует возможность строительства комплексных очистных сооружений, то ему рекомендуется использовать сооружения для физико-химической очистки сточных вод. Кроме того, молокозаводу можно рекомендовать рассмотреть возможность внедрения НДТ в процесс мойки, которые, например, могут включать использование оборудования для мойки замкнутого цикла (так называемая SIP-мойка).

Также стадия производства творожка вносит вклад в образование отходов, что связано с применением таких упаковочных материалов, как гофрокартон, фольга, полистирольная тара. Молокозаводу рекомендуется сотрудничество с единственным действующим предприятием Сибири и Дальнего Востока (г. Уссурийск), которое производит тарный картон и бумагу для гофрирования на базе использования вторичного сырья (макулатуры). Для изготовления стаканчиков возможно использование вторичного пластикового сырья.

На основе результатов проведенной ОЖЦ творожка детского с наполнителем в работе была разработана первая отечественная экологическая декларация молочной продукции.

Заключение

Предлагаемый в работе подход, основанный на экологической оценке жизненного цикла продукции, позволяет:

– выявить основные экологические аспекты производства молочной продукции детского питания на различных этапах ее «жизни» – начиная от получения и переработки первичного сырья, материалов и энергии, производства готовой продукции и заканчивая утилизацией отходов (с учетом и промежуточных стадий транспортировки);

- определить текущий уровень экологической безопасности производства молочной продукции на российских предприятиях, выявить наиболее экологически ответственных производителей;
- выбрать наиболее значимые критерии при составлении экологической декларации молочной продукции;
- сформулировать рекомендации по снижению негативного воздействия на окружающую среду молочного агропромышленного комплекса.

Кроме того, данный подход можно использовать для следующих практических целей:

- информирования потребителей об экологической составляющей «имидж»-продукции определенного производителя;
- разработки системы экологического менеджмента на предприятиях молочного агропромышленного комплекса;
- формулирования экологической политики, целевых и плановых экологических показателей.

Последующее использование предлагаемого подхода позволит создать научную основу для разработки методик эко-маркировки типа III пищевой продукции (в частности, молочной) в соответствии с требованиями международных и национальных стандартов в области экологической маркировки (серия ИСО 14020) и оценки жизненного цикла (серия ИСО 14040). Например, возможно создание методики для определения соответствия молочной продукции требованиям петербургского экологического знака «Листок жизни», и в дальнейшем этот опыт с успехом может быть внедрен на федеральном уровне как передовой.

Практическая значимость работы состоит в том, что предлагаемый подход к разработке экологической декларации является универсальным и может быть использован как самими предприятиями, заинтересованными в получении данного типа экологической маркировки своей продукции, так и независимыми аккредитованными сертифицирующими органами, подтверждающими соответствие производства продукции наилучшим доступным технологиям, что в определенной степени позволяет повысить доверие потребителя и обеспечить устойчивый спрос на продукцию.

Литература

1. ГОСТ Р ИСО 14020-99. Экологические этикетки и декларации. Основные принципы. – Введ. 01.07.2000. – М.: Изд-во стандартов, 2004. – 10 с.
2. Копыльцова С.Е. Опыт применения оценки жизненного цикла для разработки экологической декларации пищевой продукции // *Естественные и технические науки*. – 2012. – № 5. – С. 237–246.
3. GEDnet – Global Environmental Declarations Network [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.gednet.org, свободн.
4. ГОСТ Р ИСО 14040-99. Управление окружающей средой. Оценка жизненного цикла. Принципы и структура. – Введ. 01.07.1999. – М.: Изд-во стандартов, 2000. – 12 с.
5. Сергиенко О.И., Копыльцова С.Е. Определение экологических характеристик продовольствия на основе оценки жизненного цикла продукции [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://economics.open-mechanics.com/articles/311.pdf>, свободн.
6. ГОСТ Р 51956-2002. Этикетки и декларации экологические. Экологические декларации типа III. – Введ. 01.02.2003. – М.: Изд-во стандартов, 2002. – 14 с.

7. ISO 14045:2012. Менеджмент окружающей среды. Оценка экологической эффективности систем продуктов. Принципы, требования и руководящие указания. – Введ. 15.05.2012. – М.: Изд-во стандартов, 2012. – 48 с.

УДК 537.876.4

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ОТРАЖЕНИЯ И ПРОХОЖДЕНИЯ ДЛЯ МАССИВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПРОВОДОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ РАДИУСА

С.Ю. Косульников, Е.А. Янковская

Научный руководитель – д.ф.-м.н., гл.н.с. П.А. Белов

Выполнено численное моделирование среды параллельных проводов с помощью коммерческого пакета CST Microwave Studio. Представлены результаты исследования зависимости коэффициентов отражения и прохождения массива металлических проводов от их радиусов. Получены значительные отличия в характеристиках среды при изменении радиуса проводов и найден оптимальный радиус проводов, при котором наблюдаются наилучшие характеристики для передачи изображений со сверхразрешением.

Ключевые слова: передача изображения со сверхразрешением, суперлинза, плазмонные наноструктуры.

Введение

Среда параллельных проводов – это среда, сформированная решеткой идеально проводящих проводов с маленьким радиусом по сравнению с длиной волны. Данные среды нашли широкое применение в физике, так например, в микроволновом диапазоне их можно использовать для реализации среды Веселаго [1]. Относительно недавно было показано, что такую решетку проводов можно также применить для передачи изображений со сверхразрешением [2].

На данный момент не существует полного исследования зависимостей параметров среды металлических проводов от их радиуса. В связи с этим задачей настоящей работы является моделирование решетки параллельных проводов с различным радиусом и изучение коэффициентов отражения и прохождения при различной толщине провода.

Численное моделирование среды идеально проводящих проводов

В коммерческом программном пакете CST Microwave Studio было промоделировано возбуждение среды параллельных проводов, представленной на рис. 1, падающей электромагнитной волной. Данная среда представляет собой решетку идеально проводящих проводов с периодом a , радиусом провода r и длиной провода d .

В ходе исследований радиус проводов менялся от 0,05 см до 0,45 см. Коэффициенты отражения и прохождения среды были рассчитаны в CST Microwave Studio. Результаты данных расчетов представлены на рис. 2–5.

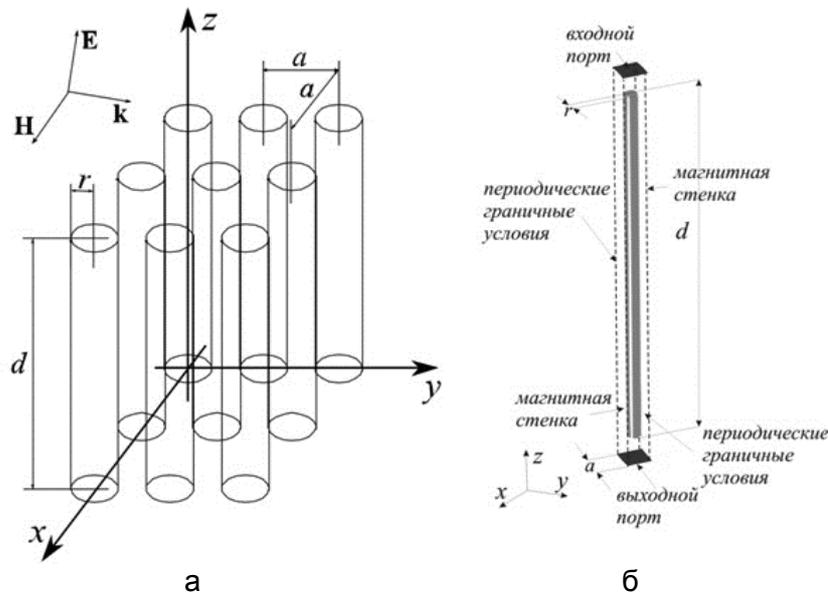


Рис. 1. Геометрия структуры метаматериала, рассматриваемого в работе: квадратная решетка из металлических проводов (а); элементарная ячейка структуры исследуемого метаматериала, промоделированная в программном пакете (б)

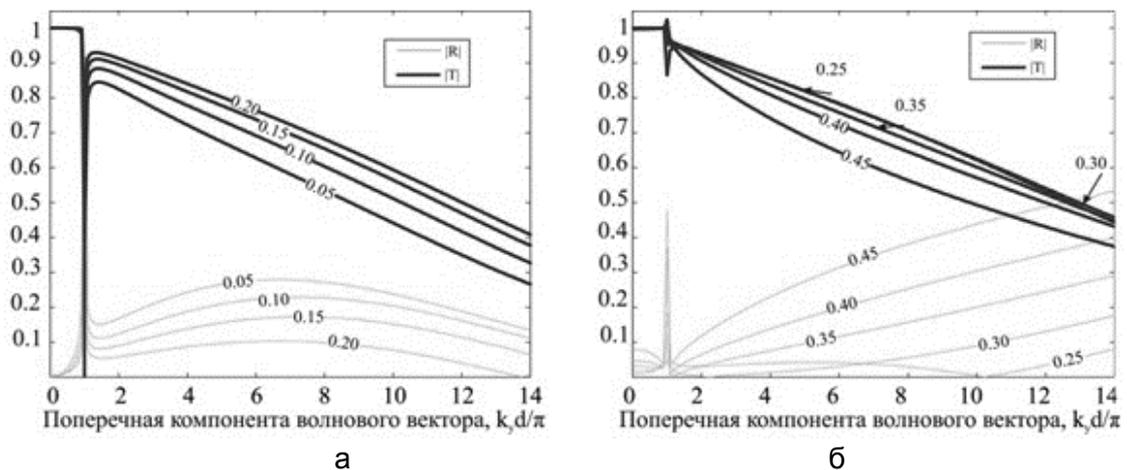


Рис. 2. Результаты численного расчета амплитуды коэффициентов отражения R и прохождения T через слой среды из проводов при $kd=1$ для различных радиусов: $r = 0,05-0,2$ см (а); $r = 0,25-0,45$ см (б)

Как видно из графиков на рис. 2 при $kd=1$, где \mathbf{k} – волновой вектор, изменение радиуса проводов мало влияет на коэффициент прохождения T , но заметно влияет на коэффициент отражения R , который при $r = 0,05$ см равен $R=0,3$, а при $r = 0,2-0,25$ см близок к $R=0,1$, что является положительным фактором, так как исследуемую решетку проводов можно рассматривать как линзу, а значит, это дает возможность сделать отражение от линзы пренебрежимо малым. Дальнейшее увеличение радиуса проводов приводит к увеличению коэффициента отражения. Таким образом, зависимость коэффициента отражения от радиуса провода носит «параболический» характер. Это довольно неожиданный эффект, так как логичней было бы ожидать, что при увеличении количества металла коэффициент отражения данной линзы должен увеличиваться.

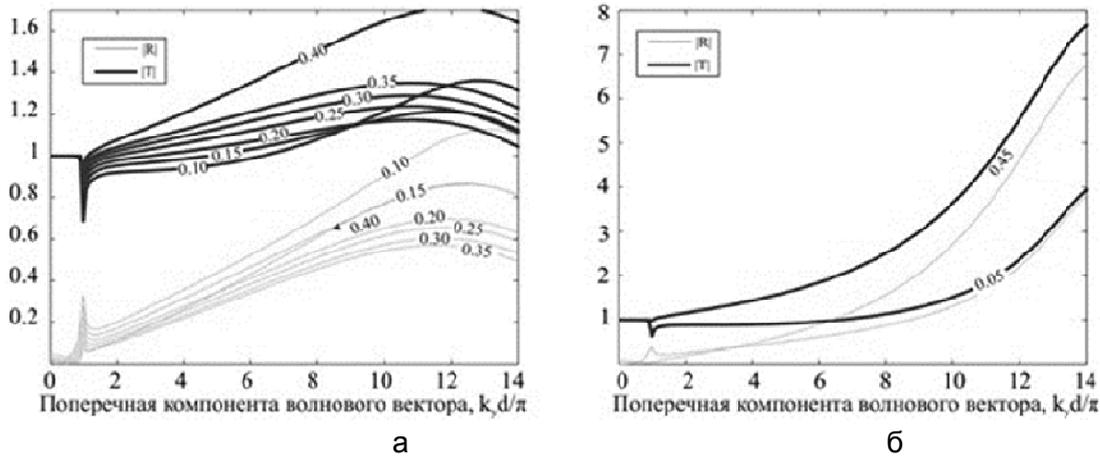


Рис. 3. Результаты численного расчета амплитуды коэффициентов отражения и прохождения при $kd=0,98$ для различных радиусов: $r = 0,1-0,4$ см (а); $r = 0,05-0,45$ см (б)

В отличие от частоты $kd=1$, при которой наблюдается убывание коэффициента прохождения T , на частоте $kd=0,98$ коэффициент прохождения T близок или больше 1 при любом r (рис. 3). При радиусах $r = 0,05$ см и $r = 0,45$ см на данной частоте появляется экспоненциальное возрастание коэффициентов отражения и прохождения. Это означает, что источник можно установить на определенном расстоянии, при котором возможна не только передача изображения, но и его получение.

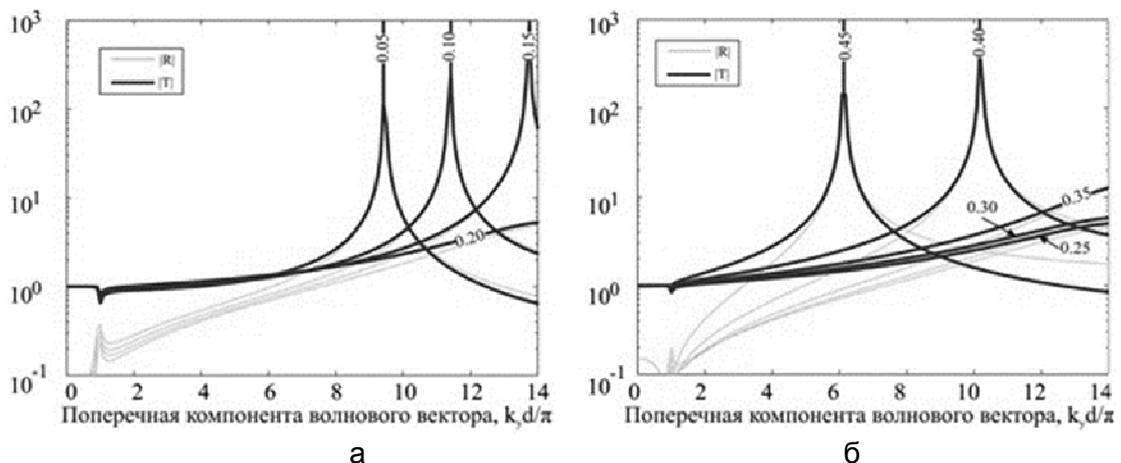


Рис. 4. Результаты численного расчета амплитуды коэффициентов отражения и прохождения при $kd=0,97$ для различных радиусов: $r = 0,05-0,2$ см (а); $r = 0,25-0,45$ см (б)

При дальнейшем уменьшении частоты до $kd=0,97$ и $kd=0,96$ (рис. 4, 5 соответственно) наблюдаются резонансные возрастания коэффициентов отражения и прохождения, которые в соответствии с [3] вызывают искажения передаваемого изображения из-за возбуждения поверхностных волн.

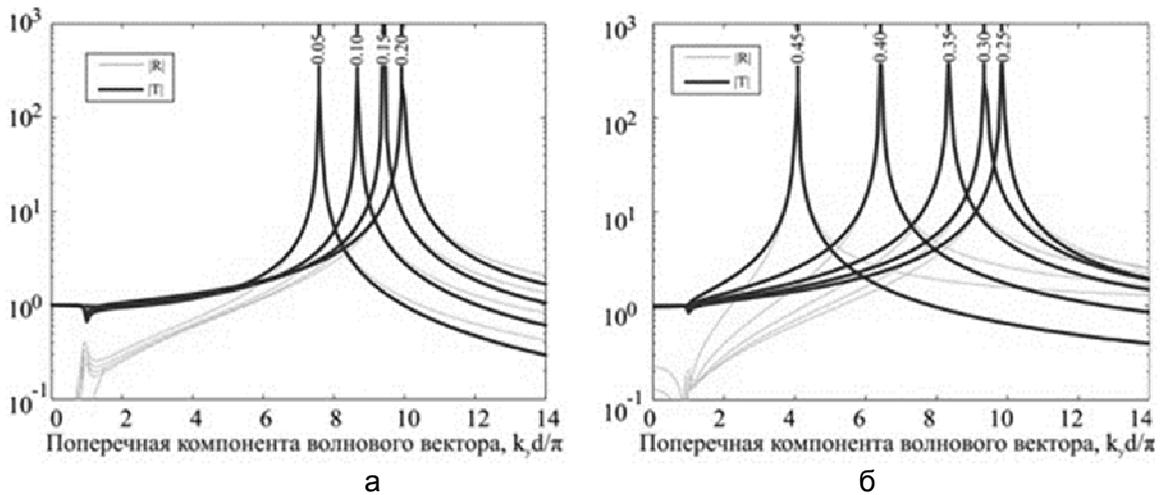


Рис. 5. Результаты численного расчета амплитуды коэффициентов отражения и прохождения при $kd=0,96$ для различных радиусов: $r = 0,05-0,2$ см (а); $r = 0,25-0,45$ см (б)

Немаловажной особенностью данных пиков является их аномальная динамика при изменении радиуса проводов: сначала при увеличении толщины провода они смещаются вправо, а после достижения некоего критического радиуса r начинают сдвигаться влево.

Аналитическое моделирование коэффициентов отражения и прохождения

При сравнении численных результатов с результатами, полученными аналитически с помощью формул из работ [2, 3], обнаруживается несовпадение поведения резонансных возрастаний. Расчет производился из формул (1)–(3), где $k_p = \omega_p / c$ волновое число, соответствующее плазменной частоте ω структуры, k_y – компонента волнового вектора вдоль оси x . Плазменная частота с периодом исследуемого массива a и радиусом наноцилиндров r определяется формулой (3). Длина наноцилиндра – d . Компонента волнового вектора вдоль оси x может быть представлена как $k_x = i\gamma_x$, где γ_x определяется по (4). При частоте много меньшей плазменной волновой вектор **ТМ** волны становится чисто мнимым и может быть записан как $q_x = i\gamma_{\text{ТМ}}$, где $\gamma_{\text{ТМ}}$ следует из (5).

$$R = \frac{1}{1 + \frac{\gamma_{\text{ТМ}} k_y^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{th} \left(\frac{\gamma_{\text{ТМ}} d}{2} \right) - \frac{k k_p^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{tg} \left(\frac{kd}{2} \right)} + \frac{1}{1 + \frac{\gamma_{\text{ТМ}} k_y^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{cth} \left(\frac{\gamma_{\text{ТМ}} d}{2} \right) + \frac{k k_p^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{ctg} \left(\frac{kd}{2} \right)} - 1, \quad (1)$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{\gamma_{\text{TM}} k_y^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{th} \left(\frac{\gamma_{\text{TM}} d}{2} \right) - \frac{k k_p^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{tg} \left(\frac{kd}{2} \right)} - \frac{1}{1 + \frac{\gamma_{\text{TM}} k_y^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{cth} \left(\frac{\gamma_{\text{TM}} d}{2} \right) + \frac{k k_p^2}{\gamma_x (k_y^2 + k_p^2)} \text{ctg} \left(\frac{kd}{2} \right)}$$

(2)

$$(k_p a)^2 = \frac{2\pi}{a^2 \ln \frac{a}{4r_0(a-r_0)}}$$

(3)

$$\gamma_x = \sqrt{k_y^2 - k^2}$$

(4)

$$\gamma_{\text{TM}} = \sqrt{k_p^2 + k_y^2 - k^2}$$

(5)

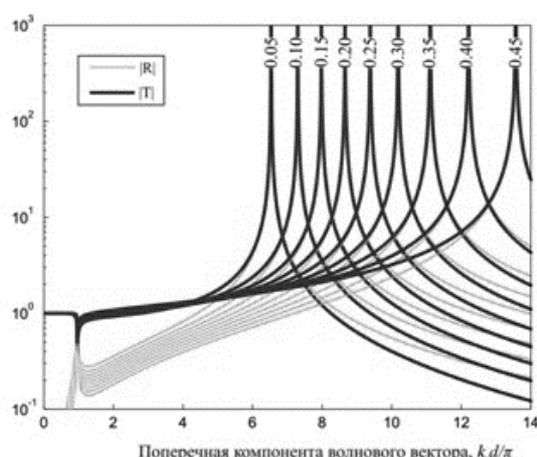


Рис. 6. Результаты аналитического расчета амплитуды коэффициентов отражения и прохождения при $kd=0,96$ для различных радиусов

Как видно из графика, представленного на рис. 6, при аналитическом расчете изменение направления возрастания пиков не наблюдается.

Также необходимо отметить, что при частоте $kd=0,97$ и радиусах $r = 0,25-0,35$ см резонансные возрастания отсутствуют, это означает, что при использовании в линзе проводов с данными параметрами можно получить более широкополосное устройство.

Заключение

В ходе исследования было изучено влияние размера радиуса проводов на коэффициенты прохождения и отражения металлической линзы. Авторами были получены радиусы проводов на разных частотах, при которых коэффициент отражения минимален. Также замечено, что при некотором отклонении от рабочей частоты наблюдается anomalous поведение пиков коэффициентов отражения и прохождения, которое не совпадает с аналитически рассчитанной моделью, поэтому необходимы дополнительные исследования.

Литература

1. Pendry J.B. Negative refraction makes a perfect lens // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85. – № 18. – P. 3966–3969.
2. Belov P.A., Silverintha M.G. Resolution of subwavelength transmission devices formed by a wire medium // Phys. Rev. E. – 2006. – V. 73. – P. 056607 (1–9).
3. Maslovski S.I., Morgado T.A., Silverintha M.G., Chandra S.R. Kaipa, Yakovlev A.B. Generalized additional boundary conditions for wire media // New Journal of Physics. – 2010. – V. 12. – № 113047. – P. 1–19.

УДК 535

ОПТИЧЕСКИЕ АНТЕННЫ НА ОСНОВЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ: КОНЦЕПЦИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ВЕРИФИКАЦИЯ

А.Е. Краснок

Научный руководитель – д.ф.-м.н., гл.н.с. П.А. Белов

Предложен новый класс оптических наноантенн на основе диэлектрических наночастиц и исследованы их основные характеристики. Показано, что одна диэлектрическая наночастица может обладать свойствами элемента Гюйгенса в оптической области длин волн. Аналитически и численно исследована наноантенна типа Яги–Уда, выполненная на основе диэлектрических наночастиц. Проведено сравнение диэлектрической наноантенны Яги–Уда с металлической наноантенной такой же геометрии. Показано, что диэлектрическая наноантенна Яги–Уда обладает существенно более низкими диссипативными потерями при малых взаимных расстояниях между элементами. Приводятся результаты экспериментальной верификации в микроволновой области частот. Показано хорошее соответствие между экспериментальными данными и данными, полученными численным путем.

Введение

Изучение оптических наноантенн – это новое и быстро развивающееся направление в области современной оптики. В современной литературе, наноантеннами называются устройства, которые преобразуют свободно распространяющееся оптическое излучение в поле, сильно локализованное в некоторой области, и наоборот [1]. Такие антенны интересны тем, что позволяют повысить эффективность контроля и управления электромагнитными полями на нанометровом масштабе.

Традиционно, в области оптических длин волн управление электромагнитным полем происходит посредством линз, оптических волноводов, дифракционных элементов, т.е. приборов, размеры которых гораздо больше длины волны управляемого излучения. С другой стороны, управление электромагнитным излучением в радио- и СВЧ диапазоне с помощью антенн [2], т.е. приборов, сравнимых с длиной волны, является устоявшейся техникой. Несмотря на огромную важность оптического диапазона частот, конкретные дизайны наноантенн и их практическая реализация стали обсуждаться лишь совсем недавно. Это обусловлено тем, что характерные размеры оптической антенны определяются рабочей длиной волны излучения, что составляет сотни нанометров, поэтому возникает технологическая проблема воспроизведения объекта такого размера с нанометровой точностью. Благодаря тому, что нанометровый масштаб длины становится более доступным экспериментальным исследователям, в последнее время наблюдается резкая динамика увеличения количества публикуемых работ на эту тему. В частности, недавно появились работы [3, 4], в которых предлагаются конструкции плазмонных наноантенн Яги–Уда. Однако на данный момент в литературе практически отсутствуют работы по наноантеннам на основе

диэлектрических наночастиц, тогда как они обладают рядом преимуществ перед наноэлементами, изготовленными из металла. Во-первых, многие диэлектрические материалы обладают исключительно малым поглощением в оптической области частот. Во-вторых, существует область частот, в которой диэлектрическая частица обладает электрическим и магнитным откликом одновременно. Это дает возможность реализации на одной частице элемента Гюйгенса, что в оптической области частот представляется исключительно важным.

Оптические свойства диэлектрических наночастиц. Элемент Гюйгенса

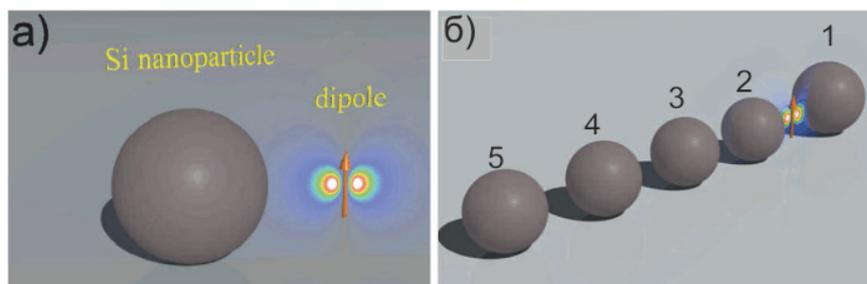


Рис. 1. Геометрии рассматриваемых задач: элемент Гюйгенса, на рисунке изображен точечный диполь (dipole), на некотором расстоянии от него, помещена кремниевая наночастица (Si nanoparticle) радиуса (а); nanoантенна Яги–Уда (б)

Рассмотрим структуру, изображенную на рис. 1, а. Рядом с элементарным диполем в его ближнее поле помещена сферическая диэлектрическая наночастица. Будем рассматривать наночастицы только тех размеров, для которых в оптической области частот поляризация имеет дипольный характер. Согласно теории Ми [5] для этого достаточно, чтобы выполнялось условие $k_s R_s \approx 1$, в котором k_s – волновое число электромагнитного поля в материале частицы, а R_s – ее радиус. В связи с этим необходимо, чтобы диэлектрическая проницаемость материала, из которого изготовлена сфера, была существенно больше, чем диэлектрическая проницаемость окружающей ее среды. В качестве материала диэлектрической наночастицы выберем кремний. Реальная часть диэлектрической проницаемости кремния в оптической области длин волн [6] приблизительно равна 16, а диссипативные потери в кремнии на порядок меньше чем в благородном металле (золото, серебро). Наибольший радиус кремниевой частицы удовлетворяющей дипольному приближению приблизительно равен 80 нм.

Для описания оптического отклика частицы воспользуемся известными [5] выражениями для электрической и магнитной поляризуемостей:

$$\alpha^e = \frac{3i\epsilon_h}{2k_h^3} a_1, \quad \alpha^m = \frac{3i}{2k_h^3} b_1, \quad (1)$$

где α^e и α^m – электрическая и магнитная поляризуемости соответственно; k_h и ϵ_h – волновое число и диэлектрическая проницаемость среды, в которую помещена частица; коэффициенты a_1 и b_1 представляют собой амплитуды рассеянного поля в первом (дипольном) приближении. На рис. 2 приведены графики абсолютных значений (рис. 2, а) и фаз (рис. 2, б) электрической и магнитной поляризуемостей кремниевой частицы с радиусом 65 нм. Как видно из рисунка, во всей оптической области поляризации обоих типов отличны от нуля, а фазы плавно зависят от длины волны падающего излучения. Есть также широкий, порядка 200 нм, участок длин волн в котором векторы электрического и магнитного дипольных моментов колеблются с большой разностью фаз.

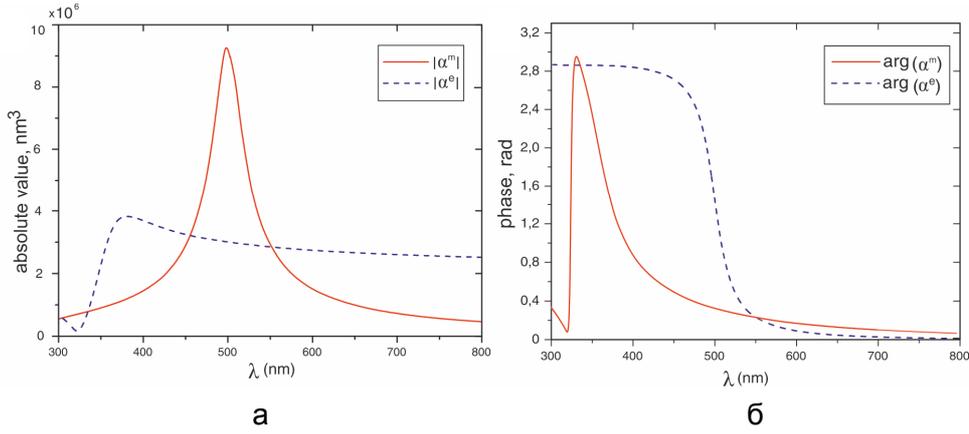


Рис. 2. Зависимости абсолютных значений (а) и фаз (б) электрической α^e и α^m магнитной поляризуемостей от длины волны для кремниевой частицы, радиусом 65 нм, в свободном пространстве

Для аналитического решения задачи взаимодействия системы частиц с элементарным диполем используем метод системы связанных дипольных уравнений [5]. Записываем систему уравнений для векторов электрического \vec{P}_i и магнитного \vec{M}_i моментов для каждой частицы в виде:

$$\begin{aligned} \vec{P}_i &= \alpha^e \left(\sum_{j=1}^N \left[\hat{C}_{ij} \vec{P}_j - \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \hat{G}_{ij} \vec{M}_j \right] + \vec{E}_{id} \right), \\ \vec{M}_i &= \alpha^m \left(\sum_{j=1}^N \left[\hat{C}_{ij} \vec{M}_j + \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \hat{G}_{ij} \vec{P}_j \right] + \vec{H}_{id} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

где $\vec{E}_{id} = \hat{C}_{id} \vec{P}_d$ и $\vec{H}_{id} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \hat{G}_{id} \vec{P}_d$ – электрическое и магнитное поле элементарного

диполя соответственно в точке, в которой находится частица i ; \vec{P}_d – дипольный момент элементарного диполя; ϵ_0 и μ_0 – электрическая и магнитная проницаемость вакуума, а суммирование проводится по всем N частицам системы. Операторы \hat{C}_{ij} и \hat{G}_{ij} по своему физическому смыслу являются соответственно электрическим и магнитным полем точечного электрического диполя частицы i в точке с радиус-вектором \vec{r}_j . По дуальности, те же операторы определяют электрические и магнитные поля магнитного диполя. Они определяются следующими выражениями $\hat{C}_{ij} = A_{ij} \hat{I} + B_{ij} (\vec{n}_{ij} \otimes \vec{n}_{ij})$, $\hat{G}_{ij} = D_{ij} \vec{n}_{ij} \times \hat{I}$, где $(\vec{n}_{ij} \otimes \vec{n}_{ij})$ – диадное произведение единичных векторов в направлении радиус-вектора \vec{r}_{ij} от частицы i к частице j ; \hat{I} – единичная матрица 3×3 . Функции A_{ij} , B_{ij} и D_{ij} обозначают выражения:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{\exp(ik_h r_{ij})}{r_{ij}} \left(k_h^2 - \frac{1}{r_{ij}^2} + \frac{ik_h}{r_{ij}} \right), \quad B_{ij} = \frac{\exp(ik_h r_{ij})}{r_{ij}} \left(-k_h^2 + \frac{3}{r_{ij}^2} - \frac{3ik_h}{r_{ij}} \right), \\ D_{ij} &= \frac{\exp(ik_h r_{ij})}{r_{ij}} \left(k_h^2 + \frac{ik_h}{r_{ij}} \right). \end{aligned}$$

Решая систему уравнений (2) относительно векторов электрического и магнитного моментов каждой частицы, электрическое поле в дальней зоне может быть восстановлено по известной формуле:

$$\vec{E}_s = \frac{k_h^2}{R} \sum_{j=1}^N \left(\vec{P}_j - (\vec{s} \cdot \vec{P}_j) \vec{s} - \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} [\vec{s} \times \vec{M}_j] \right) \cdot \exp[ik_h (R - \vec{s} \cdot \vec{r}_j)], \quad (3)$$

где $\vec{R} = R\vec{s}$ – радиус-вектор из начала системы координат в точку, находящуюся в дальней зоне излучения.

Вернемся к случаю рис. 1, а. Фиксируем дипольный момент элементарного диполя и исследуем интенсивность излучения этой системы в дальней зоне. Решая систему уравнений (2), получаем следующие отличные от нуля компоненты электрических и магнитных дипольных моментов: $P_{sz} = \alpha^e A_{sd} P_{dz}$, $M_{sz} = \alpha^m \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} D_{sd} P_{dz}$. Используя этот результат можно найти диаграммы направленности излучения рассматриваемой системы (рис. 3, б). Видно, что для разных длин волн главный лепесток диаграммы направленности направлен по-разному. На длине 570 нм он направлен в положительную сторону оси x , на этой длине волны электрический и магнитный дипольные моменты частицы колеблются в фазе (рис. 2).

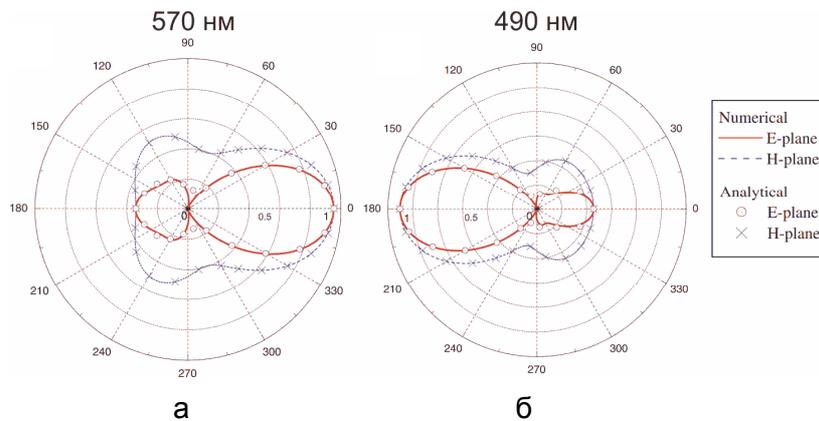


Рис. 3. Диаграммы направленности излучения элемента Гюйгенса в E- и H-плоскости. Длина волны равна 570 нм (а) и (б) 490 нм. Значения нормированы на максимальную интенсивность излучения

Для исследования системы численно авторы использовали коммерческий программный продукт CST Microwave Studio. Как следует из рис. 3, аналитические результаты находятся в хорошем согласии с численными. Это говорит о том, что сделанные нами предположения относительно электрических и магнитных свойств поляризуемости диэлектрической наночастицы верны.

Оптическая антенна Яги–Уда

Для улучшения характеристик наноантенны добавим к системе рис. 1, а, еще четыре диэлектрические наночастицы одинакового размера, как показано на рис. 1, б. Полученная таким образом структура соответствует геометрии наноантенны Яги–Уда. Частица большего радиуса (сфера 1) исполняет роль рефлектора, а малого (сферы 2–5) директора. Исследуем зависимости коэффициента направленности и эффективности излучения системы (рис. 3, б) от длины волны. На рис. 4 приведена зависимость коэффициента направленности от длины волны для диэлектрической наноантенны Яги–Уда, параметр G равен 70 нм (рис. 4, а) и разных G (рис. 4, б). Вставками изображены трехмерные диаграммы направленности на соответствующих частотах. Видно, что зависимость имеет резкий максимум на длине волны 500 нм. Главный лепесток диаграммы стал гораздо острее, а излучение назад практически отсутствует. Наличие в каждой из наночастиц электрической и магнитной поляризуемости одновременно, и обеспечивает высокий коэффициент направленности.

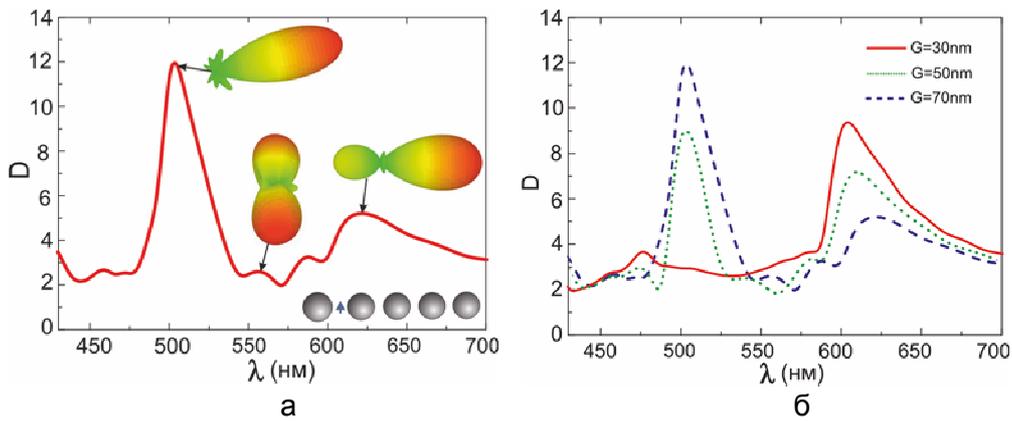


Рис. 4. На рисунке приведена зависимость коэффициента направленности от длины волны для диэлектрической наноантенны Яги–Уда с расстояниями между частицами G равным 70 нм (а) и для разных G (б)

Режим работы диэлектрической наноантенны существенно зависит от расстояния между элементами, что сильно влияет на ее коэффициент направленности. Из этих зависимостей видно, что с уменьшением расстояния между элементами наноантенны происходит уменьшение вклада электрического момента частиц в коэффициент направленности. Вклад магнитного момента, напротив, возрастает.

Представляет интерес вопрос влияния взаимного расстояния между элементами диэлектрической наноантенны Яги–Уда на величину эффективности излучения и сравнение ее с эффективностью излучения металлической наноантенны такой же конструкции. Величины эффективности излучения в случаях плазмонной и диэлектрической наноантенн, при $G=70$ нм, на пиках коэффициента направленности примерно одинаковые (рис. 5). Эффективность излучения диэлектрической наноантенны Яги-Уда с уменьшением расстояния между элементами падает медленно, а на длинах волн, приходящихся на максимумы коэффициента направленности, практически не меняется. У плазмонной наноантенны, напротив, эффективность излучения с уменьшением расстояния между частицами падает быстро.

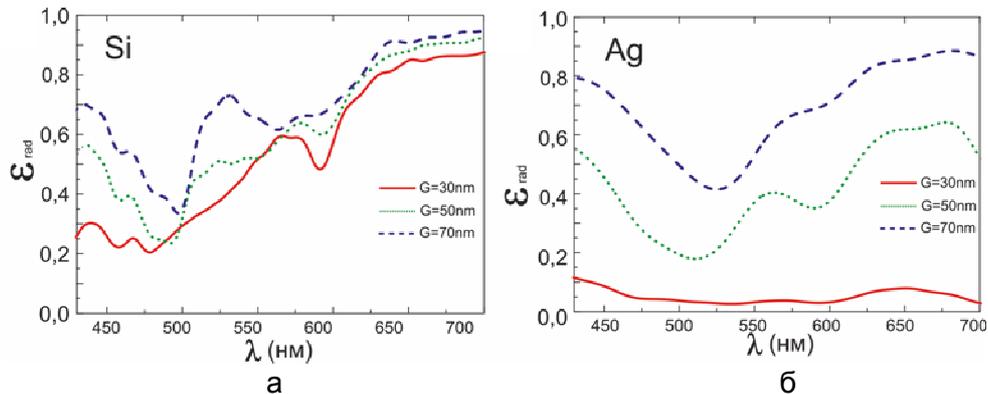


Рис. 5. На рисунке изображены зависимости эффективности излучения для диэлектрической (а) наноантенны Яги–Уда и металлической наноантенны (б) точно такой же геометрии. Графики представлены для разных значений параметра G

Экспериментальная верификация

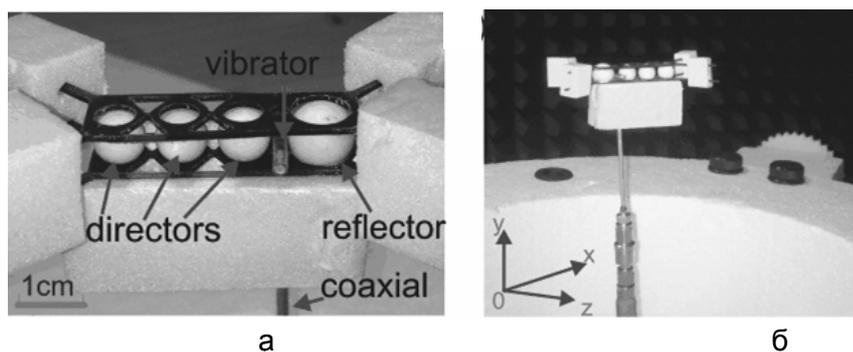


Рис. 6. Фотографии микроволновой экспериментальной установки: изображение антенны (а) и расположение всей конструкции в безэховой камере (б)

Рассмотрим далее вопрос экспериментальной верификации численного моделирования и теоретических выводов. Отвлекаясь от вопросов, связанных с чисто квантовыми свойствами источника, такую верификацию можно осуществить, масштабируя диэлектрическую наноантенну Яги–Уда в область микроволн (рис. 6). Существенным моментом здесь является обратно пропорциональная зависимость между частотами Ми-резонансов и радиусом диэлектрической частицы, при условии постоянства диэлектрической проницаемости. В качестве материала диэлектрических сфер выбираем MgO-Ti_2 . Это вещество является СВЧ керамикой, диэлектрическая проницаемость которой в исследуемой области частот, равна 16, т.е как у кремния [6] в оптической области. На рис. 7 приведены диаграммы направленности антенны в Е- и Н-плоскостях соответственно, полученные экспериментально для частоты 10,7 ГГц. Из этих рисунков видно, что экспериментальные данные хорошо согласуются с численным расчетом. Некоторые отличия экспериментальных данных от численных обусловлены присутствием необходимых крепежных элементов.

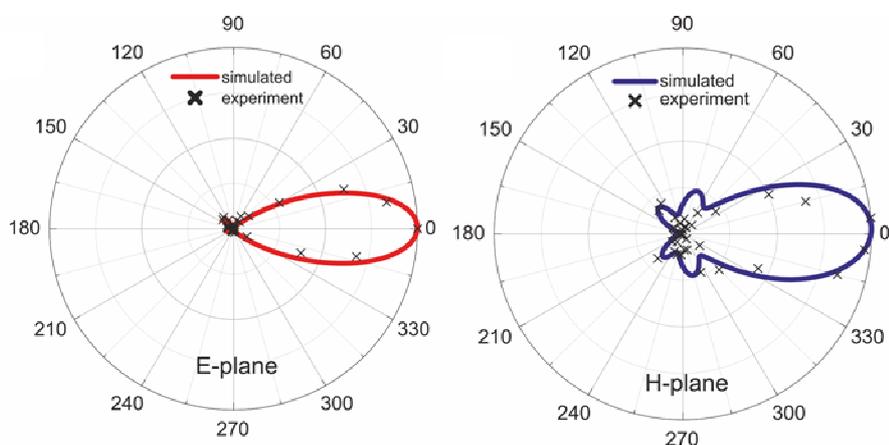


Рис. 7. Двумерные диаграммы направленности в Е- (а) и Н-плоскостях (б) на частоте 10,7 ГГц. Сплошные линии соответствуют численным расчетам, а крестики экспериментальным измерениям

Заключение

Предложен новый класс оптических наноантенн на основе диэлектрических наночастиц с высоким значением показателя преломления. Исследована работа одной такой наночастицы, изготовленной из кремния, в качестве элемента Гюйгенса. Аналитически и численно исследована наноантенна типа Яги–Уда, выполненная на основе пяти диэлектрических наночастиц. Показана возможность настройки такой

наноантенны на высокий коэффициент направленности и низкий уровень диссипативных потерь.

С целью подтверждения теоретических положений, лежащих в основе работы диэлектрических наноантенн, и результатов численного моделирования проведена экспериментальная верификация диэлектрической наноантенны Яги–Уда в микроволновой области излучения. Результаты эксперимента находятся в хорошем согласии с численным моделированием.

Литература

1. Novotny L., Hulst N. Antennas for light // Nature Photonics. – 2011. – № 5. – P. 83–90.
2. Balanis C. Antenna theory: analysis and design. – New York: J. Wiley, 1982. – 55 p.
3. Coenen T., Vesseur R., Polman A., Koenderink F. Directional Emission from Plasmonic Yagi–Uda Antennas Probed by Angle-Resolved Cathodoluminescence Spectroscopy // Nano Letters. – 2011. – № 11. – P. 3779–3784.
4. Dregely D., Taubert R., Dorfmüller J., Vogelgesang R., Kern K., Giessen H. 3D optical Yagi–Uda nanoantenna array // Nature Communications. – 2011. – № 2. – P. 1–7.
5. Evlyukhin A., Reinhardt C., Seidel A., Luk'yanchuk B., Chichkov B. Optical response features of Si-nanoparticle arrays // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 82. – № 4. – P. 045404 (1–12).
6. Palik E. Handbook of Optical Constant of Solids. – San Diego: Academic, 1985. – 160 p.

УДК 681.3

РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПРИМЕНЕНИЮ МЕТОДИКИ 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕЧАТНОЙ ПЛАТЫ В ALTIUM DESIGNER

О.В. Кузнецова

Приведены рекомендации и результаты по применению методики 3D-моделирования печатной платы в системе Altium Designer. Методика основана на двух методах: экструзии и импорта моделей в формате STEP. Разработаны рекомендации по применению методики 3D-моделирования различных корпусов электронных компонентов.

Ключевые слова: печатная плата, САПР, трехмерная модель.

На сегодняшний день 3D-моделирование приобретает все большую популярность. Трехмерная модель (3D-модель) электронного изделия (ЭИ) играет особую роль в современных САПР и позволяет описывать изделие более полно по сравнению с двухмерной моделью (2D-модель). Использование 3D-модели дает следующие преимущества: наглядность; удобство разработки и быстрота модернизации; автоматизированные инженерные расчеты; ассоциативность, т.е. автоматическое внесение изменений во все составляющие электронного описания изделия при изменении какого-либо из компонентов изделия [1].

Ранее в системе Altium Designer автором была разработана методика формирования 3D-модели печатной платы (ПП). Методика основана на двух методах: методе формирования 3D-модели посредством экструзии и методе использования 3D-моделей корпусов электронных компонентов (ЭК) в формате STEP. Маршрут формирования 3D-моделей корпусов ЭК посредством импорта STEP-моделей представлен на рис. 1.

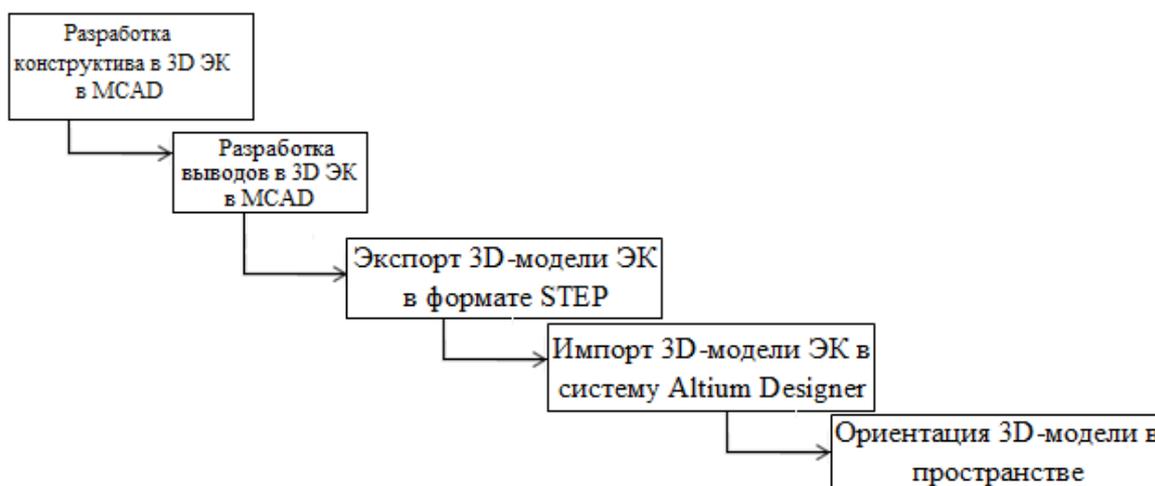


Рис. 1. Маршрут формирования 3D-моделей корпусов ЭК в системе Altium Designer

Первый метод был применен для формирования 3D-моделей корпусов: штыревых ЭК (резисторов, конденсаторов) и ЭК поверхностного монтажа (диодов, резисторов, конденсаторов). Второй метод был применен для формирования 3D-моделей корпусов: элементов управления, средств индикации и соединителей. 3D-модель конструктива ПП в системе Altium Designer формируется автоматически по заданной толщине платы (по умолчанию 1,5 мм).

Формирование 3D-модели корпуса ЭК методом экструзии из посадочного места рассмотрим на примере формирования 3D-модели резистора. Выполним команду «Tools/Manage 3D Bodies for Components on Board», в диалоговом окне «Component Body Manager» выберем нужный компонент и установим необходимые опции (рис. 2).

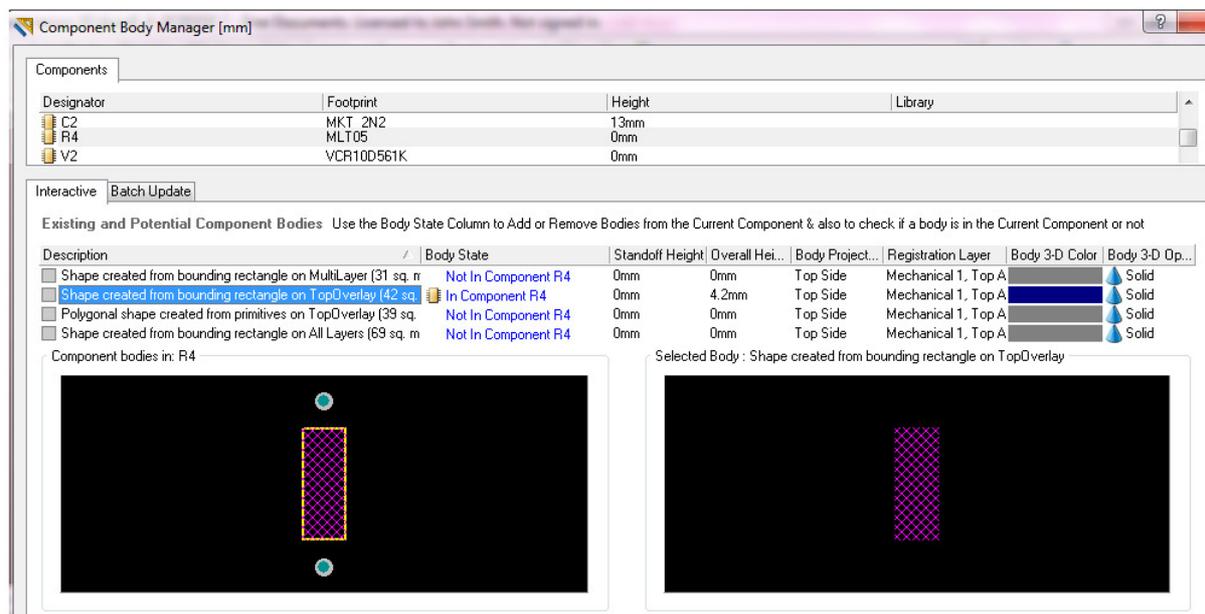


Рис. 2. Диалоговое окно команды «Component Body Manager»

В свойствах «Interactive/Description» надо выбрать команду «Shape created from bounding rectangle on TopOverlay» (создание формы по границам прямоугольника в слое TopOverlay). В свойствах «Body State» выберем команду «In Component R4», а в свойствах «Overall Height» зададим высоту модели равную 4,2 мм. В свойствах «Body 3-D Color» выберем цвет модели. Завершив необходимые настройки, нужно выйти из данного окна с помощью кнопки «Close». Для просмотра 3D-модель резистора, нужно переключиться в режим 3D-просмотра, нажав на клавиатуре клавишу «3» (рис. 3, а).

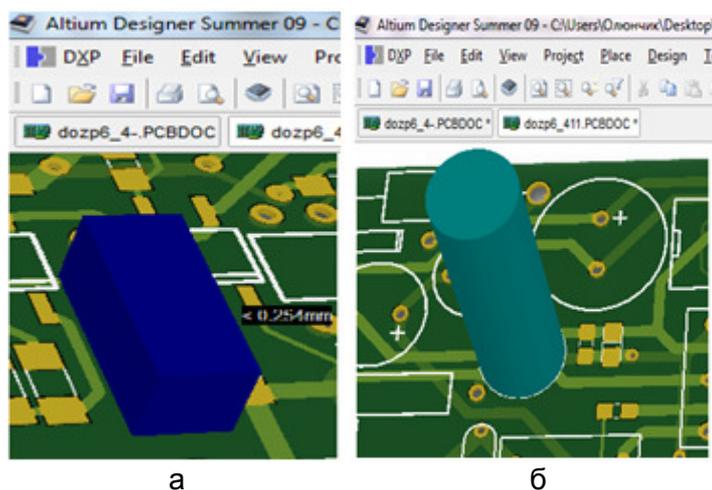


Рис. 3. 3D-модель резистора (а); 3D-модель конденсатора (б)

В большинстве случаев для формирования 3D-моделей корпусов ЭК посредством экструзии нужно применять опцию «Shape created from bounding rectangle on TopOverlay» – создание формы по границам прямоугольника в слое TopOverlay (для резисторов, диодов и др.).

В ходе исследований 3D-моделирования корпусов ЭК методом экструзии был сделан вывод о том, что для конденсатора со штыревыми выводами, имеющим сечение в виде окружности, наиболее оптимальной командой является «Manage 3D Bodies for Components on Board».

Рассмотрим формирование 3D-модели конденсатора методом экструзии из посадочного места. В диалоговом окне команды «Component Body Manager» выберем нужный компонент и установим необходимые опции. В свойствах «Interactive/Description» нужно выбрать команду «Polygonal shape created from primitives on TopOverlay» (создание многоугольной формы из примитивов в слое TopOverlay). В свойствах «Body State» выберем команду «In Component C21», а в свойствах «Overall Height» зададим высоту модели равную 22 мм. В итоге получим 3D-модель конденсатора (рис. 3, б).

В случаях если графика корпуса имеет пазы, фаски, скругления, то для формирования 3D-моделей корпусов ЭК посредством экструзии нужно применять опцию «Polygonal shape created from primitives on TopOverlay» – создание многоугольной формы из примитивов в слое TopOverlay (для конденсаторов, микросхем и др.).

В результате исследований 3D-моделирования корпусов ЭК посредством метода экструзии был сделан вывод о том, что для ЭК, у которых в посадочном месте отсутствует графика корпуса, для формирования 3D-моделей нужно применять опцию «Shape created from bounding rectangle on All Layers» – создание прямоугольной формы из примитивов во всех слоях (для резисторов, конденсаторов, диодов поверхностного монтажа, а также др.).

Добавление 3D-моделей корпусов ЭК в формате STEP рассмотрим на примере формирования 3D-модели корпуса разъема «IDC10M». Добавление STEP-модели к посадочному месту на плате осуществляется в библиотеке посадочных мест, в данном случае «SW_CONN.PCBLib», с помощью панели «PCB Library». В режиме 3D-просмотра в списке компонентов библиотеки выберем нужный компонент, в данном случае разъем «IDC10M».

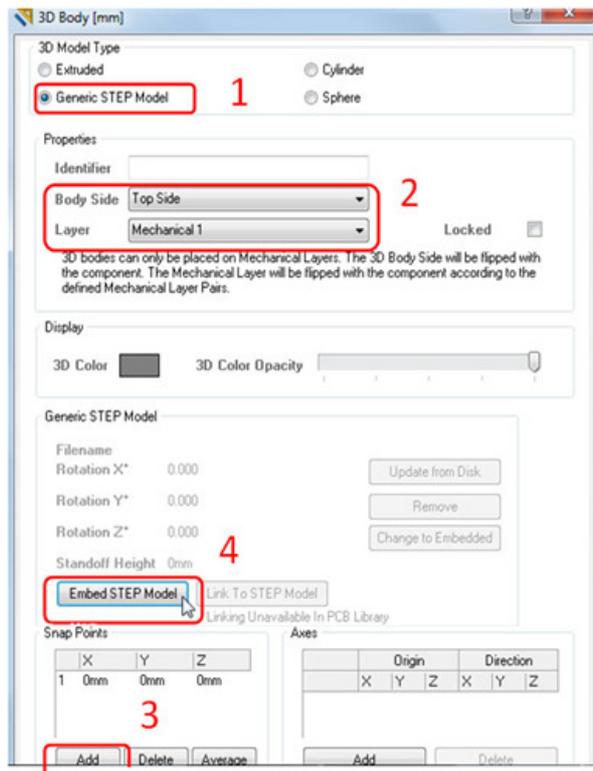


Рис. 4. Диалоговое окно команды «3D Body»

Нужно выбрать команду «Place/3D Body» и в диалоговом окне «3D Body» установить необходимые опции: в области «3D Model Type» выбрать «Generic STEP Model». В поле «Properties» в качестве стороны и слоя расположения модели указать «Top Side и Mechanical 1». В области «Snap Points» нажать на кнопку «Add», тем самым добавить нулевую точку привязки на модели (рис. 4).

Для добавления 3D-модели в формате STEP нужно нажать кнопку «Embed STEP Model» в поле «Generic STEP Model», и выбрать файл модели в формате STEP, в данном случае «IDC-10MS.STEP», затем закрыть окно кнопкой «OK» и разместить 3D-модель на поле рабочей области.

Двойным щелчком по модели снова вызвать окно свойств «3D Body», указать угол поворота вокруг оси X (Rotation X) 90°, нажать «OK». Выполнить команду «Tools/3D Body Placement/Position 3D Body». Мышкой указать модель, после этого курсор станет трехмерным. Подвести его к точке привязки, которая расположена в центре верхней плоскости модели, и щелкнуть левой кнопкой мыши – курсор «прилипнет» к точке привязки. После последовательного нажатия клавиш J, R, курсор переместится в начало координат. Для фиксации расположения модели нужно нажать на клавиатуре ENTER. В итоге получается 3D-модель, правильно расположенная относительно посадочного места (рис. 5). Командой «File/Save» сохраняем изменения в библиотеке [2].

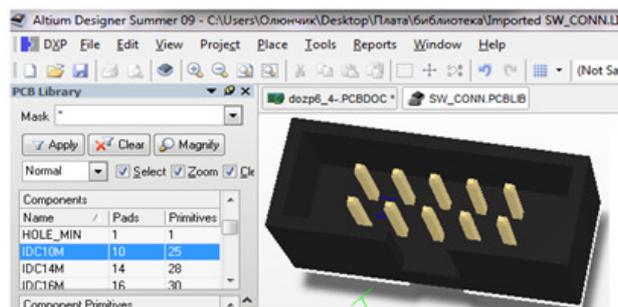


Рис. 5. 3D-модель корпуса разъема

Для того чтобы обновить 3D-модель ПП нужно на панели «PCB Library» нажать правой кнопкой «мыши» и выбрать команду «Update PCB With All», и все внесенные изменения в библиотеке отразятся на 3D-модели ПП.

Для формирования 3D-моделей элементов управления, средств индикации и соединителей рекомендуется использовать импорт 3D-моделей в формате STEP в систему Altium Designer (для кнопок, переключателей, ЖК-индикаторов, светодиодов, разъемов и др.).

Для формирования трехмерных ограничительных зон, которые необходимы при установке платы в корпус ступенчатой формы, рекомендуется применять метод экструзии. Ограничительные зоны формируются с помощью вышеописанной команды 3D Body, только используется опция «Extruded» (рис. 4). Это означает, что форма тела будет повторять очертания графики «3D Body», а высоту следует устанавливать отдельно.

В свойствах «Properties» параметр «Identifier» используется только в случаях для STEP-моделей; параметр «Body Side» = «Top Side», означает, что модель находится с верхней стороны (с той же, с которой следует делать и графику посадочного места); «Layer» = «Mechanical 1, Top Assy», означает, что графика трехмерного изображения будет находиться на 1 механическом слое; флаг «Locked» означает, что тело не нужно редактировать в PCB проекте. В свойствах отображения «Display» указывается цвет и прозрачность тела. Настройка прозрачности удобна для сложной формы тела, состоящей из нескольких трехмерных тел, когда следует показать и внутреннюю структуру скрытых тел. В параметрах непосредственно тела «Extruded» указываются границы тела по высоте относительно стороны расположения. Например, вершина тела «Overall Height» = 10 мм и подножье тела «Standoff Height» = -3 мм. Отрицательная величина означает, что тело выйдет на глубину 3 мм от верхней стороны платы. Других настроек можно не указывать, так как положение и размер тела можно определить при расположении графики 3D Body [3].

Метод экструзии в системе Altium Designer рекомендуется применять для формирования 3D-моделей корпусов ЭК, таких как: резисторы, конденсаторы, диоды и т.п. Для ЭК со штыревыми выводами рекомендуется применять опции: «Shape created from bounding rectangle on TopOverlay» (создание формы по границам прямоугольника в слое TopOverlay) и «Polygonal shape created from primitives on TopOverlay» (создание многоугольной формы из примитивов в слое TopOverlay). Для ЭК поверхностного монтажа рекомендуется применять опцию: «Shape created from bounding rectangle on All Layers» (создание прямоугольной формы из примитивов во всех слоях).

Метод экструзии также можно применить для формирования трехмерных ограничительных зон, которые необходимы при установке платы в корпус ступенчатой формы.

Импорт моделей в формате STEP рекомендуется применять для элементов управления, средств индикации и соединителей (кнопок, переключателей, ЖК-индикаторов, светодиодов, разъемов и др.).

Разработанную методику формирования 3D-модели ПП в системе Altium Designer можно также использовать и при формировании 3D-модели ПП в других EDA-системах, таких как Cadstar-3D и KiCad.

Литература

1. Bao Z. Rechnerunterstützte Kollisionsprüfung auf der Basis eines B-rep/Polytree/ CSG-Hybridmodells in einem integrierten CAD/CAM-System. – Düsseldorf: VDI Verlag, 2000. – 187 p.

2. Точное попадание Altium Designer 10. Тест-драйв. Инструкция по выполнению. – М.: ЗАО «Нанософт», 2011. – 69 с.
3. Пранович В.Ю. Altium Designer Summer 09. Практические подходы к организации библиотек и структуры проектов. Библиотека посадочных мест // Технологии в электронной промышленности. – М., 2010. – № 38. – С. 79–84.

УДК 664.38

ФЕРМЕНТАТИВНАЯ БИОКОНВЕРСИЯ ПОЛИСАХАРИДОВ МУКИ ЛЮПИНА И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ БЕЛКОВЫХ КОНЦЕНТРАТОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

Л.М. Кузнецова¹, М.Л. Доморощенкова², Т.Ф. Демьяненко²

¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики,

²Государственное научное учреждение Всероссийский научно-исследовательский институт жиров Российской академии сельскохозяйственных наук)

Научный руководитель – д.т.н., профессор Л.А. Забодалова

(Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики)

В последние годы интерес научного сообщества направлен на продовольственный люпин как на культуру богатую белком, пищевыми волокнами, маслами, β-каротином, витаминами. Белковые препараты из люпина отличаются биологической ценностью и низкой себестоимостью.

Предлагаемая технология сочетает в себе не только традиционный способ получения белковых концентратов методом кислотной экстракции небелковых соединений, но и современные биотехнологические приемы, позволяющие провести ферментативный гидролиз углеводов люпиновой муки в целях улучшения их экстрагируемости и получения в дальнейшем целевого продукта высокого качества.

Ключевые слова: люпин узколистный, концентраты белка люпина, некрахмалистые полисахариды, гидролитические ферменты.

Введение

Необходимость создания функциональных пищевых продуктов, соответствующих современным представлениям о здоровом питании, указывает вектор развития пищевой биотехнологии в России. Новые пищевые производства в качестве приоритетных включают технологии получения белковых продуктов. Причиной создания принципиально новых технологий получения белковых компонентов пищи явилась в первую очередь нехватка белка в питании россиян.

Наибольший интерес как нетрадиционный источник белка вызывают бобы люпина. Еще совсем недавно эта культура использовалась только на корм скоту, но сейчас благодаря селекции появились различные сорта люпина, позволяющие использовать его для обогащения пищевых продуктов [1].

Разработка технологий производства белковых продуктов из семян люпина узколистного (*L. angustifolius*) представляет особый интерес для Северо-Запада Российской Федерации, так как при его возделывании в наших почвенно-климатических условиях не происходит существенного накопления алкалоидов в семенах, характерного для этой культуры при выращивании в жарком климате при высоких температурах [2]. В частности, разрабатываются рецептуры безглютеновых изделий из семян низкоалкалоидного узколистного люпина [3]. Анализируется возможность использования цельносмолотой муки люпина в качестве сырья для получения изолятов белка [4] или для получения белковых концентратов. Исследуются функциональные свойства белков люпина, подвергнутых ограниченному

ферментативному гидролизу, а также эффективность их использования в качестве аналога соевого белка [5].

Традиционная технология получения концентратов растительного белка подразумевает удаление из исходного сырья безазотистых экстрактивных веществ при pH изоэлектрической точки белков. Однако наличие в муке люпина достаточно большого количества нерастворимых полисахаридов обнаруживает необходимость улучшения их экстрагируемости посредством ферментативного гидролиза.

Целью работы являлась разработка технологических решений для проведения ферментативной биоконверсии полисахаридного комплекса муки люпина при получении белкового концентрата.

Материалы и методы

Для проведения экспериментов была использована люпиновая мука из семян люпина узколистного сорта «Снежень», предоставленная ВНИИ люпина, г. Брянск, с содержанием сырого протеина 46% на сухие вещества (с.в.), сырого жира – 10,1% на с.в., золы – 6,5% на с.в., клетчатки – 2,9% на с.в.

Использованы следующие ферментные препараты (ФП):

1. CelluclastBG – ФП целлюлазы, выделяемый из культуры грибов *T. reesei*. Препарат предоставлен АО «Novozymes A/S» (Дания). Активность фермента 3500 ед/г.
2. Целлюлаза-100 – комплексный цитолитический ферментный препарат, выделяемый из смешанной культуры грибов *Asp.foetidusi T. viride*. Обладает активностью эндо- β -1,4-глюканазы, целлобиогидролазы, целлобиазы, эндо- β -1,3-1,4-глюканазы, 3-1,3-глюканазы, ксиланазы, полигалактуроназы, пектинэстеразы. Сопутствующие ферменты – хитиназа, кислая протеаза. Целлюлазная активность фермента 540 ед КМЦ/мл.
3. PentopanMonoBG (ксиланаза эндо-1,4-) – ФП ксиланазы, выделяемый из культуры грибов *A. oryzae*. Препарат предоставлен АО «Novozymes A/S» (Дания). Активность фермента 2500 ед КС/мл;
4. ДистицимБА-ТСпециал является эндоферментом, гидролизующим 1,4- α -D-гликозидные связи в молекуле крахмала с образованием декстринов и олигосахаридов. Амилолитическая активность 950 ед/г.

Влажность продуктов определяли весовым методом в соответствии с ГОСТ 13586.5-93 [6] и ГОСТ 29144-91 [7]; содержание сырого протеина по методу Кьельдаля на автоматическом анализаторе KjeltecAuto фирмы Tecator (Швеция) в соответствии с ГОСТ 10846-91 [8]. Метод определения содержания сырого протеина в люпиновой сыворотке по ГОСТ 25179-90 [9]. Метод определения содержания жира в белковой пасте по ГОСТ 13496.15-97 [10]. Определение массовой доли общего сахара (в расчете на инвертный) в сыворотке по ГОСТ 3628-78 [11]. Анализ компонентного состава моно- и дисахаридов в сыворотке проводился методом ВЭЖХ по ГОСТ Р 53766-2009 [12].

Обсуждение результатов

Исследование действия гидролитических ФП на экстрагируемость небелковых соединений из муки люпина. Известно, что в состав углеводов люпиновой муки входят моносахариды, сахароза, декстрины, крахмал, клетчатка, гемицеллюлозы и пектиновые вещества, пентозаны, с преобладающим содержанием гемицеллюлоз и пектиновых веществ. Общее содержание углеводов в исходной люпиновой муке по расчету составляет 37,4%. Аналитически в муке была определена концентрация сырой клетчатки – 2,9% на с.в. муки или в пересчете 7,75% от общего содержания углеводов.

Для деструкции полисахаридов люпиновой муки использовали гидролазы с различной субстратной специфичностью.

На рис. 1 изображена операционная схема процесса производства концентрата белков люпина с использованием комплекса гидролитических ферментов.



Рис. 1. Операционная схема процесса получения концентрата белков люпина

Кислотная экстракция небелковых соединений из люпиновой муки была проведена совместно с ферментативным гидролизом суспензии гидролитическим ферментом с амилалитической, ксилолитической, либо целлюлолитической ферментативной активностью [6]. Максимальный выход целевого продукта был достигнут воздействием на субстрат ферментного препарата Целлюлаза-100 и составил $57,40 \pm 0,80\%$.

Также в ходе исследования были установлены оптимальные параметры совмещенного процесса экстракции небелковых соединений из люпиновой муки в кислой среде и ферментативного расщепления балластных веществ люпиновой муки целлюлолитическим ферментом [13, 14]. И в оптимальных для целлюлаз условиях ведения процесса (температура 50°C ; pH 4,4–4,5; гидромодуль 1:15) была проведена биоконверсия нативных полисахаридов с помощью ФП Целлюкласт [15]. В результате эксперимента была определена оптимальная дозировка ФП Целлюкласт, которая составила $1,08 \pm 0,02$ ед/г.

В образцах белковой пасты, полученных в опытах с целлюлазами, было определено содержание жира по методу Сокслета. Содержание жира в пасте составило $10 \pm 1\%$ на с.в. Некоторая часть липидов вместе с белковыми молекулами сконцентрировалась в пасте. Содержание жира в конечном продукте возросло на 1–2% по сравнению с исходной мукой. Тем не менее, воздействие целлюлаз привело к высвобождению молекул жира из сложных структур люпиновой муки, образуемых связанными друг с другом молекулами липидов, белков и некоторых полисахаридов. В этой связи можно говорить о создании технологии, позволяющей получить целевой продукт со сниженным содержанием жиров в своем составе.

Исследование влияния совместного применения ферментных систем на экстрагируемость небелковых соединений из люпиновой муки. Водная среда позволяет провести многосубстратную биоконверсию в одну стадию с помощью комплексного воздействия различных гидролитических ферментов. Но не исключено, что одностадийная обработка ферментами может привести к ингибированию действия одного фермента продуктами реакции, катализируемой другим ферментом. По этой причине направление дальнейших исследований связано с изучением влияния на комплекс полисахаридов одностадийной обработки люпиновой муки смесью ферментных систем и многостадийной обработки муки указанными ФП с целью выявления наиболее эффективного и мало затратного способа получения белкового концентрата.

Для получения эффективной гидролитической композиции были составлены мультиэнзимные композиции (МЭК) из перечисленных препаратов, состав которых приведен в табл. 1.

Таблица 1. Состав МЭК, использованных для ферментативного гидролиза

Номер	Состав композиции
1	1,08±0,02 ед/г ФП «Целлюлаза-100» и 0,7 ед/г «Дистицим БА-Т»
2	1,08±0,02 ед/г ФП «CelluclastBG» и 5±1 ед/г «PentopanMonoBG»
3	1,08±0,02 ед/г ФП «CelluclastBG» и 25±1 ед/г «PentopanMonoBG»

Экспозиция субстрата с МЭК проводилась при температуре 50°C; pH 4,5; гидромодуле 1:15 в течение 40 мин.

Для проведения многостадийной обработки на каждой стадии эксперимента создавались оптимальные условия для воздействия определенного ФП на субстрат. Первый вариант обработки осуществлялся следующим образом: обработка Целлюкластом при оптимальной концентрации фермента проводилась при 40°C и pH 4,8 в течение 40 мин, затем суспензия была подвергнута постепенному нагреву до 70°C (такой температурный режим позволяет частично инактивировать Целлюкласт и приблизиться к температурному оптимуму действия ФП Пентопан Моно). На второй стадии процесса при 70°C был внесен ФП Пентопан Моно (соотношение концентраций ФП стандартной активности принято равным 1:1), обработка суспензии также длилась 40 мин. Второй вариант включал стадию обработки ксиланазой при температуре 50°C и гидромодуле 1:15 при pH 4,8 в течение 30 мин и стадию обработки ФП Целлюкласт в течение 30 мин. Соотношение концентраций ФП стандартной активности также составляет 1:1. Полученные результаты приведены в табл. 2.

Таблица 2. Содержание протеина в белковой пасте при проведении экстракции в одну или несколько стадий

Вариант обработки	Содержание сырого протеина в пасте, % на с.в.
МЭК 1	54,90±1,40
МЭК 2	56,04±1,10
МЭК 3	51,88±1,30
Многостадийная обработка Вариант 1	50,57±1,09
Многостадийная обработка Вариант 2	49,96±1,20

Как следует из данных табл. 2 наилучший результат получен при использовании МЭК 2. При этом содержание сырого протеина в целевом продукте возрастает примерно на 10% по сравнению с исходной мукой и на 6% по сравнению с контрольным продуктом.

Следует отметить, что в условиях проведенных экспериментов не удалось выявить существенных различий в действии одиночного фермента Целлюкласта и

используемых МЭК с оптимальной дозировкой Целлюкласта в их составе. Повышенное содержание ФП Пентопан Моно в составе МЭК 3 по сравнению с МЭК 2 приводило к снижению содержания сырого протеина в белковой пасте. Это может быть связано с изменением экстрагируемости белковых соединений и их переходом в раствор при повышенной концентрации Пентопана Моно и (или) с ингибированием действия Целлюкласта продуктами гидролиза, образующимися при гидролизе полисахаридов ФП Пентопан Моно. Многостадийная обработка оказалась менее эффективной по сравнению с одностадийной.

Исследование углеводного состава люпиновой сыворотки

В результате ферментативной биоконверсии углеводного комплекса люпиновой муки при рН изоэлектрической точки белков и последующем механическом разделении твердой и жидкой фазы был получен супернатант (сыворотка) с содержанием сухих веществ 2%. В этом образце проанализировано суммарное содержание водорастворимых углеводов по методу Бертрана. Массовая доля общего сахара (в расчете на инвертный) составила 0,5%.

Компонентный анализ супернатанта проводился на жидкостном хроматографе фирмы «Стайер» с рефрактометрическим детектором, на колонке, заполненной сорбентом «Luna NH₂ 5μ» фирмы «Phenomenex». В качестве подвижной фазы использовалась смесь ацетонитрил-вода, взятая в объемных соотношениях 77:23.

Соотношение компонентов в смеси «сахароза:глюкоза:фруктоза» по данным хроматографирования для люпиновой сыворотки составляет 10:1:1.

Как известно, общее содержание углеводов в исходной люпиновой муке по расчету составляет 37,4% (41,5% в пересчете на с.в.), в том числе содержание моно- и дисахаридов 3,1% (3,4% в пересчете на с.в.). В исследуемом образце люпиновой сыворотки общее содержание углеводов составляет 0,5% (25% в пересчете на с.в.), в том числе дисахарид сахароза 0,34% (17% в пересчете на с.в.) и моносахариды 0,06% (3% в пересчете на с.в.). Таким образом, суммарное содержание моно- и дисахаридов в супернатанте возросло до 20% на с.в., в то время как в исходном сырье значение этого показателя составило 3,4% на с.в.

Готовый сухой концентрат белков люпина, полученный по предлагаемой технологии, будет позиционироваться на рынке как компонент сухих смесей для получения специализированных продуктов питания и как функциональная пищевая добавка, обогащающая белком исходное сырье. Разрушение некрахмалистых полисахаридов в процессе гидролиза может ускорить процесс экстракции алкалоидов, а также способствует высвобождению молекул жира. В связи с этим предложенная технология получения концентрата белков позволяет получить целевой продукт со сниженным содержанием жиров в своем составе, и перспективна для применения, как на безалкалоидном, так и на алкалоидном сырье.

Заключение

Разработана технология получения белкового концентрата люпина с использованием процесса экстракции небелковых соединений из люпиновой муки в кислой среде, совмещенного с обработкой углеводов субстрата комплексом гидролитических ферментов. Теоретически и экспериментально обоснованы параметры процесса, определена оптимальная дозировка целлюлаз, необходимая для достижения максимального содержания белка в целевом продукте. Проведены исследования действия амилаз и ксиланаз на экстрагируемость небелковых соединений из муки люпина. Составлены МЭК из предлагаемых ферментных препаратов с целью

проведения многосубстратной биоконверсии муки. В результате сравнения одно- и многостадийной обработки субстрата ферментных препаратов отдано предпочтение одностадийному способу, что согласуется с теоретическими данными о проявлении синергизма между компонентами МЭК и способствует снижению экономических затрат на производство белкового концентрата показанным способом.

Исследован компонентный состав супернатанта. Установлено, что количество растворимых углеводов в супернатанте возросло на 16,6% по сравнению с исходной мукой. Изучен характер гидролитических изменений и установлено, что разрушение некрахмалистых полисахаридов в процессе гидролиза приводит к высвобождению молекул жира. Таким образом, получен белковый концентрат со сниженным содержанием жиров в своем составе.

Литература

1. Махотина И.А., Елисеева Л.Г., Евдокимова О.В. Сравнительная характеристика функционально-технологических свойств белковых препаратов люпина и сои // Товаровед продовольственных товаров. – 2009. – № 7. – С. 5–8.
2. Купцов Н.С., Такунов И.П. Люпин – генетика, селекция, гетерогенные посевы. – Брянск, Клинцы: Издательство ГУП «Глинцовая городская типография», 2006. – 576 с.
3. Красильников В.Н., Мехтиев В.С., Доморощенкова М.Л., Демьяненко Т.Ф., Гаврилюк И.П., Кузнецова Л.И. Перспективы использования белков из семян люпина узколистного отечественной селекции в безглютеновых мучных кондитерских изделиях // Пищевая промышленность. – 2010. – № 2. – С. 40–43.
4. Доморощенкова М.Л., Эгги Э.Э., Мехтиев В.С., Демьяненко Т.Ф. Люпин узколистный – перспективный источник пищевого белка // Хранение и переработка с/х сырья. – 2009. – № 10. – С. 53–56.
5. Браудо Е.Е., Даниленко А.Н., Елисеева Л.Г., Махотина И.А. Повышение пищевой ценности белков люпина методом ограниченного ферментативного гидролиза // Известия ВУЗов. Пищевая технология. – 2006. – № 2–3. – С. 69–70.
6. ГОСТ 13586.5-93. Зерно. Метод определения влажности. – Введ. 01.01.1995. – Минск: Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 2009. – 8 с.
7. ГОСТ 29144-91. Зерно и зернопродукты. Определение влажности (базовый контрольный метод). – Введ. 01.10.1992. – М.: Изд-во стандартов, 2004. – 6 с.
8. ГОСТ 10846-91. Зерно и продукты его переработки. Метод определения белка. – Введ. 01.06.1993. – М.: Изд-во стандартов, 2009. – 7 с.
9. ГОСТ 25179-90. Молоко. Методы определения белка. – Введ. 01.01.1991. – М.: Изд-во стандартов, 2009. – 6 с.
10. ГОСТ 13496.15-97. Корма, комбикорма, комбикормовое сырье. Методы определения содержания сырого жира. – Введ. 01.01.1999. – М.: Изд-во стандартов, 2011. – 10 с.
11. ГОСТ 3628-78. Молочные продукты. Методы определения сахара. – Введ. 01.07.1979. – М.: Изд-во стандартов, 2009. – 15 с.
12. ГОСТ Р 53766-2009. Продукция соковая. Определение сахарозы, глюкозы, фруктозы и сорбита методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. – Введ. 01.01.2011. – М.: Стандартиформ, 2010. – 12 с.
13. Доморощенкова М.Л., Демьяненко Т.Ф., Мамаева Л.М. Исследование процесса получения белковых концентратов люпина с использованием ферментативного

- гидролиза полисахаридов // Материалы 10-й международной конференции «Масложировая индустрия – 2010». – 27–28 октября. – СПб, 2010. – С. 110–111.
14. Забодалова Л.А., Доморощенкова М.Л., Демьяненко Т.Ф., Кузнецова Л.М. Исследование процесса получения концентрата белков люпина с использованием мультиэнзимных композиций // Материалы международной научно-практической конференции «Культура люпина – его возможности и перспективы». – Брянск: ГНУ ВНИИ люпина. – июль 2012.
 15. Забодалова Л.А., Доморощенкова М.Л., Демьяненко Т.Ф., Кузнецова Л.М. Применение ферментативного гидролиза в технологии белковых концентратов из люпина. Электронный журнал. – СПб: СПбГУНиПТ, 2012. – № 2. – сент. 2012 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.open-mechanics.com/journals> свободный.

УДК 535.324.2

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЩЕЛОКОВ И РЕФРАКТОМЕТРИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА КОНТРОЛЯ ПРОЦЕССОВ РЕГЕНЕРАЦИИ В СУЛЬФАТНОМ ПРОИЗВОДСТВЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

С.Н. Лапшов

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.Д. Яськов

Рассмотрены лабораторные и промышленные методы и средства исследования оптических свойств щелоков, отобранных на различных этапах процессов регенерации из сульфатного производства целлюлозы. Представлены результаты исследования концентрационных зависимостей температурного коэффициента показателя преломления водных растворов черных и зеленых щелоков, а также их графики функции пропускания излучения в видимом и ультрафиолетовом диапазонах длин волн. Обсуждается возможность применения полученных данных для температурной коррекции показателя преломления при калибровке промышленных рефрактометров и контроля процесса каустизации зеленого щелока по линиям поглощения, находящимся в ультрафиолетовой области спектра. Приводится краткое описание оптико-электронной системы наиболее востребованного в реальных производствах рефрактометра ПР-1М.

Ключевые слова: показатель преломления, рефрактометрия, контроль состава раствора, дисперсия.

Оптические рефрактометрические технологии, использующие метод полного внутреннего отражения, представляют существенный интерес для контроля жидкофазных продуктов в химических производствах (в том числе пищевом и кондитерском, целлюлозно-бумажном, производствах кислот и щелочей, галургий и т.п.). Промышленные рефрактометры устанавливаются непосредственно в технологический поток и могут обеспечить непрерывное измерение концентрации растворимого сухого остатка или состава двухкомпонентного раствора.

Рефрактометрические методы и средства достаточно успешно используются для определения концентраций растворимых сухих веществ в черных щелоках, образующихся в результате сульфатной варки целлюлозы [1]. После нескольких ступеней термического выпаривания эти щелока сжигают в содорегенерационных котлах (СРК) (рис. 1) при концентрациях сухого остатка в большинстве действующих производств до 70–75% и выше, с частичным восстановлением варочных химических компонентов в виде зеленого щелока.

Процесс регенерации щелочи состоит из трех основных операций.

1. Выпаривание черного щелока до концентрации сухих веществ 65–75%.
2. Сжигание концентрированного черного щелока в СРК с получением регенерированного минерального продукта в виде плава.

Далее плав поступает в бак-растворитель со слабым белым щелоком, образуя зеленый щелок.

3. Каустизация зеленого щелока.

На рис. 1 представлен технологический цикл варочных компонент в сульфатном способе производства целлюлозы, имеющий замкнутый характер. На нем указаны те этапы производства, на которых необходимо отслеживать параметры щелоков. Они помечены схематическим изображением рефрактометра.

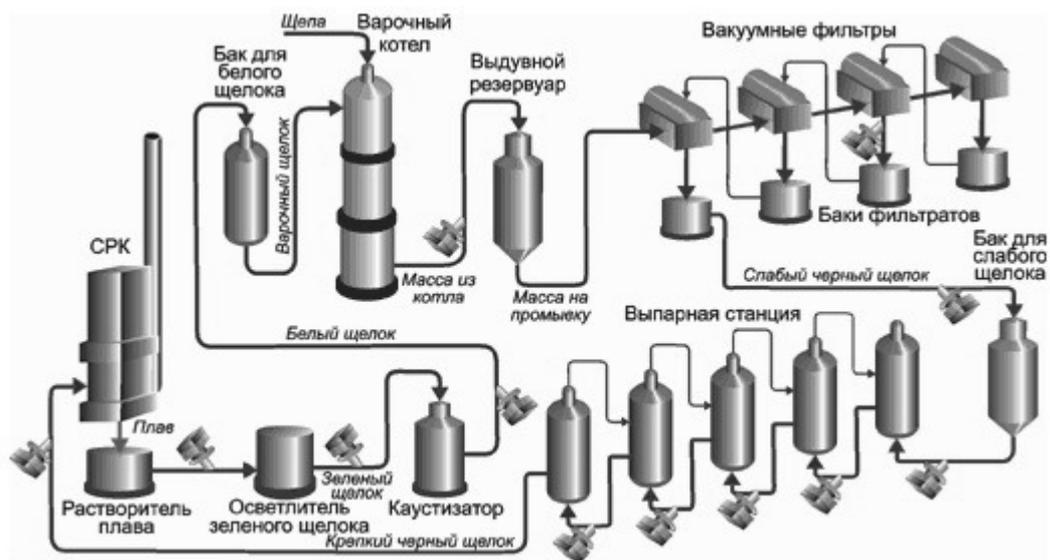


Рис. 1. Общая схема регенерации щелочи при сульфатном способе производства целлюлозы

Промышленные рефрактометрические датчики могут обеспечить контроль сухого остатка в растворах щелоков на любой из ступеней выпарного процесса, если достоверно известны их оптические свойства. В доступной научно-технической литературе необходимые данные представлены ограниченно, на качественном уровне и в лучшем случае имеют вид оценочного характера. При этом нужно учитывать, что эти данные обычно получают в лабораторных условиях при помощи гравиметрического метода, в котором для определения концентрации абсолютно сухого вещества пробу щелока высушивают, сжигают и прокалывают в муфельных печах. В условиях неограниченного доступа воздуха в минеральной части происходят химические преобразования, сильно отличающиеся от тех, которые происходят в содорегенерационном котлоагрегате. Масса образовавшейся золы оказывается больше массы минеральной части. Таким образом, данные, получаемые этим методом, имеют погрешность до 5%, и не могут быть применены для калибровки промышленных рефрактометров, используемых для определения концентрации сухих веществ в щелоках. В связи с этим требуется основательное исследование оптических свойств растворов щелоков и возможности в дальнейшем применения полученных результатов, в том числе и по их температурному коэффициенту показателя преломления, для калибровки промышленных рефрактометров, используемых при контроле варочных процессов в целлюлозно-бумажном производстве [2–4].

Большинство доступных рефрактометрических датчиков при внешнем конструктивном различии имеют сходные технические характеристики. Так рабочий диапазон по показателю преломления раствора составляет $\Delta n = 0,07\text{--}0,13$ с возможностью его перенастройки в некоторых конструкциях в пределах $n = 1,3330\text{--}1,6000$ (соответственно в сахарной шкале $^{\circ}Bx = 0\text{--}100\%$), предельные рабочие температуры – до $t = 150^{\circ}\text{C}$, при абсолютной погрешности определения концентраций

растворов $k=0,1-0,5\%$ от диапазона измерений. В целом такие характеристики удовлетворяют большинству применений рефрактометрических технологий.

На кафедре твердотельной оптоэлектроники НИУ ИТМО был разработан рефрактометрический датчик ПР-1М. По сравнению с зарубежными аналогами он выполнен в виде моноблока, состоящего из погружного зонда и оптико-электронной системы обработки данных, что в значительной мере удешевляет конструкцию.

Существенным и общим для всех известных конструкций промышленных рефрактометров недостатком является систематическая погрешность измерений, обусловленная осаждением на рабочей грани оптической призмы нерастворимых продуктов технологического потока. По этой причине во многих случаях применяются системы очистки рабочей грани оптической призмы перегретым паром (до $t=180-200^\circ\text{C}$) или водой высокого давления, что приводит к усложнению конструкции и, соответственно, дополнительному значительному возрастанию общей стоимости рефрактометра. В рефрактометре ПР-1М эту проблему удалось решить за счет применения погружного зонда специальной формы и оптической призмы из лейкосапфира больших размеров, по сравнению с теми, что применяются в зарубежных аналогах. Таким образом, при правильном монтаже рефрактометра в трубе, через которую идет поток жидкофазных веществ, параметры которых необходимо отслеживать, рабочая грань призмы не загрязняется.

Внешний вид промышленного рефрактометра ПР-1М представлен на рис. 2.

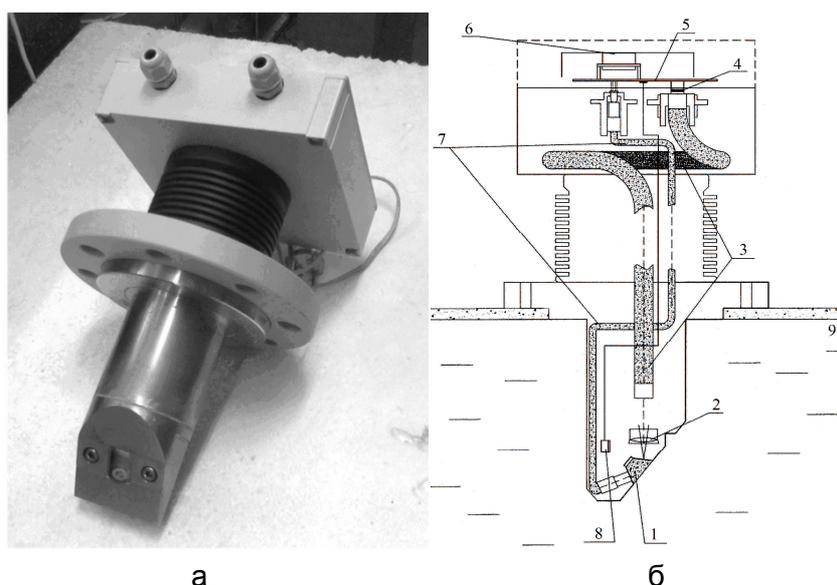


Рис. 2. Внешний вид рефрактометра ПР-1М (а); оптическая схема (б): 1 – призма; 2 – объектив; 3 – регулярный волоконно-оптический жгут; 4 – линейка ПЗС; 5 – электронная плата; 6 – дисплей; 7 – осветительный волоконно-оптический жгут; 8 – термодатчик; 9 – термостатируемая кювета

Были измерены показатели преломления пяти проб растворов черных щелоков в температурном диапазоне от 15°C до 90°C . Основной образец содержал концентрацию абсолютно сухого вещества равную $24,6\%$. Остальные пробы были получены разбавлением основного образца водой по заранее заданному процентному содержанию концентрации растворимого сухого остатка (т.е. по его известной массовой доле, содержащейся в исходном образце).

Измерение показателя преломления производилось на лабораторном рефрактометре УРЛ-1, в котором предусмотрена возможность изменения температуры исследуемого образца: измерительная и осветительная призмы вмонтированы в полые металлические рубашки (камеры), по которым может циркулировать термостатирующая вода. В связи с этим совмещенный вместе с термостатом

прокачного типа MLW 2U^c, рефрактометр УРЛ-1 дает возможность проследить, как изменяется показатель преломления с увеличением или уменьшением температуры, что, в свою очередь, дает необходимые данные для нахождения температурного коэффициента показателя преломления исследуемого образца.

Снятие измерений показателя преломления производилось при увеличении температуры образца на каждые четыре градуса. Результаты измерений зависимости показателя преломления от температуры для двух образцов черного щелока с концентрациями сухого вещества $k=24,6\%$ и $k=16,7\%$ представлены на рис. 3, а, б, соответственно.

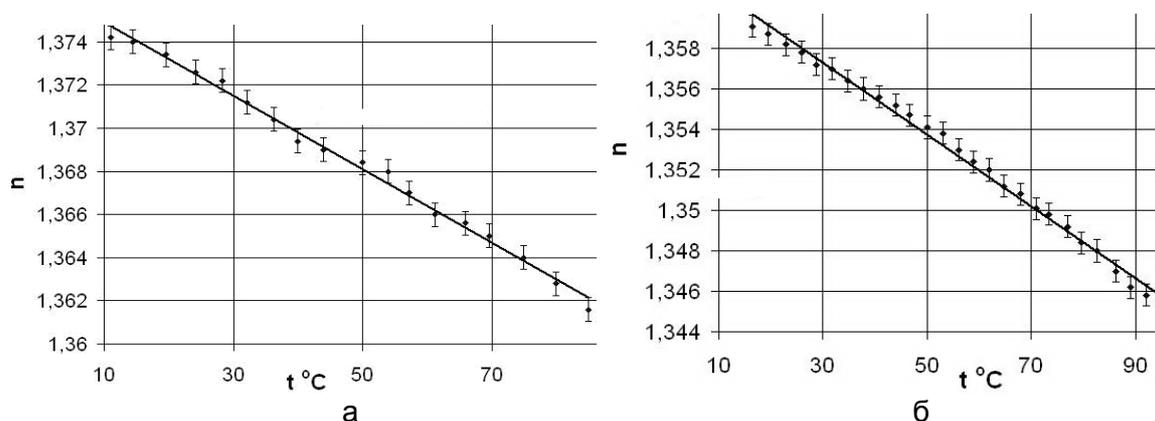


Рис. 3. Зависимость показателя преломления от температуры для черного щелока с концентрацией сухого вещества: $k=24,6\%$ (а); $k=16,7\%$ (б)

Кривые, рассчитанные теоретически, не выходят за планки погрешности, относительное значение которых $\Delta n \leq 0,04\%$, вблизи точек, измеренных в эксперименте.

Уравнение кривой аппроксимации для пробы черного щелока с концентрацией $k=24,6\%$ имеет вид:

$$n = 1,3766 - 1,6981 \cdot 10^{-4} \cdot t. \quad (1)$$

Величина квадрата смешанной корреляции для данной кривой составила $R^2=0,99372$.

Вид расчетной кривой для пробы черного щелока с концентрацией растворимых сухих веществ $k=16,7\%$:

$$n = 1,3626 - 1,7727 \cdot 10^{-4} \cdot t. \quad (2)$$

Величина достоверности аппроксимации составила $R^2=0,99344$.

Измерение коэффициента пропускания черного щелока проводилось на экспериментальной установке, представляющей собой спектрометр, сопряженный с персональным компьютером. Спектрометр обеспечивает измерение спектров коэффициента пропускания образцов растворов черного щелока в диапазоне длин волн 380–760 нм с погрешностью не хуже 2%. Кювета для исследуемых образцов была выполнена из двух пластин кварцевого стекла, между которыми заключалась исследуемая жидкость, толщина слоя которой составляла 0,05 мм.

Результаты измерения спектра пропускания растворов черного щелока представлены на рис. 4.

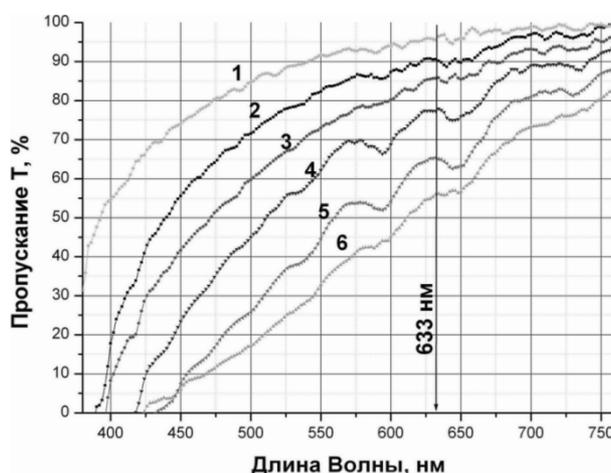


Рис. 4. Спектры пропускания черных щелоков в кювете толщиной 0,05 мм при концентрациях сухого остатка, Brix: кривая 1 – 4,3%; кривая 2 – 9,1%; кривая 3 – 13,3%; кривая 4 – 15,3%; кривая 5 – 20,0%; кривая 6 – 24,3%

На рис. 4 отчетливо видно, что максимум пропускания черного щелока находится вблизи длинноволновой области спектра. Исходя из этого, при работе с черными щелоками лучше всего использовать осветители, максимум излучения которых находится в указанном диапазоне длин волн.

Также были исследованы оптические свойства зеленого щелока, который является продуктом регенерации отработанной щелочи. Исследовалась зависимость показателя преломления от температуры для нескольких образцов с начальными концентрациями $k=28,2\%$ и $k=15,8\%$ по Brix. Первоначально в наличии был только образец с концентрацией $k=28,2\%$ Brix, остальные пробы растворов, также как и растворы черного щелока, были получены разбавлением основного образца водой, по заранее заданной массовой доле компонент.

Результаты измерений показателя преломления водных растворов зеленого щелока в температурном диапазоне от 10°C до 80°C представлены на рис. 5.

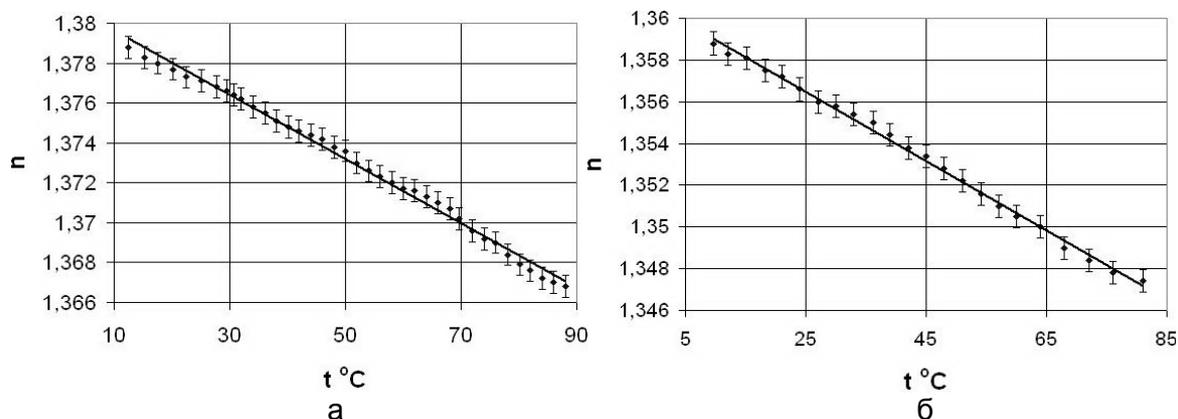


Рис. 5. Зависимость показателя преломления от температуры для зеленого щелока с концентрацией: $k=28,2\%$ (а); $k=15,8\%$ (б)

Уравнение кривой аппроксимации для раствора зеленого щелока с концентрацией $k=28,2\%$:

$$n = 1,3812 - 1,609 \cdot 10^{-4} \cdot t \quad (3)$$

и величина квадрата смешанной корреляции $R^2=0,99389$.

Вид расчетной кривой для раствора с концентрацией $k=15,8\%$:

$$n = 1,3606 - 1,6653 \cdot 10^{-4} \cdot t \quad (4)$$

Значение достоверности аппроксимации для данной кривой $R^2=0,99667$.

Кривые, рассчитанные теоретически, не выходят за планки погрешностей для показателя преломления в $\Delta n=0,04\%$.

Ввиду прозрачности зеленого щелока в видимом диапазоне длин волн, выдвигалось предположение о существовании электронных полос поглощения в ультрафиолетовой (УФ) области спектра. Для проверки этой гипотезы был проведен эксперимент по исследованию прозрачности щелока в ближней УФ области.

Для исследования спектров поглощения водных растворов зеленого щелока был использован спектрофотометр, аналогичный описанному выше, только в отличие от него, в осветителе вместо галогеновой лампы была взята ДДС-30, как источник сплошного УФ излучения в диапазоне 186–360 нм.

На рис. 6 приведены результаты измерения спектров пропускания растворов зеленого щелока, с концентрациями от 29% до 0,2% по шкале Brix.

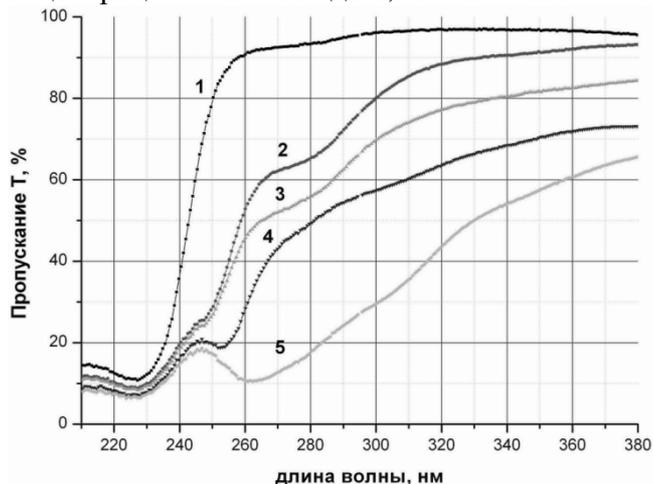


Рис. 6. Спектры пропускания водных растворов зеленых щелоков с концентрациями, Brix: кривая 1 – 0,2%; кривая 2 – 9%; кривая 3 – 12%; кривая 4 – 21%; кривая 5 – 28,8%

Предполагается провести сопоставительный анализ в рамках общей теории дисперсии данных по коротковолновому поглощению и показателю преломления в видимом диапазоне длин волн, применив дисперсионное соотношение Крамерса–Кронига.

Результаты данных измерений могут быть применены при калибровке промышленных рефрактометров, установленных на линии каустизации зеленого щелока для контроля содержания активной щелочи в растворе на этапах от растворения плава слабым белым щелоком, до самого каустизатора и осветлителя белого щелока. Кроме того, предполагается возможным использование упомянутых выше средств ультрафиолетовой спектроскопии для контроля над процессом утилизации слабых растворов черных и зеленых щелоков, а также отслеживания состояния чистоты используемого промышленного и лабораторного оборудования, ввиду высокой чувствительности данного метода (характерные полосы поглощения наблюдались при концентрациях $k < 0,1\%$, по Brix).

Литература

1. Белов Н.П., Лапшов С.Н., Шерстобитова А.С., Яськов А.Д. Промышленные рефрактометры для контроля черных щелоков в целлюлозно-бумажном производстве // Сб. статей XII международной научно-практической конференции «Фундаментальные и прикладные исследования, разработка и применение высоких технологий в промышленности». – СПб: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. – Т. 2. – С. 315–317.

2. Лапшов С.Н., Акмаров К.А., Артемьев В.В., Белов Н.П., Майоров Е.Е., Патяев А.Ю., Смирнов А.В., Шерстобитова А.С., Шишова К.А., Яськов А.Д. Промышленные рефрактометры и их применение для контроля химических производств // Приборы. – 2012. – № 4 (142). – С. 1–8.
3. Лапшов С.Н., Белов Н.П., Майоров Е.Е., Шерстобитова А.С., Яськов А.Д. Применение рефрактометрических технологий для контроля зеленых щелоков в производстве сульфатной целлюлозы // Сб. статей XIII международной научно-практической конференции «Фундаментальные и прикладные исследования, разработка и применение высоких технологий в промышленности и экономике». – СПб: Изд-во Политехнического ун-та. – 2012. – Т. 1. – С. 275–276.
4. Лапшов С.Н., Белов Н.П., Майоров Е.Е., Шерстобитова А.С., Яськов А.Д. Оптические свойства растворов черных щелоков и рефрактометрические средства контроля концентрации сухого остатка в сульфатном производстве целлюлозы // Журнал прикладной спектроскопии. – 2012. – Т. 79. – № 3. – С. 514–516.

УДК 535.371, 537.9

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК БЛИЖНЕГО ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА

А.П. Литвин

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор А.В. Баранов

Исследованы параметры люминесценции растворов квантовых точек сульфида свинца с переходами в ближней инфракрасной области спектра: квантовый выход, времена жизни, положение полосы люминесценции от размера нанокристалла. Обнаружена аномальная зависимость времени жизни от частоты перехода. Для объяснения экспериментальных данных предложена трехуровневая модель с эффективно люминесцирующим энергетическим уровнем внутри запрещенной зоны. Рассмотрен метод создания плотноупакованных ансамблей квантовых точек и их оптические характеристики.

Ключевые слова: люминесценция, квантовые точки, ближний инфракрасный диапазон, времена жизни люминесценции.

Введение

В последнее десятилетие одним из наиболее перспективных материалов для ближнего инфракрасного (ИК) диапазона становятся квантовые точки (КТ) узкозонных полупроводников, такие как КТ сульфида свинца (PbS). Уже сегодня они находят широкое применение в телекоммуникационных системах, биомедицинских исследованиях и солнечной энергетике. КТ PbS характеризуются большим радиусом Бора и диэлектрической проницаемостью, а также малыми и равными эффективными массами электронов и дырок, что позволяет исследовать режим сильного квантового конфайнмента уже при относительно больших размерах нанокристаллов.

Одной из проблем, связанной с изучением КТ PbS, является то, что даже с учетом эффекта диэлектрического экранирования времена жизни люминесценции в КТ PbS не должны превышать ~ 250 нс. В то же время рядом исследовательских групп зарегистрированы необычно большие, вплоть до ~ 2 мкс, времена жизни. Для объяснения этого эффекта предлагалась модель долгоживущего энергетического уровня ниже запрещенной зоны [1], на существование которого также указывают эксперименты по наведенному поглощению и значительный стоксов сдвиг [2]. Исследования, посвященные КТ PbS, ограничивались изучением свойств нанокристаллов диаметром не более нескольких нанометров, пик люминесценции которых находится в диапазоне 0,8–1,2 мкм. Однако для установления общих

закономерностей физических процессов необходимо исследовать КТ PbS в широком спектральном диапазоне.

Системы плотноупакованных нанокристаллов также представляют интерес как с точки зрения изучения фундаментальных процессов взаимодействия между отдельными объектами (например, безызлучательного переноса энергии фотовозбуждения [2, 3]), так и с точки зрения использования таких систем для создания нового поколения фотовольтаических устройств [4], приемников и источников оптического излучения. Эффективность использования КТ PbS при создании подобных устройств была показана в работах [5–7]. Однако для дальнейшего развития этого направления необходима как детальная информация о процессах энергетической релаксации, так и разработка новых методик создания плотноупакованных систем. Используемые сегодня техники либо не обеспечивают требуемой однородности и качества получаемой пленки (drop casting, [2]), либо требуют проведения сложных физико-химических процедур (spin casting [8], Langmuir-Blodgett films [9], layer-by-layer electrostatic assembly [3, 10]).

Экспериментальная часть

Для изготовления нанокристаллов КТ PbS диаметром 2,5–9 нм был применен высокотемпературный органометаллический синтез. Характеризация образцов проводилась методами абсорбционной спектроскопии (спектрофотометр Shimadzu UV-3600), рентгенофазового анализа (Ultima IV, Rigaku) и электронной микроскопии (Merlin, Zeiss).

Для проведения спектрофлуориметрических измерений был использован оригинальный экспериментальный комплекс для получения спектров люминесценции в ближнем ИК-диапазоне [11], построенный на основе монохроматора Acton SP-2558, твердотельного лазера с длиной волны 532 нм, охлаждаемого до -20°C InGaAs фотодиода фирмы Hamamatsu расширенного (G5852-21, 0,9–2,1 мкм) спектрального диапазона. Для получения истинных спектров люминесценции была проведена прецизионная калибровка экспериментального комплекса [12].

Для измерений времен затухания люминесценции была создана оригинальная установка на основе пикосекундного импульсного лазера (PicoQuant LDH-P-C-640B, 100 пс, 0,4 нДж) скоростного InGaAs фотодиода (Femto® HCA-S-200M-IN) и осциллографа (Tektronix TDS-2002), позволяющего регистрировать времена затухания в диапазоне 20 нс–10 мкс на длинах волн 800–1700 нм [13]. В среде программирования LabView разработана программа, позволяющая проводить процедуру дополнительного накопления сигналов вплоть до 10^6 измерений.

Результаты и обсуждение

Исследование растворов КТ PbS. Образцы были приготовлены в виде растворов в тетрахлорметане. Было установлено соответствие между размерами нанокристаллов и положением полос поглощения и люминесценции, которые для КТ PbS диаметром 2,5–9 нм лежат в области 0,7–1,9 мкм, охватывая часть видимого и практически весь ближний ИК-диапазон спектра. Репрезентативная выборка спектров поглощения и люминесценции образцов КТ PbS разного размера представлена на рис. 1, а. Для ряда образцов были проведены измерения относительного квантового выхода, который составил $\sim 25\%$ и практически не зависел от размера КТ. Кроме того, для всех образцов определялась величина стоксового сдвига. Было замечено, что наибольшей величиной стоксового сдвига характеризуются нанокристаллы наименьшего размера, в то время

как для нанокристаллов большего размера стоксов сдвиг невелик. Размерная зависимость величины стоксового сдвига представлена на рис. 1, б.

Кривые затухания люминесценции описывались одноэкспоненциальной зависимостью с постоянной времени 0,25–2,7 мкс в зависимости от размера КТ. Зарегистрированные времена жизни на порядок превышают предсказываемые теорией. Кроме того, наблюдается аномальная зависимость уменьшения времени жизни люминесценции с увеличением размера КТ (увеличением длины волны соответствующего энергетического перехода), которая представлена на рис. 1, б. Представленные размерные зависимости свидетельствуют о существовании некоторого энергетического уровня, располагающегося внутри запрещенной зоны (below-gap state), который может эффективно люминесцировать. Положение этого уровня находится в зависимости от величины энергии конфайнмента и, соответственно, размера КТ.

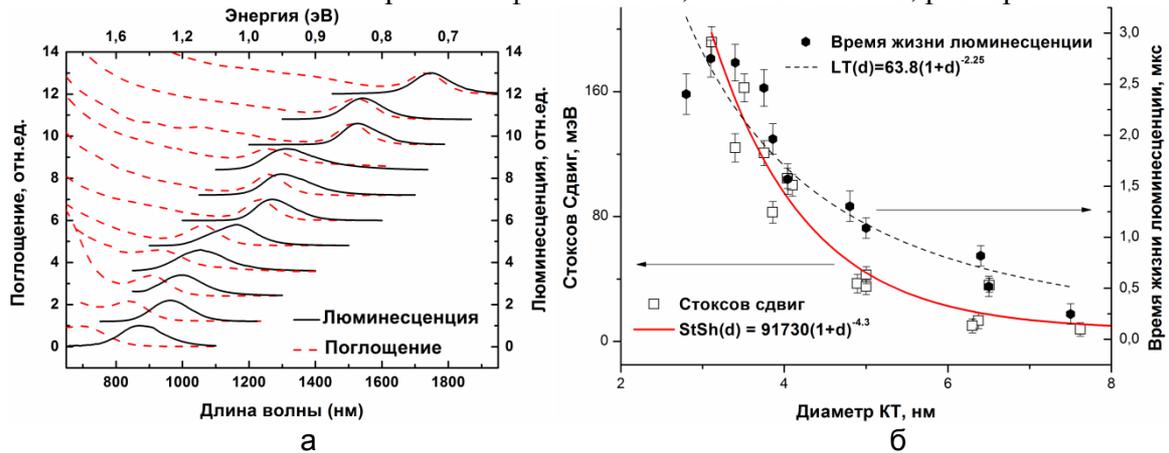


Рис. 1. Спектры поглощения и люминесценции образцов КТ PbS разного размера (а); размерные зависимости и их аппроксимации стоксового сдвига (пустые квадраты, сплошная линия) и времен жизни люминесценции (заполненные круги, прерывистая линия) (б)

Моделирование процессов люминесценции растворов КТ PbS. Для объяснения наблюдаемых экспериментально результатов рассмотрим модель трехуровневой системы, в которой излучательная рекомбинация может происходить с уровней S_1 и S_2 . Собственное время жизни уровня S_1 предполагается соответствующим расчетному для фундаментального перехода, уровня S_2 – на порядок больше, что связано с регистрацией микросекундных времен жизни люминесценции для КТ малого размера. Уровни S_1 и S_2 связаны скоростями безызлучательных переходов k_{12} и k_{21} . Поскольку измерения проводились при комнатной температуре, следует учитывать переходы, как с понижением, так и с повышением энергии. Тогда отношение эффективностей люминесценции с уровней S_1 и S_2 принимает следующий вид [14]:

$$\frac{\phi_{S1}}{\phi_{S2}} = \frac{k_{10}}{k_{12}} + A \cdot \exp\left(-\frac{dE}{kT}\right) \cdot \frac{k_{10} \cdot (2k_{12} + k_{10})}{k_{20} \cdot k_{12} \cdot (k_{10} + k_{12})},$$

где $\phi_{S1,2}$ – эффективность люминесценции с уровней S_1 и S_2 соответственно; k_{10} и k_{20} – скорости излучательной рекомбинации с уровней S_1 и S_2 соответственно; A – константа; dE – величина энергетического зазора; k – постоянная Больцмана; T – температура в Кельвинах. С учетом данных о стоксовом сдвиге можно построить зависимость эффективностей люминесценции с двух энергетических уровней от размера нанокристалла (рис. 2, а). Как видно, для КТ малого размера будет превалировать люминесценция с нижнего энергетического состояния, для КТ большого размера – с верхнего.

Измерение времен затухания люминесценции проводилось при комнатной температуре и с использованием нерезонансного возбуждения, поэтому возможно описание кинетических процессов на основе скоростных уравнений для населенностей, которые для данной системы могут быть представлены в виде:

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = -k_1 \cdot N_1 + k_{21} \cdot N_2 \\ \frac{dN_2}{dt} = k_{12} \cdot N_1 - k_2 \cdot N_2 \end{cases},$$

причем $k_1 = k_{10} + k_{12}$, $k_2 = k_{20} + k_{21}$.

Система имеет точное решение:

$$N_{1,2}(t) = N_{1,2}(t_0) \cdot \exp(s_{1,2}t) + N_{2,1}(t_0) \frac{k_2 - k_1 \pm \sqrt{(k_1 - k_2)^2 + 4k_{12}k_{21}}}{2k_{12}} \cdot \exp(s_{2,1}t),$$

где $N_{1,2}(t_0)$ – населенность энергетических уровней S_1 и S_2 в начальный момент времени. Для каждого уровня наблюдается биэкспоненциальная зависимость распада населенности, однако скорости совпадают, и закон затухания фотолюминесценции может быть представлен как:

$$PL(t) = A_1 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + A_2 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right),$$

$$\tau_{1,2} = 2 \cdot \left[k_1 + k_2 \pm \sqrt{(k_1 - k_2)^2 + 4k_{12}k_{21}} \right]^{-1}.$$

Для того чтобы выразить собственные времена жизни для уровней S_1 и S_2 используем «Золотое правило» Ферми и учтем также эффект диэлектрического экранирования:

$$k_{10} = \tau_0(S_1)^{-1} = \frac{2e^2 \sqrt{\epsilon_1} \omega}{3mc^3 \hbar} \cdot \frac{2P^2}{m} \cdot \left(\frac{3\epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1} \right)^{-2},$$

$$k_{20} = \tau_0(S_2)^{-1} = C \cdot \frac{2e^2 \sqrt{\epsilon_1} \frac{E - dE}{\hbar}}{3mc^3 \hbar} \cdot \frac{2P^2}{m} \cdot \left(\frac{3\epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1} \right)^{-2},$$

где e и m – заряд и масса электрона; ϵ_1 и ϵ_2 – диэлектрические проницаемости PbS (17,2) и CCl_4 (2,2); ω – частота фундаментального перехода; c – скорость света; \hbar – постоянная Планка; $\frac{E - dE}{\hbar}$ соответствует частоте перехода с уровня S_2 ; параметр $\frac{2P^2}{m}$ равен 3 эВ для PbS; C – константа. Время компоненты τ_1 оказывается малым и может быть не зарегистрировано в эксперименте, в то время как компонента τ_2 меняется в широких пределах и хорошо описывает экспериментальные результаты (рис. 2, б).

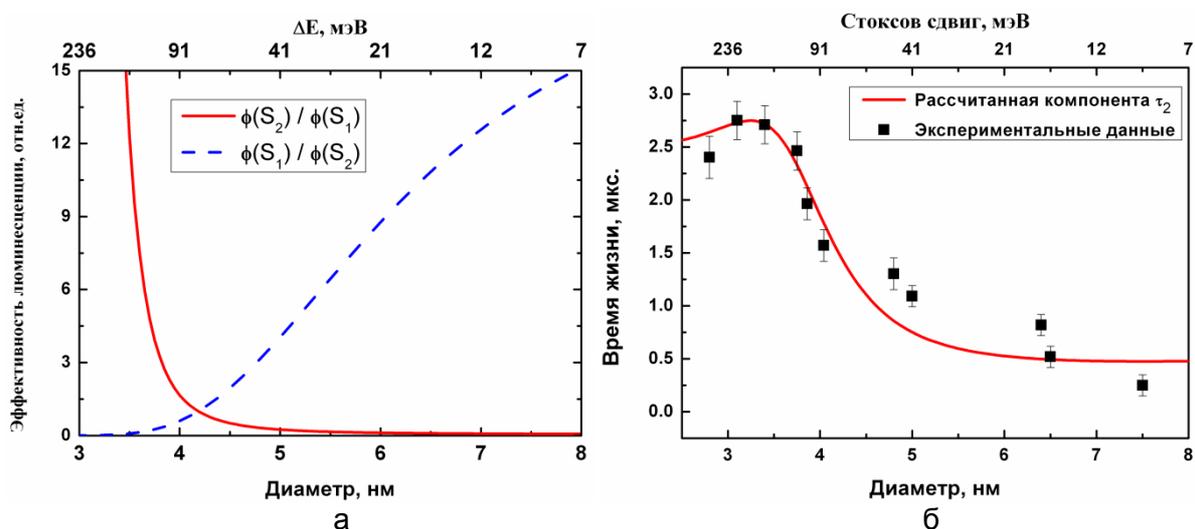


Рис. 2. Отношения эффективностей люминесценции с уровнями S_1 и S_2 (а); сравнение экспериментальных данных и рассчитанной компоненты τ_2 (б)

При слишком большом энергетическом зазоре между уровнями (КТ наименьшего диаметра) трансфер электронов обратно на уровень S_1 с уровня S_2 практически не имеет место, поэтому время жизни τ_2 определяется в основном естественной зависимостью от частоты перехода (кривые совпадают). Затем, при сокращении энергетического зазора, термическая активация носителей становится более вероятной, и появляется дополнительный канал для снижения населенности уровня S_2 , что приводит к перепутыванию двух этих энергетических состояний, биэкспоненциальному распаду и плавному уменьшению времени жизни τ_2 . Таким образом, аномальная размерная зависимость времен жизни люминесценции связана с возможностью переходов, как с понижением, так и повышением энергии при комнатной температуре. Возможным объяснением природы такой системы в КТ является существование поверхностных состояний и излучательная рекомбинация с их участием. Как известно из теории полупроводников, неспаренные химические связи атомов, находящихся на поверхности, могут приводить к возникновению поверхностных состояний Шокли, могут образовывать дискретные или квазинепрерывные энергетические уровни в запрещенной зоне. В КТ доля атомов, связанных с поверхностью, становится существенной и играет все большую роль с уменьшением размера КТ.

Исследование плотноупакованных КТ PbS. Для создания образцов плотноупакованных КТ с высокой степенью однородности предложено использовать пористую матрицу, пропитанную раствором КТ необходимых размеров и высушенную в нейтральной атмосфере. В качестве тонкослойной пористой матрицы была использована широкопористая фильтровальная бумага марки Filtrak 88 толщиной 150 мкм. Полоска фильтровальной бумаги погружалась в 2 мл раствора требуемой концентрации и сушилась.

Оказалось, что спектры поглощения внедренных КТ можно получить с помощью вычитания спектра поглощения чистой матрицы из спектра поглощения образцов. При этом обнаружено, что оптические параметры плотноупакованной системы КТ в матрице обладают хорошей воспроизводимостью от образца к образцу, спектры поглощения и люминесценции КТ, полученные от разных мест образца, не отличаются. Исследования оптических параметров образцов матриц показали, что поглощение и люминесценция образцов фильтровальной бумаги с внедренными в них КТ прямо пропорциональны концентрации КТ в исходном растворе (рис. 3, а). Отсюда следует, что концентрация КТ в объеме матрицы пропорциональна их концентрации в исходном растворе, что делает возможным получать плотноупакованные системы с

контролируемым количеством КТ и, например, матрицы с внедренными смесями КТ разного размера с известным молярным соотношением.

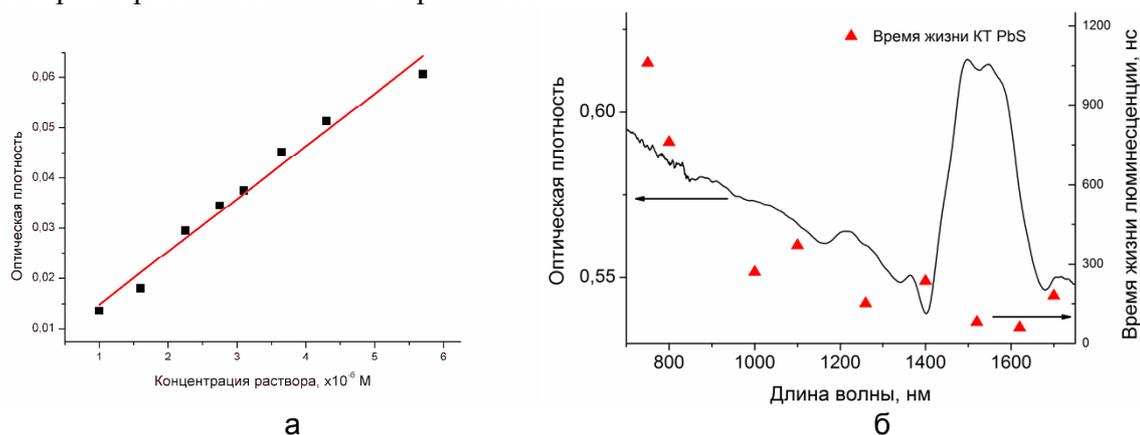


Рис. 3. Зависимость оптической плотности образцов плотноупакованных КТ в фильтровальной бумаге от концентрации исходного раствора (а); спектр поглощения фильтровальной бумаги (сплошная кривая) и измеренные времена жизни образцов КТ PbS в ней (треугольники) (б)

Для КТ PbS диаметром 2,5–7,5 нм проведены измерения времен жизни люминесценции. Спектр поглощения фильтровальной бумаги и измеренные времена жизни люминесценции представлены на рис. 3, б. Кривые затухания люминесценции описывались одноэкспоненциальной и биэкспоненциальной зависимостями. Результаты показывают, что времена жизни напрямую зависят от размера нанокристаллов. При этом зависимость качественно аналогична таковой для растворов КТ PbS. Времена жизни в матрице оказываются существенно меньше, что вполне ожидаемо при существовании эффективных механизмов переноса энергии в плотноупакованной системе, как между самими КТ, так и между КТ и окружением [15]. Наименьшие времена жизни люминесценции были зарегистрированы для КТ размером 6,4 и 6,9 нм (80 и 60 нс соответственно). Значительное сокращение времен жизни люминесценции для этих КТ, средних из выборки по размерам, может свидетельствовать о существовании переноса энергии на колебательные моды матрицы, поскольку оптические переходы в этих КТ лежат как раз в области поглощения фильтровальной бумаги. Кривые затухания для этих КТ лучше описывались биэкспоненциальной зависимостью. Биэкспоненциальное разложение кривой затухания также требовалось для КТ наименьшего размера, что может быть свидетельством процессов термической активации электронов на вышележащий энергетический уровень, как описано для растворов КТ PbS.

Заключение

Исследованы параметры люминесценции растворов квантовых точек сульфида свинца в широком спектральном диапазоне (0,7–2 мкм). Показано существование эффективно люминесцирующего энергетического уровня внутри запрещенной зоны. Проведено моделирование процессов люминесценции, результаты которого хорошо согласуются с экспериментальными данными. Предложен способ создания однородных плотноупакованных ансамблей квантовых точек и исследованы их оптические характеристики.

Литература

1. Sargent E.H. Infrared quantum dots // *Adv. Mater.* – 2005. – V. 17. – № 5. – P. 515–522.

2. Clark S.W., Harbold J.M., Wise F.W. Resonant energy transfer in PbS quantum dots // *J. Phys. Chem. C*. – 2007. – V. 111. – P. 7302–7305.
3. Lunz M., Bradley L., Chen W.Y., Gerard V.A., Byrne S.J., Gun'ko Y.K., Lesnyak V., Gaponik N. Influence of quantum dots concentration on Forster resonant energy transfer in monodispersed nanocrystal quantum dot monolayers // *Phys. Rev. B*. – 2010. – V. 81. – P. 205316.
4. Rogach A.L., Klar T.A., Lupton J.M., Meijerink A., Feldman J. Energy transfer with semiconductor nanocrystals // *J. Mater. Chem.* – 2009. – V. 19. – P. 1208–1221.
5. Kramer I.J., Pattantyus-Abraham A.G., Barkhouse A.R. Advances in colloidal quantum dot solar cells: The depleted-heterojunction device // *Thin solid films*. – 2011. – V. 17. – № 519. – P. 7351–7355.
6. Emin S., Singh S.P., Han L. Colloidal quantum dot solar cells // *Solar Energy*. – 2011. – V. 85. – P. 1264–1282.
7. Nozik A.J. Quantum dot solar cells // *Physica E*. – 2002. – V. 14. – P. 115–120.
8. Rinnerbauer V., Egelhaaf H.J., Hingerl K. Energy transfer in closepacked PbS nanocrystal films // *Phys. Rev. B*. – 2008. – V. 77. – P. 085322.
9. Justo Y., Moreels I., Lambert K., Hens Z. Langmuir–Blodgett monolayers of colloidal lead chalcogenide quantum dots: morphology and photoluminescence // *Nanotechnology*. – 2010. – V. 21. – № 29. – P. 295606.
10. Decher G. Fuzzy nanoassemblies: toward layered polymeric multicomposites // *Science*. – 1997. – V. 277. – P. 1232–1237.
11. Парфенов П.С., Баранов А.В., Вениаминов А.В., Орлова А.О. Комплекс для люминесцентного анализа макро- и микрообразцов в ближнем инфракрасном диапазоне // *Оптический журнал*. – 2011. – Т. 78. – С. 48–52.
12. Парфенов П.С., Литвин А.П., Баранов А.В. и др. Калибровка спектральной чувствительности приборов в ближней инфракрасной области // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2011. – Т. 78. – № 3. – С. 460–466.
13. Парфенов П.С., Литвин А.П., Баранов А.В. и др. Измерение времен затухания люминесценции квантовых точек PbS в ближнем инфракрасном диапазоне // *Оптика и спектроскопия*. – 2012. – Т. 6. – С. 939–944.
14. Литвин А.П., Парфенов П.С., Ушакова Е.В., Баранов А.В. Исследование кинетики люминесценции квантовых точек сульфида свинца // *Научно-технический вестник ИТМО*. – 2012. – № 5 (81). – С. 32–38.
15. Aharoni A., Oron D., Vanin U., Rabani E., Jortner J. Long-range electronic-to-vibrational energy transfer from nanocrystals to their surrounding matrix environment // *PRL*. – 2008. – V. 100. – P. 057404.

КОРРЕКЦИЯ ИСКАЖЕНИЙ ПРОИЗВОЛЬНОЙ КРАТНОСТИ СИСТЕМАТИЧЕСКИХ КОДОВ НА ОСНОВЕ КВАЗИСИНДРОМОВ В АЛГОРИТМИЧЕСКОЙ СРЕДЕ РЕКУРРЕНТНОГО ДЕКОДИРОВАНИЯ В ТЕМПЕ КАНАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ

Е.С. Лихолетова (Яицкая)

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.В. Ушаков

Рассматривается проблема формирования сигналов коррекции искажений систематических помехозащищенных кодов с использованием квазисиндромов ошибок в алгоритмической среде рекуррентного декодирования для случая исправления ошибок кратности, не превышающей значения два, и в темпе канального времени. Положения работы иллюстрируются примером.

Ключевые слова: коррекция искажений, квазисиндром, темп канального времени.

Введение. Постановка задачи

В работе [1] авторы решили проблему формирования сигнала коррекции искажения систематических кодов на основе квазисиндрома в алгоритмической среде рекуррентного декодирования в темпе канального времени для случая однократных ошибок. Ими было показано, что на втором цикле деления принятого из канала связи (КС) искаженного систематического кода, в случае наличия в нем однократной ошибки на позиции, соответствующей искаженному разряду, формируется состояние рекуррентного декодирующего устройства (ДКУ), которое совпадает с матрицей-столбцом \mathbf{V}_d входа этого устройства. Таким образом, если построить «ловушку» этого состояния в виде конъюнкции, реализующей матрицу \mathbf{V}_d , то на выходе конъюнктора будет сформирован сигнал коррекции искажения кода. Очевидно, помимо алгоритмической среды рекуррентного декодирования надо организовать синхронно с процессом деления вывода искаженного кода из регистра хранения. Более того, с тем, чтобы «ловушка» срабатывала на втором цикле деления, схемотехнику процедуры коррекции следует дополнить служебным сигналом, формируемым устройством управления процессом приема кодов из КС и их декодированием.

Встает задача переноса описанных выше результатов на случай исправления многократных ошибок. В работе рассмотрен случай исправление ошибок второй и третьей кратности с последующим переносом полученных результатов на случай произвольной кратности.

Представим процесс систематического помехозащитного преобразования кодов [2–5] векторно-матричным описанием (ВМО), параметризованным дискретным временем k , выраженным в числе тактов длительности Δt в форме системы соотношений:

$$x_c(k+1) = \mathbf{A}x_c(k) + \mathbf{B}_c a(k), k = \overline{1, h}; y(k) = \mathbf{L}a(k); \quad (1)$$

$$\tilde{x}_c(k+1) = \tilde{\mathbf{A}}\tilde{x}_c(k), k = \overline{1, m}; \tilde{x}_c(0) = x_c(h); y(k) = \mathbf{C}\tilde{x}_c(k);$$

$$f(k) = y(k) + \xi(k);$$

$$x_d(k+1) = \mathbf{A}x_d(k) + \mathbf{B}_d f(k), k = \overline{1, n}; \quad (2)$$

$$E = x_d^T(n);$$

где $a(k)$ – (h) -элементарная информационная кодовая последовательность (код); $y(k)$ – (n, h) -элементарная последовательность помехозащищенного кода (ПЗК); $\xi(k)$ – (n) -элементарная последовательность помехи в канальной среде (КС); $f(k)$ – (n) -элементарная последовательность искаженного в КС ПЗК; E – код синдрома искажения (ошибки)

ПЗК; $n-h=m$ – число проверочных разрядов ПЗК; x_c, \tilde{x}_c – вектор состояния кодирующего устройства (КУ) до и после коммутации его структуры, размерности $\dim x_c = \dim \tilde{x}_c = m$; \mathbf{B}_c – $(m \times 1)$ -матрица входа КУ; $\mathbf{L} = [1]$, $\mathbf{C} = [1 \ \mathbf{O}_{1 \times (m-1)}]$ – матрицы выхода КУ; $\tilde{\mathbf{A}}$ – нильпотентная матрица с индексом $\nu=m$; x_d – вектор состояния ДКУ, размерности $\dim x_d = m$; \mathbf{A} – $(m \times m)$ -матрица состояния КУ и ДКУ; \mathbf{B}_d – $(m \times 1)$ -матрица входа ДКУ.

Традиционный способ коррекции на основе синдрома E не является рекуррентным и математически описывается непараметризованным дискретным временем k соотношением $\hat{\xi} = E\mathbf{H}^+$, где $\hat{\xi}$ – код (сигнал) коррекции; \mathbf{H}^+ – $(m \times n)$ -матрица псевдообратная проверочной \mathbf{H} – $(n \times m)$ -матрице ПЗК, удовлетворяющая совместно с образующей $(h \times n)$ -матрицей \mathbf{G} кода характеристическому свойству [4] $\mathbf{GH} = \mathbf{O}$ так, что коррекция принятого из КС кода f , размещенного в приемном регистре хранения, осуществляется в силу соотношения

$$\hat{y} = f + \hat{\xi} = \begin{cases} y, & s \leq s_R; \\ y + \delta, & s > s_R. \end{cases} \quad (3)$$

В соотношении (3) \hat{y} – код, восстановленный в результате процедуры коррекции; s – реальное значение кратности искажений в коде; s_R – значение кратности, заложенное при формировании ПЗК; δ – код невязки переданного ПЗК y и восстановленного \hat{y} .

Ставится задача построения процедуры и устройства коррекции, функционирующих в силу соотношения

$$\hat{y}(k) = f(k) + \hat{\xi}(k), \quad (4)$$

осуществляемые на дополнительном цикле деления в составе декодирующего устройства.

Формирование квазисиндромов как сигналов коррекции искаженных разрядов систематического кода. Проведем анализ коррекции искажений второй кратности систематических кодов.

Утверждение 1. Если начальное состояние декодирующего устройства (2) для случая исправления ошибок второй кратности имеет вид

$$x_d(0) = \mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d, \quad (5)$$

то на тактах $k=n-j+1$ и $k=n-i+1$ при автономной работе декодирующего устройства ($f(k)=0$) имеем

$$x_d(n-j+1) = \mathbf{A}^{n-(j-i)}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d, \quad x_d(n-i+1) = \mathbf{A}^{j-i}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d. \quad \square \quad (6)$$

Доказательство. При $f(k)=0$ описание (2) ДКУ принимает вид

$$x_d(k+1) = \mathbf{A}x_d(k), \quad k = \overline{1, n}, \quad x_d(0). \quad (7)$$

Известно, что явное решение (7) имеет представление

$$x_d(k) = \mathbf{A}^k x_d(0). \quad (8)$$

Подстановка в (8) начального состояния (5) на тактах $k=n-j+1$ и $k=n-i+1$ с учетом того факта, что матрица \mathbf{A} принадлежит показателю [6] n ($\mathbf{A}^n = \mathbf{I}$), дает

$$x_d(k) \Big|_{k=n-j+1} = x_d(n-j+1) = \mathbf{A}^k x_d(0) \Big|_{\substack{k=n-j+1 \\ x_d(0)=\mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d+\mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d}} =$$

$$= \mathbf{A}^{n-j+1}(\mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d) = (\mathbf{A}^n\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^{n-j+i}\mathbf{B}_d) \Big|_{\mathbf{A}^n=\mathbf{I}} = \mathbf{A}^{n-(j-i)}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d.$$

$$x_d(k) \Big|_{k=n-i+1} = x_d(n-i+1) = \mathbf{A}^k x_d(0) \Big|_{x_d(0)=\mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d} \Big|_{k=n-i+1} =$$

$$= \mathbf{A}^{n-i+1}(\mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d) = (\mathbf{A}^{n+(j-i)}\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^n\mathbf{B}_d) \Big|_{\mathbf{A}^n=\mathbf{I}} = \mathbf{A}^{j-i}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d. \quad \blacksquare$$

Примечание 1. Пары $\{(\mathbf{A}^{n-(j-i)}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d), x_d(k = n - j + 1)\}$, $\{(\mathbf{A}^{j-i}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d), x_d(k = n - i + 1)\}$ являются аналитической основой формирования квазисиндромов \tilde{E}_j , \tilde{E}_i искаженных соответственно j -го и i -го разрядов ПЗК ($i = 1, n$; $j = 2, n$; $j > i$).

Утверждение 2. Квазисиндромы \tilde{E}_j , \tilde{E}_i искаженных j -го и i -го разрядов ПЗК являются сигналами его коррекции $\eta_j(k) = \tilde{E}_j(x_d(k))$, $\eta_i(k) = \tilde{E}_i(x_d(k))$, формируемыми с помощью конъюнкторов, реализующими соответственно матрицу-столбец $(\mathbf{A}^{n-(j-i)}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d)$ и матрицу-столбец $(\mathbf{A}^{j-i}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d)$ так, что

$$\tilde{E}_j = \eta_j(k) = \& x_d(k) \Big|_{x_d(k)=(\mathbf{A}^{n-(j-i)}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d)}, \tilde{E}_i = \eta_i(k) = \& x_d(k) \Big|_{x_d(k)=(\mathbf{A}^{j-i}\mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d)}. \quad \square$$

Доказательство. На n -ом такте первого цикла деления при исправлении ошибок второй кратности возникает синдром искажений E , согласно которому имеем $x_d(n) = \mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d + \mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d$. Представим полученное состояние $x_d(n)$ как начальное состояние второго цикла деления вида (5). Тогда, согласно утверждению 1, на тактах $k = n - j + 1$ и $k = n - i + 1$ при автономной работе устройства имеем (6). \blacksquare

Примечание 2. Нетрудно видеть, что $\eta_i(k)$ совпадает с параметризованным дискретным временем сигналом искажения $\xi_i(k)$, содержащим на $k = n - i + 1$ такте единицу, искажающую «младший» i -й разряд кода, так, что $\eta_i(k) = \xi_i(k)$ ($\eta_i(k) = \tilde{\xi}_i(k)$). Аналогично, $\eta_j(k)$ совпадает с сигналом искажения $\xi_j(k)$, содержащим на $k = n - j + 1$ такте единицу, искажающую «старший» j -й разряд кода $\eta_j(k) = \xi_j(k)$ ($\eta_j(k) = \tilde{\xi}_j(k)$). Наличие сигналов коррекции $\eta_j(k)$, $\eta_i(k)$ при исправлении ошибок второй кратности позволяет откорректировать код следующим образом. Для этого синхронно в дополнительном цикле деления необходимо организовать сдвиг в приемном регистре искаженного ПЗК и суммирование разрядов выводимого ПЗК с сигналами коррекции $\eta_j(k) = \tilde{\xi}_j(k)$ и $\eta_i(k) = \tilde{\xi}_i(k)$, чем обеспечивается поразрядное параметризованное дискретным временем суммирование принятого из КС кода f с вектором ошибки ξ , так, что обеспечивается формирование (11), которое размещается или в дополнительном регистре хранения, или в том же, если построить его по принципу кольцевого регистра.

Составим алгоритм формирования квазисиндромов как сигналов коррекции искажений кратности не более двух.

Алгоритм

1. Получить от разработчика КУ:

1.1. параметры помехозащищенного (n, h) -кода, который при кратности s исправляемой ошибки, удовлетворяет требованиям допустимой вероятности ложного приема выбранной категории системы передачи информации;

1.2. матрицу \mathbf{A} состояния КУ (1), а также образующий многочлен $g(x)$ -кода, гарантирующий исправление ошибок кратности s , для проверки правильности формирования матрицы \mathbf{A} из условия $\mathbf{A} = \arg\{\det(\lambda\mathbf{I} + \mathbf{A}) = g(\lambda)\}$.

2. Выбрать матрицу \mathbf{B}_d входа ДКУ (2) [1].

3. Сформировать конъюнктор вида

$$\tilde{E}_0 = \eta_0(k) = \& x_d(k) \Big|_{x_d(k)=\mathbf{B}_d}, \quad (10)$$

реализующий матрицу-столбец \mathbf{B}_d для получения квазисиндрома \tilde{E}_0 однократной ошибки. Если заданная кратность s исправляемой ошибки удовлетворяет равенству $s=1$, то перейти к п. 5 алгоритма.

4. Сформировать $(n-1)$ -конъюнкторов вида

$$\tilde{E}_v = \eta_v(k) = \& x_d(k) \Big|_{x_d(k)=(\mathbf{A}^v \mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d)}, v = \overline{1, n-1}, \quad (11)$$

реализующих матрицу-столбец $(\mathbf{A}^v \mathbf{B}_d + \mathbf{B}_d)$ для получения квазисиндромов \tilde{E}_v двукратных ошибок.

5. Модифицировать полученные в вышеизложенных пунктах алгоритма конъюнкторы за счет введения дополнительного входного сигнала управления процессом формирования квазисиндромов с тем, чтобы сигналы коррекции, сформированные конъюнкторами, не формировались на первом цикле деления.

6. Сформировать устройство коррекции в виде сумматора (4) выходной кодовой последовательности и полученных сигналов с конъюнкторов.

7. Проверить на конкретном примере корректирующую способность квазисиндромов ошибок. ■

Пример

1. Пусть от разработчика КУ получены следующие данные:

1.1. $(n, h) = (15, 7)$ – формат помехозащищенного кода, обладающий способностью исправлять ошибки второй кратности;

1.2. образующий многочлен $g(x) = x^8 + x^7 + x^6 + x^4 + 1$ и матрица \mathbf{A} ДКУ (2)

$$\mathbf{A} = \text{col}\{ [11000000], [10100000], [00010000], [10001000], \\ [00000100], [00000010], [00000001], [10000000] \}^T;$$

$$\det(\lambda\mathbf{I} + \mathbf{A}) = \lambda^8 + \lambda^7 + \lambda^6 + \lambda^4 + 1.$$

2. Выберем матрицу входа $\mathbf{B}_d = [00000001]^T$.

3–6. Сформируем устройство коррекции в виде сумматора по модулю два выводимого на втором цикле деления из регистра хранения искаженного кода $f_r(k)$ и сигналов коррекции $\eta_0(k), \eta_v(k)$, сформированных в форме конъюнкции переменных – элементов вектора состояния ДКУ $[x_{d1}(k), x_{d2}(k), x_{d3}(k), x_{d4}(k), x_{d5}(k), x_{d6}(k), x_{d7}(k), x_{d8}(k)]$ и сигнала управления процессом формирования квазисиндрома $s_t(k)$ согласно (10)–(11). Для краткости записи воспользуемся десятичным представлением двоичных слов из переменных $x_i \in GF(2) = \{0, 1\}, i = \overline{1, m}$, параметризованных дискретным временем k , образующих m -мерные конъюнкции так, что, например, сигнал

$$\begin{aligned} \eta_0(k) &= \bar{x}_{d1}(k)\bar{x}_{d2}(k)\bar{x}_{d3}(k)\bar{x}_{d4}(k)\bar{x}_{d5}(k)\bar{x}_{d6}(k)\bar{x}_{d7}(k)x_{d8}(k)s_t(k) = (1)_2(k)s_t(k); \\ \eta_1(k) &= (3)_2(k)s_t(k); \eta_2(k) = (5)_2(k)s_t(k); \eta_3(k) = (9)_2(k)s_t(k); \eta_4(k) = (17)_2(k)s_t(k); \\ \eta_5(k) &= (33)_2(k)s_t(k); \eta_6(k) = (65)_2(k)s_t(k); \eta_7(k) = (129)_2(k)s_t(k); \\ \eta_8(k) &= (208)_2(k)s_t(k); \eta_9(k) = (114)_2(k)s_t(k); \eta_{10}(k) = (231)_2(k)s_t(k); \\ \eta_{11}(k) &= (28)_2(k)s_t(k); \eta_{12}(k) = (59)_2(k)s_t(k); \eta_{13}(k) = (117)_2(k)s_t(k); \\ \eta_{14}(k) &= (233)_2(k)s_t(k). \end{aligned}$$

Полная схема устройства коррекции приведена на рисунке.

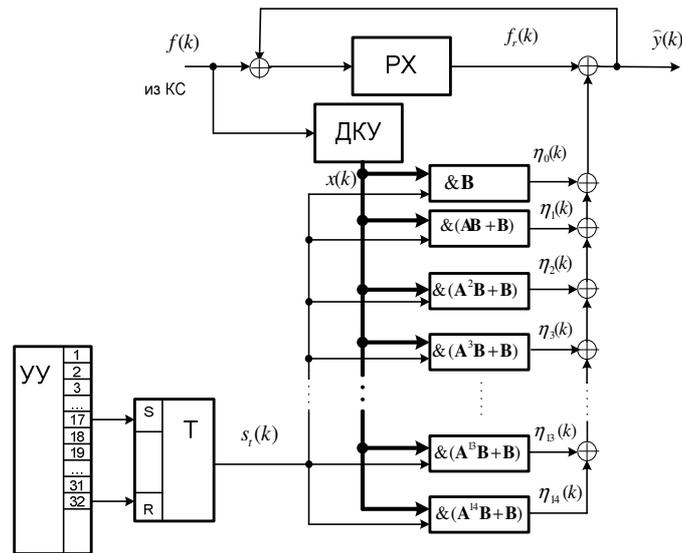


Рисунок. Устройство коррекции искажений ошибок первой и второй кратности кода на основе использования квазисиндромов (PX – регистр хранения с выходным сигналом $f_r(k)$, УУ – устройство управления формированием квазисиндрома с выходным сигналом $s_t(k)$, T – триггер)

7. Проверим полученное устройство коррекции на конкретном примере.

Пусть дан помехонезащищенный информационный код, который определяет входную последовательность КУ $a(k):1001011$.

В силу полной блоковой систематики формируемого ПЗК информационную часть кода можно записать $y = [a|z] = [1001011 y_8 y_7 y_6 y_5 y_4 y_3 y_2 y_1]$.

Матрица входа КУ (1) имеет вид $\mathbf{B}_c^T = \mathbf{K} \{x^m + g(x)\} \Big|_{m=8} = \mathbf{K} \{x^8 + x^8 + x^7 + x^6 + x^4 + 1\} = \mathbf{K} \{x^7 + x^6 + x^4 + 1\} = [11010001]$

[4]. На седьмом такте деления в КУ формируется остаток, который через замкнутый ключ вслед за информационными разрядами будет передан в КС в составе ПЗК, который примет вид $y(k):100101101010111$.

Зададим искажение передаваемого ПЗК в первом и пятом разрядах с помощью помеховой последовательности $\xi(k):000000000010001$.

На вход ДКУ из КС поступает искаженная двоичная кодовая последовательность $f(k):100101101000110$, она же размещается в приемном регистре хранения.

Проведем два цикла деления. В результате первого цикла деления, реализующего процедуру декодирования, получим синдром ошибки $E = (\mathbf{A}^{j-1}\mathbf{B}_d)^T + (\mathbf{A}^{i-1}\mathbf{B}_d)^T \Big|_{i=1}^{j=5} = (\mathbf{A}^4\mathbf{B}_d)^T + (\mathbf{A}^0\mathbf{B}_d)^T = [00010000] + [00000001] = [00010001]$, который является синдромом двукратной ошибки в пятом и первом разрядах.

Второй цикл деления реализует процедуру коррекции, результат которой приведен в таблице.

Таблица. Проверка функционирования устройства коррекции ошибок второй кратности

k	15	16	17	18	19	20	21	22
$f(k)$	0	0	0	0	0	0	0	0
$f_r(k)$	0	1	0	0	1	0	1	1
$x_d(k)$	$(17)_2$	$(34)_2$	$(68)_2$	$(136)_2$	$(193)_2$	$(83)_2$	$(166)_2$	$(157)_2$
$s_i(k)$	0	1	1	1	1	1	1	1
$\eta_0(k) = 1 \parallel$ $\parallel \eta_v(k) = 1, v = \overline{1,14}$	–	–	–	–	–	–	–	–
$\hat{y}(k) = f_r(k) +$ $+ \eta_0(k) + \sum_{v=1}^{14} \eta_v(k)$	0	1	0	0	1	0	1	1
k	23	24	25	26	27	28	29	30
$f(k)$	0	0	0	0	0	0	0	0
$f_r(k)$	0	1	0	0	0	1	1	0
$x_d(k)$	$(235)_2$	$(7)_2$	$(14)_2$	$(28)_2$	$(56)_2$	$(112)_2$	$(224)_2$	$(17)_2$
$s_i(k)$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\eta_0(k) = 1 \parallel$ $\parallel \eta_v(k) = 1, v = \overline{1,14}$	–	–	–	$\eta_{11}(k)$	–	–	–	$\eta_4(k)$
$\hat{y}(k) = f_r(k) +$ $+ \eta_0(k) + \sum_{v=1}^{14} \eta_v(k)$	0	1	0	1	0	1	1	1

Код $\hat{y}(k)$, восстановленный в результате процедуры коррекции, совпадает с ПЗК $y(k)$. □

Заключение

Нетрудно видеть, что предложенная в работе алгоритмическая среда по существу позволяет одним и тем же системологическим приемом осуществлять исправление искажений любой кратности при условии, что эту кратность гарантирует характеристический неприводимый многочлен декодирующего устройства.

Литература

1. Ушаков А.В., Яицкая Е.С. Формирование сигнала коррекции искажений систематических кодов на основе квазисиндрома в алгоритмической среде

- рекуррентного декодирования в темпе канального времени: случай однократной ошибки // Проблемы управления и информатики (в печати).
2. Ушаков А.В., Яицкая Е.С. Анализ структуры пространства состояний линейных двоичных динамических систем на основе их рекуррентного модельного представления // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2011. – № 4 (74). С. 43–49.
 3. Ушаков А.В., Яицкая Е.С. Рекуррентное систематическое помехозащитное преобразование кодов: возможности аппарата линейных двоичных динамических систем // Изв. вузов. Приборостроение. – 2011. – Т. 54. – № 3. – С.17–25.
 4. Гилл А. Линейные последовательностные машины. – М.: Наука, 1974. – 288 с.
 5. Питерсон У., Уэлдон Э. Коды, исправляющие ошибки. – М.: Мир, 1976. – 600 с.
 6. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – 5-е изд. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 565 с.

УДК 681.532.65

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ ЭФФЕКТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ ПРЕЦИЗИОННЫМИ ЭЛЕКТРОПРИВОДАМИ КОМПЛЕКСОВ ВЫСОКОТОЧНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ

С.Ю. Ловлин

Научный руководитель – к.т.н., доцент В.С. Томасов

К числу актуальных проблем современной электромеханики и преобразовательной техники относится проблема создания прецизионных безредукторных электроприводов на базе высокомоментных двигателей и полупроводниковых инверторов напряжения, в частности, для высокоточных оптических комплексов наведения и сопровождения космических объектов. В работе рассмотрены алгоритмы управления прецизионными электроприводами телескопов траекторных измерений, компенсирующие нелинейности исполнительный электрической машины и усилительно-преобразовательного устройства. Решена задача повышения точности позиционирования и сопровождения оптическими телескопами космических объектов за счет применения алгоритмов эффективного управления прецизионными электроприводами опорно-поворотных устройств телескопов траекторных измерений.

Ключевые слова: прецизионный электропривод, зубцовые пульсации, «мертвое время», синхронная машина с постоянными магнитами, трехфазный инвертор.

Введение

В настоящее время наземные оптико-электронные средства (по традиции их часто называют оптическими телескопами) играют первостепенную роль в обнаружении и контроле космических объектов, особенно на больших удалениях. Несомненными и уникальными достоинствами оптических телескопов являются: возможность обнаружения удаленных объектов при солнечном или лазерном подсвете на фоне ночного или сумеречного неба, включая возможность обнаружения в инфракрасном диапазоне длин волн по их собственному тепловому излучению; высокие точности определения угловых координат; возможность получения оптических изображений космических объектов и высокоточных фотометрических измерений их оптического блеска [1, 2].

Для управления угловым положением оптической оси в пространстве оптический телескоп устанавливается в опорно-поворотное устройство (ОПУ), имеющее, как правило, несколько осей вращения. Разработка таких ОПУ и систем управления ими для задач контроля околоземного космического пространства является одной из самых сложных задач современного прецизионного приборостроения. Это связано с тем, что ОПУ и системы электромеханического управления, решающие задачу совмещения оптической оси телескопа и оптического изображения в его фокальной плоскости,

должны обеспечивать уникально высокое качество наведения. Причем такое качество наведения должно обеспечиваться при вращающихся массах от нескольких десятков кг до нескольких десятков тонн при наличии возмущающих неравномерных моментов от сил вязкого и сухого трения, в том числе в подшипниковых узлах, кабельном переходе, переменных (зубцовых) моментов электродвигателя, ветровых и динамических нагрузок, и с учетом конечной жесткости конструкции ОПУ и ее резонансных частот [1, 2].

В этих условиях именно на цифровой следящий электропривод возлагается задача компенсировать все возможные несовершенства конструкции механических узлов телескопа, его кабельного перехода и обеспечить заданную точность при относительно невысоком быстродействии системы, определяемой низкой резонансной частотой осей ОПУ.

Существующие алгоритмы позволяют уменьшить влияние пульсаций момента, вызванных нелинейностями синхронных машин с возбуждением от постоянных магнитов (СМПМ) и усилительно-преобразовательного устройства (УПУ), но не рассматривают их влияние на определение параметров объекта управления, которые зачастую неизвестны. Предлагаемые алгоритмы компенсации нелинейностей, вносимых исполнительной электрической машиной и УПУ, позволяют существенно повысить точность прецизионных электроприводов, так как могут использоваться в совокупности с существующими алгоритмами, удовлетворяющими требованиям, описанным ниже. Разработанные математические модели электроприводов, учитывающие нелинейности, вносимые исполнительной электрической машиной и УПУ, позволяют анализировать их влияние на конечную точность позиционирования и сопровождения прецизионных электроприводов, а также разрабатывать алгоритмы идентификации параметров объекта управления с учетом указанных нелинейностей. Разработанный комплекс программ позволяет упростить процедуру его дальнейшей автоматизации с целью сокращения времени на разработку систем управления, а также их синтеза и настройки.

Алгоритмы эффективного управления прецизионными электроприводами комплексов высокоточных наблюдений

СМПМ предпочтительно используются в прецизионных электроприводах [1–6]. Высокая эффективность СМПМ позволяет использовать полностью закрытые конструкции с поверхностным охлаждением. Использование редкоземельных постоянных магнитов позволяет обеспечить высокую плотность магнитного потока в воздушном зазоре, что упрощает конструкцию двигателей непревзойденной удельной мощности. Благодаря этим качествам электропривода с СМПМ – чрезвычайно быстрые, компактные и надежные.

Постоянной проблемой приводов на базе СМПМ является неравномерность вращающего момента. Результирующий мгновенный момент СМПМ состоит из двух компонент – постоянного, или полезного, момента и пульсирующего момента. Существует два источника пульсаций момента. Первый источник – момент гармоник, вызванный несинусоидальным распределением плотности магнитного потока в воздушном зазоре. Второй – зубцовый момент, появляющийся в результате взаимодействия гармоник магнитной проницаемости статора и соответствующих гармоник магнитодвижущей силы ротора.

Пульсации момента возникают не только из-за особенностей конструкции СМПМ. Наличие пульсаций тока в обмотках статора также приводит к колебаниям электромагнитного момента. Искажение напряжения на выходе инвертора влияет на

фазные токи электрической машины, в результате чего появляются пульсации крутящего момента, и ухудшается точность воспроизведения входного сигнала.

Основная задача – повышение точности позиционирования и сопровождения оптическими телескопами космических объектов за счет применения алгоритмов эффективного управления прецизионными электроприводами ОПУ телескопов траекторных измерений.

Для разработки математических моделей электропривода, учитывающих нелинейности, вносимые исполнительный электрической машиной и УПУ, рассматриваются две модели электропривода с вентильным двигателем (ВД) на базе СМПИМ. В качестве базового алгоритма управления силовыми ключами инвертора выбран алгоритм синусоидальной ШИМ с двухсторонним пилообразным опорным напряжением, реализуемый как в аналоговой, так и в цифровой форме с применением микропроцессорной техники. В таком случае управляющее воздействие γ^* для каждой из фаз двигателя А, В и С выглядит следующим образом:

$$\gamma_a^*(t) = u_0(t) \sin(\varphi(t)), \quad \gamma_b^*(t) = u_0(t) \sin(\varphi(t) + 120^\circ), \quad \gamma_c^*(t) = u_0(t) \sin(\varphi(t) - 120^\circ), \quad (1)$$

где $u_0(t)$ – обобщенное управляющее воздействие для трехфазной системы, принимающее значения из интервала $[-1; 1]$; $\varphi(t)$ – электрический угол поворота двигателя, а относительные длительности открытия верхнего (γ_h) и нижнего (γ_l) ключей для любой из стоек инвертора:

$$\gamma_h = \frac{(1 + \gamma^*)}{2}, \quad \gamma_l = \frac{(1 - \gamma^*)}{2}. \quad (2)$$

Первая модель содержит в себе обобщенную модель ВД на базе СМПИМ:

$$\begin{cases} T_e \frac{d(M(t))}{dt} = \frac{1,5c_e}{R} \left(\frac{U_{DC}}{2} u_0(t) - c_e \Omega(t) \right) - M(t), \\ J_\Sigma \frac{d\Omega(t)}{dt} = M(t) - M_c(t), \\ \frac{d\alpha(t)}{dt} = \Omega(t), \end{cases} \quad (3)$$

где J_Σ – момент инерции эквивалентной одномассовой нагрузки; M_c – момент сопротивления; T_e – электромагнитная постоянная времени; c_e – конструктивная постоянная по ЭДС; R – сопротивление фазы двигателя; M – развиваемый двигателем момент; Ω – угловая скорость двигателя; α – угол поворота двигателя; U_{DC} – напряжение в звене постоянного тока. Данная модель облегчает синтез алгоритмов управления, но не позволяет анализировать нелинейности, вносимые УПУ, по причине отсутствия в модели напряжений на выходе инвертора в явном виде.

Для этой цели предложена вторая модель электропривода, соответствующая СМПИМ с соединением обмоток статора по схеме «звезда» без нулевого провода:

$$\left\{ \begin{array}{l} U_a(t) - U_c(t) = (2i_a(t) + i_b(t))R - (e_a(t) - e_c(t)) + L \frac{d(2i_a(t) + i_b(t))}{dt}, \\ U_b(t) - U_c(t) = (2i_b(t) + i_a(t))R - (e_b(t) - e_c(t)) + L \frac{d(2i_b(t) + i_a(t))}{dt}, \\ M(t) = - \frac{((e_a(t) - e_c(t))i_a(t) + (e_b(t) - e_c(t))i_b(t))}{\Omega(t)}, \\ J_{\Sigma} \frac{d\Omega(t)}{dt} = M(t) - M_c(t), \\ \frac{d\alpha(t)}{dt} = \Omega(t). \end{array} \right. \quad (4)$$

где U_a, U_b, U_c – напряжения на выходе инвертора; e_a, e_b, e_c – противо-ЭДС в каждой фазе двигателя. Эта модель в отличие от обобщенной позволяет анализировать влияние искажений выходных напряжений инвертора на электромагнитный момент ВД и синтезировать регуляторы фазных токов ВД.

С помощью модели (4) был получен момент M_{dead} (рис. 1), позволяющий учитывать в идеальной модели ВД искажения выходного напряжения инвертора, вносимых падением напряжения на силовых ключах инвертора и задержкой на переключение полупроводниковых транзисторов в стойке моста:

$$M_{dead}(t) = \frac{C_e}{R} (\Delta U_a(t) \sin(\varphi(t)) + \Delta U_b(t) \sin(\varphi(t) + 120^\circ) + \Delta U_c(t) \sin(\varphi(t) - 120^\circ)), \quad (5)$$

причем

$$\Delta U_a = \gamma_a^* \cdot \Delta u_{rp} + \tau \cdot (U_{DC} - 2 \cdot \Delta u_{rp}) \cdot \text{sign}(i_a), \quad \Delta U_b = \gamma_b^* \cdot \Delta u_{rp} + \tau \cdot (U_{DC} - 2 \cdot \Delta u_{rp}) \cdot \text{sign}(i_b), \\ \Delta U_c = \gamma_c^* \cdot \Delta u_{rp} + \tau \cdot (U_{DC} - 2 \cdot \Delta u_{rp}) \cdot \text{sign}(i_c),$$

где τ – относительная задержка, вводимая для безопасного переключения ключей инвертора; Δu_{rp} – граничное падение напряжение на силовом ключе, а

$$\text{sign}(i) = \begin{cases} 1, & \text{при } i > 0 \\ -1, & \text{при } i < 0 \end{cases}$$

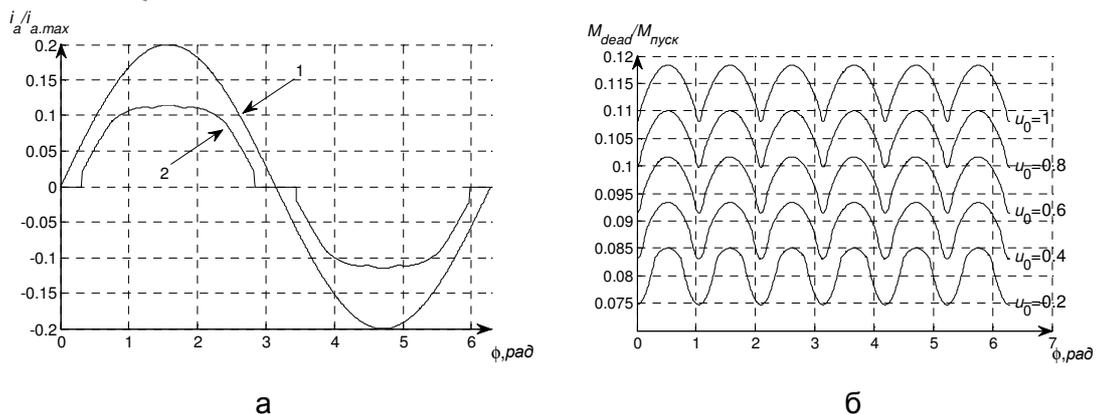


Рис. 1. Зависимости относительного тока фазы А без учета влияния «мертвого времени» (а) и с учетом влияния «мертвого времени» (б) и относительного возмущающего момента M_{dead} в установившемся режиме в зависимости от электрического угла ϕ

Другая нелинейность, не учитываемая в ранее разработанных моделях ВД, – неравномерность электромагнитного момента в зависимости от угла поворота ротора

(рис. 2), вызванная неравномерностью воздушного зазора СМПМ. Наличие пазов на статоре электрической машины приводит к возникновению зубцового момента:

$$M_{cog} = \sum_{i=1,2,3,\dots}^{\infty} M_{sc,i} \frac{\sin(2p\pi i)}{\sin(\frac{2p\pi}{N_s} i)} \sin(2p \cdot i \cdot \alpha - \pi \frac{2p}{N_s} i), \quad (6)$$

где N_s – число пазов на статоре; $2p$ – число полюсов; $M_{sc,i}$ – амплитуда i -ой гармоники зубцового момента, зависящая от формы, ширины и глубины пазов, от соотношения числа пазов и числа полюсов.

Наличие высших гармоник потока возбуждения приводит к возникновению момента высших гармоник:

$$M_{MEH} = c_e (i_a(t) \sum_{n=1}^{\infty} K_n \sin((2n+1)p\alpha(t)) + i_b(t) \sum_{n=1}^{\infty} K_n \sin((2n+1)p\alpha(t) + \frac{2\pi}{3}) + i_c(t) \sum_{n=1}^{\infty} K_n \sin((2n+1)p\alpha(t) - \frac{2\pi}{3})), \quad (7)$$

где K_n – амплитуда n -ой гармоники потока возбуждения относительно 1-ой.

В отличие от нелинейностей УПУ, оценить заранее влияние нелинейностей электрической машины затруднительно. Эти данные в дальнейшем используются для идентификации и последующей компенсации влияния нелинейностей электрической машины.

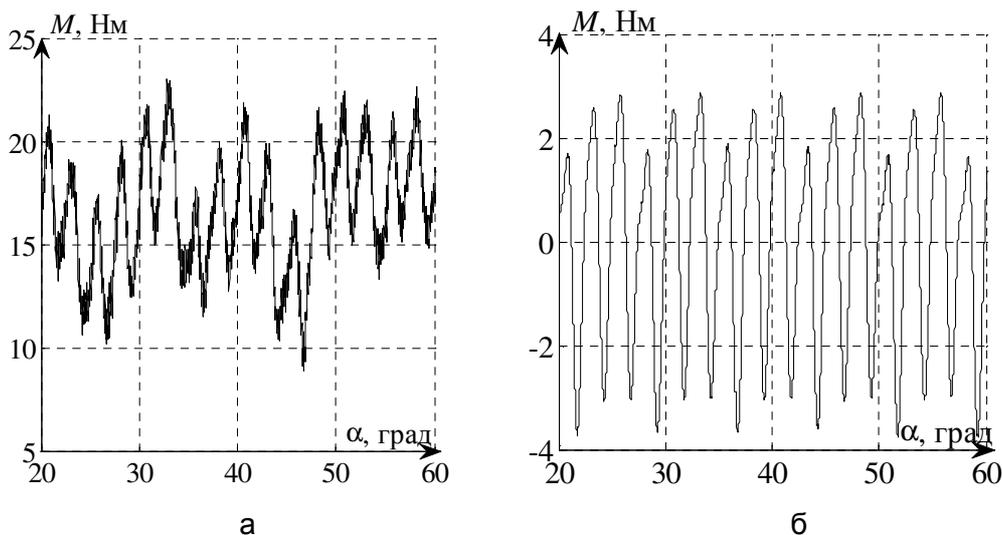


Рис. 2. Момент сопротивления в зависимости от угла поворота α (а) и идентифицированные пульсации момента, обусловленные нелинейностями электрической машины (б)

Решение проблемы искажений выходного напряжения инвертора, вносимых падением напряжения на силовых ключах инвертора и задержкой на переключение полупроводниковых транзисторов в стойке моста программным способом можно разделить на два основных метода. Первым является компенсация, основанная на заранее известной модели возмущения и введении соответствующих поправок для устранения его влияния. Второй метод заключается в построения регуляторов тока или момента, которым уже не требуется точное описание возмущения, но необходимы параметры всей системы в целом для обеспечения стабильной и эффективной работы.

Один из возможных способов компенсации, относящихся к первому методу, в соответствии с которым управляющие сигналы γ_{ak}^* , γ_{bk}^* , γ_{ck}^* для фаз инвертора принимают вид:

$$\begin{aligned}\gamma_{ak}^* &= \gamma_a^* \cdot \frac{2\Delta u_{гр}}{(U_{DC} - 2\Delta u_{гр})} + 2\tau \cdot \text{sign}(i_a), \quad \gamma_{bk}^* = \gamma_b^* \cdot \frac{2\Delta u_{гр}}{(U_{DC} - 2\Delta u_{гр})} + 2\tau \cdot \text{sign}(i_b), \\ \gamma_{ck}^* &= \gamma_c^* \cdot \frac{2\Delta u_{гр}}{(U_{DC} - 2\Delta u_{гр})} + 2\tau \cdot \text{sign}(i_c).\end{aligned}\tag{8}$$

При малых значениях u_0 , когда управляющее воздействие γ^* принимает значения внутри зоны нечувствительности, вышеописанный алгоритм не позволяет скомпенсировать несинусоидальность напряжения, что приводит к существенным пульсациям момента. При значениях управляющего воздействия γ^* меньше удвоенной относительной задержки τ и при малом токе в фазе существуют промежутки времени на периоде коммутации ключей, когда ток не протекает через силовые ключи. В такой ситуации независимо от значения γ^* среднее значение фазного тока остается равным нулю. Это явление получило название «феномена удержания нулевого тока».

Разработан усовершенствованный алгоритм, который на основании анализа среднего значения фазного тока и управляющего воздействия, позволяет устранить «феномен удержания нулевого тока» с сохранением корректной компенсации искажений выходного напряжения инвертора.

Относительная задержка τ складывается из программной и аппаратной задержек. Программная задается самим разработчиком системы управления прецизионным электроприводом, а аппаратная существует в любом интеллектуальном модуле управления силовыми ключами, но величина ее производителями модулей не приводится. В итоге относительная задержка τ заранее неизвестна, поэтому возникает задача идентификации этого параметра для успешной компенсации влияния нелинейностей, вносимых УПУ.

Способы компенсации, относящиеся ко второму методу, лишь ослабляют влияние нелинейностей УПУ, и в то же время позволяют ослаблять влияние и других возмущений. К ним относятся регуляторы момента и тока ВД. Контур момента не позволяет скорректировать форму тока, а только регулирует электромагнитный момент ВД, в результате чего сохраняется искажение синусоидальной формы токов, вызывающее дополнительные потери в обмотках двигателя. Регулятор тока синтезируется на базе модели (4)

$$\begin{aligned}u_{p.ab}[n] &= u_{p.ab}[n-1] + q_{T0}(i_{ab.зад}[n] - i_{ab}[n]) + q_{T1}(i_{ab.зад}[n-1] - i_{ab}[n-1]), \\ u_{p.ba}[n] &= u_{p.ba}[n-1] + q_{T0}(i_{ba.зад}[n] - i_{ba}[n]) + q_{T1}(i_{ba.зад}[n-1] - i_{ba}[n-1]), \\ u_{ab}[n] &= \begin{cases} u_{ab}[n] \text{ при } |u_{p.ab}[n] + \gamma_c^*[n]| < 1, \\ \text{sign}(u_{p.ab}[n] + \gamma_c^*[n]) - \gamma_c^*[n] \text{ при } |u_{p.ab}[n] + \gamma_c^*[n]| \geq 1, \end{cases} \\ u_{ba}[n] &= \begin{cases} u_{ba}[n] \text{ при } |u_{p.ba}[n] + \gamma_c^*[n]| < 1, \\ \text{sign}(u_{p.ba}[n] + \gamma_c^*[n]) - \gamma_c^*[n] \text{ при } |u_{p.ba}[n] + \gamma_c^*[n]| \geq 1, \end{cases}\end{aligned}\tag{9}$$

причем

$$\begin{aligned}i_{ab}(t) &= 2i_a(t) + i_b(t), \quad i_{ba}(t) = 2i_b(t) + i_a(t), \\ q_{T0} &= K_{ПТ} + \frac{T_d \cdot K_{ПТ}}{2K_{ИТ}}, \quad q_{T1} = -\left(K_{ПТ} - \frac{T_d \cdot K_{ПТ}}{2K_{ИТ}} \right), \\ K_{ПТ} &= \frac{2RT_e}{U_{DC}T_T}, \quad K_{ИТ} = \frac{2R}{U_{DC}T_T}.\end{aligned}$$

где $i_{ab.зад}$ и $i_{ba.зад}$ – задающие воздействия на контур тока.

Расчет регулятора контуров тока требует знания параметров объекта управления, поэтому возникает задача их идентификации при наличии нелинейностей усилительно-преобразовательного устройства. Стоит отметить, что предварительное введение алгоритма компенсации существенно упрощает эту процедуру.

В качестве окончательного решения данной задачи предложено объединение контура тока с усовершенствованным алгоритмом компенсации нелинейностей УПУ. Это позволяет сочетать преимущества контура тока и алгоритма компенсации, робастность и возможность ограничения тока в фазах двигателя с полной компенсацией нелинейностей УПУ и упрощением технической диагностики системы (определением параметров объекта управления, возможностью получения верной информации о среднем напряжении в фазах двигателя).

Обязательным условием компенсации зубцовых пульсаций и момента высших гармоник является наличие контура тока в системе управления прецизионного электропривода, позволяющих идентифицировать и компенсировать влияние нелинейности ВД. Для успешной компенсации должно выполняться следующее равенство:

$$M = M^* + M_{MEh} + M_{cog}, \quad (10)$$

причем

$$M = \frac{3}{2} c_e I_m, \quad M^* = \frac{3}{2} c_e (I_m + I_m^*),$$

где M – желаемый момент; I_m – амплитуда токов в фазах двигателя, соответствующая в идеальной модели желаемому моменту; I_m^* – компенсирующая добавка к амплитуде задания по току, имеющая вид:

$$I_m^* = \frac{-\frac{2}{3} c_e^{-1} \sum_{i=1,2,3\dots} M_{sc,i} \frac{\sin(2p\pi i)}{\sin(\frac{2p\pi}{N_s} i)} \sin(2p \cdot i \cdot \alpha - \pi \frac{2p}{N_s} i) - \sum_{n=1}^{\infty} K_n \cos(2n \cdot p \cdot \alpha)}{1 + \sum_{n=1}^{\infty} K_n \cos(2n \cdot p \cdot \alpha)}. \quad (11)$$

Идентификация параметров $M_{sc,i}$ и K_n проводится при замкнутом контуре скорости. Наличие гармонических составляющих ошибки по скорости на частотах, соответствующих частотам момента гармоник и зубцового момента приведет к погрешности идентификации параметров моделей этих моментов, и соответственно к возникновению таких же ошибок после введения компенсации. Понизить ошибку измерения момента и соответственно погрешность компенсации, можно понизив скорость вращения или увеличив полосу пропускания замкнутой системы. Полоса пропускания ограничена резонансными частотами ОПУ. А низкая скорость вращения ротора приводит к увеличению времени эксперимента. При постоянном задании на контур скорости динамическим моментом можно пренебречь, и тогда:

$$\frac{3}{2} c_e I_m = M_{тр} + M_{каб} + M_{дисб} - M_{cog} - M_{MEh}, \quad (12)$$

где $M_{тр}$ – момент трения; $M_{каб}$ – момент кабельного перехода (принимается при постоянной скорости вращения линейным); $M_{дисб}$ – момент дисбаланса оптической оси.

Момент, вызванный наличием высших гармоник потока возбуждения, определяется по результатам полученных графиков токов $I_m(\alpha)$ при движении в разных направлениях:

$$\frac{3}{2} c_e \left(\frac{I_{m1}(\alpha) - I_{m2}(\alpha)}{2} \right) = M_{тр} - M_{MEh}. \quad (13)$$

Для получения более точных результатов и отделения момента гармоник от момента трения данный эксперимент проводится еще несколько раз, но при другом управляющем воздействии:

$$\begin{aligned}\gamma_a^*(t) &= u_0(t) \sin(\varphi(t) + \varphi^*(t)), \quad \gamma_b^*(t) = u_0(t) \sin(\varphi(t) + \varphi^*(t) + 120^\circ), \\ \gamma_c^*(t) &= u_0(t) \sin(\varphi(t) + \varphi^*(t) - 120^\circ).\end{aligned}\tag{14}$$

Тогда (13) принимает вид:

$$\begin{aligned}\frac{3}{2}c_e \cos(\varphi^*) \left(\frac{I_{m1}^*(\alpha) - I_{m2}^*(\alpha)}{2} \right) &= M_{тр} - \\ - \frac{3}{2}c_e \cos(\varphi^*) \left(\frac{I_{m1}^*(\alpha) - I_{m2}^*(\alpha)}{2} \right) \sum_{n=1}^{\infty} K_n \cos(2n\pi\alpha - \varphi^*).\end{aligned}\tag{15}$$

Вычитая из (13) формулу (15), получим:

$$\begin{aligned}\frac{3}{2}c_e \left(\frac{I_{m1}(\alpha) - I_{m2}(\alpha)}{2} - \cos(\varphi^*) \frac{I_{m1}^*(\alpha) - I_{m2}^*(\alpha)}{2} \right) &= -\frac{3}{2}c_e \left(\frac{I_{m1}(\alpha) - I_{m2}(\alpha)}{2} \right) \times \\ \times \sum_{n=1}^{\infty} K_n \cos(2n\pi\alpha) + \frac{3}{2}c_e \cos(\varphi^*) \left(\frac{I_{m1}^*(\alpha) - I_{m2}^*(\alpha)}{2} \right) \sum_{n=1}^{\infty} K_n \cos(2n\pi\alpha - \varphi^*).\end{aligned}\tag{16}$$

Параметры K_n достаточно точно определяются методом наименьших квадратов. Тогда зубцовый момент определяется по результатам полученных графиков токов $I_m(\alpha)$ при движении в разных направлениях:

$$\frac{3}{2}c_e \left(\frac{I_{m1}(\alpha) + I_{m2}(\alpha)}{2} \right) + \frac{M_{MEh1}(\alpha) + M_{MEh2}(\alpha)}{2} = M_{каб} + M_{дисб} - M_{cог}.\tag{17}$$

При принятых допущениях относительно линейности $M_{каб}$ и при несовпадении периода $M_{дисб}$ с периодом гармоник $M_{cог}$, параметры $M_{sc.i}$ достаточно точно определяются методом наименьших квадратов (рис. 2, б).

Данный метод компенсации, в отличие от широко используемого табличного метода, позволяет экономить ресурсы микроконтроллера, компенсировать момент высших гармоник с учетом изменения амплитуды токов I_m в фазах, отдельно определять зубцовый момент и момент, обусловленный высшими гармоническими составляющими потока возбуждения.

Заключение

В работе представлено решение задачи повышения точности позиционирования и сопровождения оптическими телескопами космических объектов за счет применения алгоритмов эффективного управления прецизионными электроприводами опорно-поворотных устройств телескопов траекторных измерений. Рассмотрены математические модели электроприводов, учитывающие нелинейности, вносимые исполнительной электрической машиной и УПУ, позволяющие анализировать их влияние на конечную точность позиционирования и сопровождения прецизионных электроприводов. Разработаны алгоритмы компенсации нелинейностей, вносимых исполнительной электрической машиной и УПУ, позволяющие существенно повысить точность прецизионных электроприводов. Предложен комплекс программ, позволяющий упростить процедуру дальнейшей их автоматизации с целью сокращения времени на разработку систем управления, а также их синтеза и настройки.

Литература

1. Васильев В.Н., Томасов В.С., Шаргородский В.Д., Садовников М.А. Состояние и перспективы развития прецизионных электроприводов комплексов высокоточных наблюдений // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 6. – С. 12–17.
2. Томасов В.С., Толмачев В.А., Дроздов В.Н., Денисов К.М., Гурьянов А.В. Электроприводы высокоточных оптических комплексов контроля космического пространства // Труды VII Международной (XVIII Всероссийской) конференции по автоматизированному электроприводу АЭП-2012. – Иваново, 2012. – С. 213–216.
3. Томасов В.С., Овчинников И.Е., Егоров А.В. Энергоподсистема большого алтайского телескопа траекторных измерений // Известия Тульского государственного университета. – 2010. – Вып. 3. – Ч. 3. – С. 216–222.
4. Балковой А.П., Цаценкин В.К. Прецизионный электропривод с вентильными двигателями. – М.: Издательский дом МЭИ, 2010. – 328 с.
5. Овчинников И. Е. Вентильные электрические двигатели и привод на их основе (малая и средняя мощность) // Курс лекций – СПб: Корона-Принт, 2010. – 336 с.
6. Сабинин Ю.А. Позиционные и следящие электромеханические системы: Учебное пособие. – СПб: Энергоатомиздат, 2001. – 208 с.
7. Шрейнер Р.Т. Математическое моделирование электроприводов переменного тока с полупроводниковыми преобразователями частоты. – Екатеринбург: УРО РАН, 2000. – 654 с.

УДК 535-243

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И МОЛЕКУЛ ХЛОРИНА Е6

И.В. Мартыненко

Научный руководитель – к.т.н., доцент А.О. Орлова

Методами люминесцентной и абсорбционной спектрофотометрии исследованы особенности образования комплексов между полупроводниковыми квантовыми точками и хлорином е6 в составе препарата «Фотодитазин». Показано, что в наблюдаемых комплексах наблюдается сенсibilизированная люминесценция хлорина е6, свидетельствующая о возможности переноса энергии по механизму FRET, изменение спектральной формы хлорина е6, а также неполное тушение люминесценции квантовых точек.

Ключевые слова: квантовые точки, хлорин е6, фотодинамическая терапия.

Введение

Фотофизические свойства тетрапиррольных соединений и комплексов с их участием представляют значительный интерес, как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Это связано с тем, что тетрапиррольные соединения обладают важнейшими качествами, позволяющими использовать их в качестве молекул-фотосенсибилизаторов (ФС) в фотодинамической терапии (ФДТ) – методе лечения онкологических заболеваний, заключающемся в локальной активации оптическим излучением находящегося в патологических тканях ФС, что приводит к каскаду фотохимических реакций с образованием активных форм кислорода (в частности, синглетного кислорода) [1] – ключевого фактора фотодинамического действия, приводящего к селективному уничтожению пораженных тканей. Тетрапиррольные соединения способны эффективно генерировать синглетный кислород и обладают онкотропностью (способностью концентрироваться в зараженных участках ткани), что совместно с высоким коэффициентом молярной экстинкции является основанием их широкого применения в качестве ФС.

В последнее десятилетие активно исследуются комплексы тетрапирролов с коллоидными полупроводниковыми квантовыми точками (КТ) [2]. Полупроводниковые КТ обладают рядом уникальных свойств. Их оптические характеристики зависят от размеров ядра нанокристалла, они имеют протяженный спектр поглощения с высокими значениями экстинкции, высокий квантовый выход люминесценции. Данные свойства позволяют использовать КТ в качестве донора энергии в комплексах с органическими молекулами [3]. В частности, в комплексах с тетрапиррольными соединениями эффективная передача энергии фотовозбуждения по Фёрстеровскому индуктивно-резонансному механизму (FRET) от КТ к молекулам может значительно увеличить эффективность генерации синглетного кислорода по сравнению со свободными тетрапирролами, а широкий спектр поглощения КТ открывает перспективы использования рентгеновского возбуждения ФС.

В представленной работе исследованы фотофизические свойства двух типов комплексов, полученных в результате ковалентного связывания и электростатического взаимодействия, водорастворимых КТ CdSe/ZnS (донор) с молекулами хлорина еб в составе препарата «Фотодитазин» (акцептор). На сегодняшний день препарат «Фотодитазин» широко используется для фотодинамической терапии онкологических, а также ряда других заболеваний [4].

Материалы и методы

Ковалентное связывание хлорина еб с КТ было проведено при помощи молекул-линковщиков: молекул 1-этил-3(3-диметиламинопропил) карбодиимид гидрохлорида (EDC или EDAC), которые связывают между собой карбоксильные и аминогруппы.

Как видно на рис. 1, хлорин еб имеет три карбоксильные группы, для получения аминогрупп на поверхности КТ была проведена специальная солубилизация CdSe/ZnS КТ. КТ были исходно солубилизованы L-цистеином, который замещался на молекулы полиэтиленгликоля ПЭГ-ОН и ПЭГ-NH₂ с соотношением 3:1. Концентрации хлорина и КТ подбирались таким образом, что на одну КТ в растворе приходилось около 30 молекул хлорина ($C_{\text{КТ}} \sim 3,9 \cdot 10^{-7}$ М/л, $C_{\text{Хл}} \sim 1,33 \cdot 10^{-5}$ М/л). Предполагается, что КТ, солубилизованные ПЭГ, не изменяют свои спектральные характеристики.

При создании комплексов на основе электростатического взаимодействия использовались точки большего размера. В данном случае соотношение концентраций КТ и хлорина было примерно 1:5 ($C_{\text{КТ}} \sim 4,8 \cdot 10^{-7}$ М/л, $C_{\text{Хл}} \sim 2,51 \cdot 10^{-6}$ М/л).

Спектры поглощения растворов регистрировались на спектрофотометре UV Probe 3600 (Shimadzu), спектры люминесценции – на спектрофлуориметре Флюорат Панорама"02 (Люмекс). Спектры люминесценции растворов с ковалентным и электростатическим взаимодействием регистрировались при возбуждении длинами волн 500 и 640/650 нм. Для регистрации времен затухания люминесценции образцов использовался сканирующий люминесцентный микроскоп MicroTime 100 (PicoQuant, Germany). Для возбуждения люминесценции образцов использовался полупроводниковый импульсный лазер с частотой следования импульсов 2,5 МГц с длиной волны 405 нм.

Результаты и обсуждение

На рис. 1, а, приведены спектры поглощения и фотолюминесценции комплексов КТ/хлорин еб.

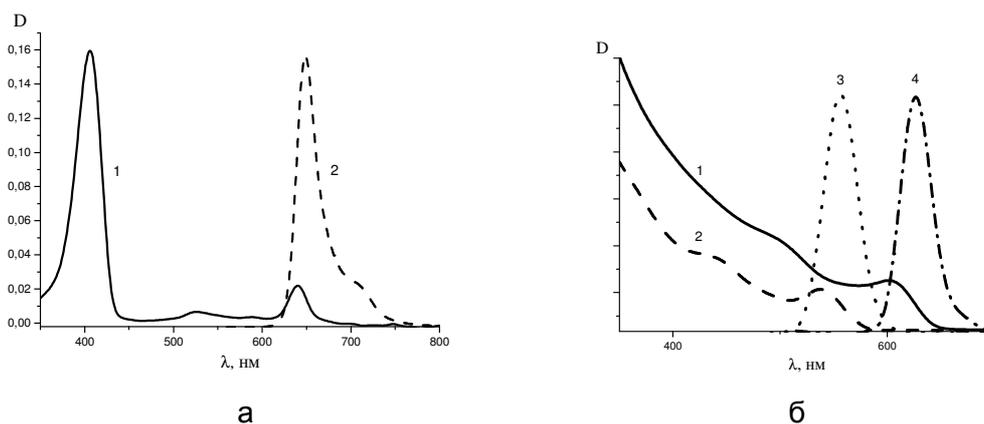


Рис. 1. Спектры хлорина еб в составе препарата «Фотодитазин»: кривая 1 – спектр поглощения ($\epsilon_{652} = 1,75 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ см}^{-1}$), кривая 2 – спектр люминесценции, длина волны возбуждающего света 420 нм (а); спектры поглощения и люминесценции квантовых точек, используемые для создания комплексов: кривые 1, 4 – с электростатическим типом связывания (КТ диаметром 5 нм, $\epsilon_{610} = 4,1 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ см}^{-1}$); кривые 2, 3 – с ковалентным связыванием (КТ диаметром 3 нм, $\epsilon_{505} = 5,92 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ см}^{-1}$) (б)

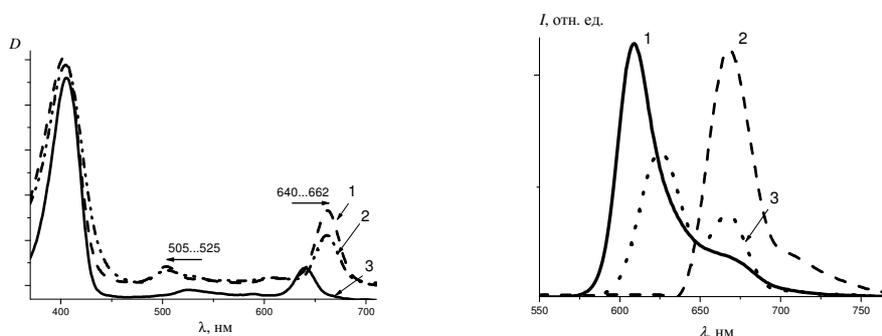


Рис. 2. Спектры поглощения и фотолюминесценции хлорина еб в комплексах с электростатическим (кривая 1) ($C_{КТ}:C_{Хл} \sim 1:4$, длина волны возбуждающего света 470 нм) и ковалентным (кривая 2) типом связывания ($C_{КТ}:C_{Хл} \sim 1:30$, длина волны возбуждающего света 500 нм), спектры поглощения и люминесценции препарата «Фотодитазин» (кривая 3)

При исследовании образования комплексов в растворах с двумя типами связывания были обнаружены изменения спектральных форм компонентов. По рис. 1, 2 видно, что спектры поглощения смесей не являются аддитивной суммой поглощения компонентов смеси, таким образом, можно сделать вывод об образовании комплексов. При анализе спектров поглощения хлорина еб в смеси следует отметить, что хлорин в комплексах с разным типом связывания имеет похожую спектральную форму, которая, впрочем, значительно отличается от спектральной формы свободного хлорина. На графике (рис. 2) заметно изменение формы и сдвиг $Q_x(0,0)$ полосы хлорина в комплексах в длинноволновую область спектра (с 640 на 662 нм), а кривая 4 Q -полосы (рис. 1, б) в коротковолновую область на ~ 20 нм по сравнению со свободной формой. Также наблюдается изменение полуширины полосы $S_{ор}$.

Известно, что вследствие гидролиза в водных растворах хлорина еб происходит протонирование карбоксильных групп, приводящее к агрегации молекул [5], что приводит к снижению квантового выхода люминесценции [6]. Так как препараты фотосенсибилизаторов на основе хлорина еб имеют водную основу, спектры поглощения препарата «Фотодитазин» на рис. 2 соответствуют агрегированной форме хлорина. Спектральная форма хлорина еб в комплексах соответствует дезагрегированной форме хлорина еб из работы [7], в которой была получена подобная спектральная форма при дезагрегации хлорина еб под влиянием избытка

диметилсульфоксида (ДМСО). Таким образом, можно сделать вывод, что участие КТ при связывании в комплекс с периферическими заряженными группами хлорина еб может приводить к дезагрегации молекул хлорина еб и изменению спектральной формы тетрапиррольной молекулы.

Спектр люминесценции, связанного в комплекс с КТ хлорина, изменился: произошел сдвиг полосы люминесценции в длинноволновую сторону, что коррелирует с длинноволновым сдвигом $Q_x(0,0)$ полосы поглощения хлорина еб (рис. 2, кривые 1 и 2). В случае ковалентного связывания люминесценция КТ оказалась полностью потушена, но в случае электростатического взаимодействия, даже при $n(C_{кт}:C_{хл}) > 50$, наблюдалась остаточная (30%) люминесценция КТ.

При этом наблюдается 30% уменьшение квантового выхода люминесценции хлорина по сравнению с несвязанной формой. В обоих типах комплексов наблюдалась сенсibilizированная люминесценция хлорина еб. Это свидетельствует об эффективном внутрикомплексном переносе энергии от КТ к молекулам. Было обнаружено, что экспериментальная эффективность переноса энергии в комплексах с ковалентным типом связывания равна 8%, что составляет 30% от теоретического значения эффективности FRET. В тоже время для комплексов, полученных в результате электростатического взаимодействия КТ и хлорина еб, экспериментальная эффективность переноса энергии оказалась в два раза ниже – 4%. Низкая экспериментальная эффективность внутрикомплексного переноса энергии в обоих случаях связана с образованием конкурентного канала безызлучательного переноса энергии. Это приводит к снижению разгорания люминесценции хлорина на 30% от максимально возможной для ковалентного связывания и 90%, в случае электростатического взаимодействия.

Заключение

В данном исследовании была продемонстрирована возможность создания комплексов КТ/органическая молекула хлорина еб в результате электростатического взаимодействия, а также ковалентного связывания.

Литература

1. Maria C. DeRosa, Robert J. Crutchley. Photosensitized singlet oxygen and its applications // *Coordination Chemistry Reviews*. – 2002. – V. 233–234. – P. 351–371.
2. Maslov V., Orlova A., Baranov A., Combination Therapy: Complexing of QDs with tetrapyrrols and other dyes // *Photosensitisers in medicine Environment and Security*. – Springer-Verlag. – 2011. – 1st Edition. – 699 p.
3. Федоров А.В., Баранов А.В. Оптика квантовых точек // *Оптика наноструктур*. – СПб: Недра, 2005. – С. 181–274.
4. А61P35/00 RU. Способ получения водорастворимых хлоринов / Пономарев Г.В.; Решетников А.В.; Гусева-Донская Т.Н.; Швец В.И.; Баум Р.Ф.; Ашмаров В.В. (Закрытое акционерное общество «Вета»). – № 98100545/04; Заявл. 22.01.1998 // *Изобретения (Заявки и патенты)*.
5. Cunderlikova V., Gangeskar L., Moan J., Photochem J. Acid-base properties of chlorin еб: Relation to cellular uptake // *J Photochem Photobiol B-Biol*. – 1999. – V. 53. – № 1–3. – P. 81–90.
6. Пархоц М.В., Галиевский В.А., Сташевский А.С., Трухачева Т.В., Джагаров Б.М. // *Опт. и спектр*. – 2009. – Т. 107. – № 6. – С. 1026–1032.
7. Пархоц М., Галиевский В., Жарникова Е., Кнюкшто В., Лепешкевич С., Сташевский А., Трухачева Т., Джагаров Б. Динамика сенсibilizированного

образования синглетного кислорода и фотофизические характеристики хлорина еб в составе мази «Фотолон» // Журнал прикладной спектроскопии. – 2011. – Т. 78. – № 2. – С. 300–306.

УДК 537.86, 537.87

СУПЕРЛИНЗЫ НА ОСНОВЕ ПРЕДЕЛЬНО АНИЗОТРОПНЫХ МЕТАМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНЫХ ТОМОГРАФОВ

И.В. Мельчакова, А.П. Слобожанюк, А.В. Козаченко

Для получения качественного изображения при помощи магнитно-резонансных томографов необходимо уметь эффективно получать и обрабатывать информацию, содержащуюся в ближнем радиочастотном поле, которое излучается ядрами атомов водорода в теле человека, так как эта информация теряется при незначительном удалении от источников излучения. Предлагается для улучшения диагностических возможностей метода магнитно-резонансной томографии использовать суперлинзы на основе метаматериалов, способные передавать на достаточно большое расстояние ближнее радиочастотное электромагнитное поле с целью его детектирования снаружи, а также увеличивать амплитуду ближнепольного радиочастотного сигнала, что до применения метаматериалов считалось технически невозможным.

Ключевые слова: метаматериалы, суперлинза, магнитно-резонансная томография.

Введение

В настоящее время магнитно-резонансная томография (МРТ) – самый информативный метод диагностики, который позволяет получать изображения срезов тканей и органов в различных плоскостях. Метод МРТ практически безвреден, в основе его лежит принцип магнитного резонанса ядер водорода – наиболее широко распространенного элемента в организме человека [1]. При МРТ радиочастотный (РЧ) сигнал, излучаемый ядрами атомов водорода в теле человека при сканировании и регистрируемый приемными катушками, является слабым и быстро затухающим в пространстве. Затухающие пространственные гармоники могут быть детектированы только в непосредственной близости от источника, что накладывает существенные ограничения на приемные катушки (так как они не должны влиять на распределение поля) и усложняет процесс сбора информации. Чтобы достичь приемлемого качества изображения и соотношения сигнал/шум необходимо неоднократно повторять процедуру сканирования исследуемой области. Необходимость повторения приводит к увеличению времени обследования, что в настоящее время является одним из серьезных недостатков метода (как правило, длительность процедуры составляет от 20 до 40 мин), так как для получения качественных изображений пациент должен находиться в спокойном и неподвижном состоянии. Соответственно, для улучшения функциональных характеристик МРТ необходимо уметь манипулировать РЧ сигналом (например, увеличивать и (или) передавать на достаточно большие расстояния).

В настоящее время в МРТ, как правило, для улучшения разрешения изображений увеличивают напряженность постоянного магнитного поля (от 1,5 Тл до 3 Тл и даже 7 Тл), создают более быстрые и мощные градиентные магнитные поля, более эффективные РЧ приемно-передающих катушки. Связано это с тем, что чем выше напряженность магнитного поля, тем более высокого соотношения сигнал/шум, контрастности и высокого пространственного и (или) временного разрешения, необходимых для ряда приложений, можно достигнуть [2]. Увеличение соотношения сигнал/шум необходимо для более быстрого сбора данных (сокращение времени сканирования объекта) или для более точной визуализации мелких деталей. В

зависимости от силы магнитного поля существует несколько типов МР-томографов: низкопольные (0,1–0,5 Тл) высокопольные (1–1,5 Тл) сверхвысокопольные (3 Тл). Уже сегодня все основные производители выпускают высокопольные МР-томографы. Применение высокопольных МР-томографов позволяет значительно расширить диагностические возможности метода МРТ, однако связано и с целым рядом ограничений на их использование [3]. В качестве примера можно привести значительное увеличение массы системы (масса МР-сканера с напряженностью поля 1,5 Тл составляет порядка 3000–4000 кг, а масса МР-сканера с напряженностью поля 3 Тл – около 10000 кг), также наблюдается незначительное расширение зоны, ограниченной линией 5 Гс (зона, в которую запрещается вносить любые биомедицинские устройства) и др.

В настоящих исследованиях предлагалось идти не по пути увеличения напряженности магнитного поля, а применить метаматериалы для увеличения соотношения сигнал/шум и передачи распределения электромагнитного поля из томографа на достаточно большое расстояние с целью его детектирования. Метаматериалы – это искусственные композитные структурированные среды, электрический и магнитный отклик которых существенно отличается от отклика составляющих его сред [4]. Возможность создания метаматериалов с заранее известными и контролируемыми свойствами, открывает путь к применению метаматериалов в различных областях, таких как: передача изображений со сверхразрешением [5], оптические наноантенны [6, 7], маскировочные покрытия [8], медицина [9] и многое другое. Однако следует отметить, что, как правило, уникальные свойства метаматериала наблюдаются в узком частотном диапазоне, что накладывает определенные ограничения для их практического применения [10], но это не является проблемой для их использования в МРТ, так как МР-томограф работает также в узком частотном диапазоне.

В настоящее время уже известны попытки использовать метаматериалы для МР-томографии [11–13]. Полученные результаты теоретических и экспериментальных исследований показали возможность увеличения соотношения сигнал/шум на 20%.

Суперлинза на основе предельно анизотропного метаматериала – среды из массива проводов

Одним из наиболее перспективных вариантов создания суперлинзы для передачи субволновых изображений на расстояния больше длины волны с пространственным разрешением на уровне не хуже 1/10 длины волны, является предложенный в 2004 г. метод каналирования изображений [14]. Первоначальные оценки функциональности различных реализаций предлагаемого принципа в микроволновом диапазоне были проведены в работах [5, 15–17]. Основной и наиболее перспективной реализацией является слой среды из проводов для микроволнового диапазона [5].

Нашей группой было проведено исследование возможности применения различных дизайнов суперлинз с целью улучшить чувствительность и разрешающую способность МР-томографа. Учитывая фиксированную рабочую частоту томографа и толщину суперлинзы, удовлетворяющую условию Фабри–Перо, авторы рассчитали и сконструировали два экспериментальных макета суперлинзы: с наклонными и прямыми гранями (рис. 1). Обе суперлинзы состоят из массива латунных проводов размером 20×20, длина провода (толщина суперлинзы) $d=2500$ мм, период структуры $a=10$ мм, радиус провода $r=1$ мм. У суперлинзы с наклонными гранями – угол боковой грани к проводам составляет 30°. Рабочая частота структуры была выбрана 60 МГц.



Рис. 1. Фотографии экспериментальных макетов суперлинзы в безэховой камере: суперлинза с наклонными гранями (а); суперлинза с прямыми гранями (б)

Для проведения экспериментальных исследований был выбран высокопольный томограф Signa Infinity с напряженностью магнитного поля 1,5 Тл. В качестве приемных катушек применялись две поверхностные катушки, состоящие из витков провода. Эксперименты проводились с двумя фантомами цилиндрической и прямоугольной формы, объемом 20 и 4 литра соответственно.

Результаты экспериментов показали, что суперлинзы (как с наклонными гранями, так и с прямыми) способны переносить магнитное поле от изоцентра магнита в область со слабым статическим магнитным полем (рис. 2). Однако сравнивая результаты передач, можно утверждать, что линза с прямыми гранями передает сигнал лучше, чем линза с наклонными гранями. Также было установлено, что изображение можно получить, если катушки расположить непосредственно в центре суперлинзы. Но следует отметить, что значительного улучшения качества изображения достичь не удалось. Для улучшения качества получаемых изображений необходимо продолжение исследований в данной области. В частности, авторы планируют для улучшения и расширения диагностических возможностей МРТ (например, для увеличения разрешения получаемого изображения необходимого для целого ряда приложений, увеличения соотношения сигнал/шум) применить явление увеличения амплитуды затухающих волн за счет накачки стоячих волн, которое было обнаружено в 2011 году [18]. Преимуществом этого метода является слабая чувствительностью к потерям в материале. Явление увеличения амплитуды затухающих волн было подтверждено теоретически и численно при помощи моделирования в программном пакете CST MW Studio. Для этого будут разработаны эндоскопы на основе среды из проводов с радиочастотными катушками, проверена их функциональность в безэховой камере, а также вместе с томографом. Будет рассмотрено и проанализировано изменение соотношения сигнал/шум, а также чувствительности и разрешающей способности томографов при использовании МРТ-эндоскопов на основе метаматериалов.

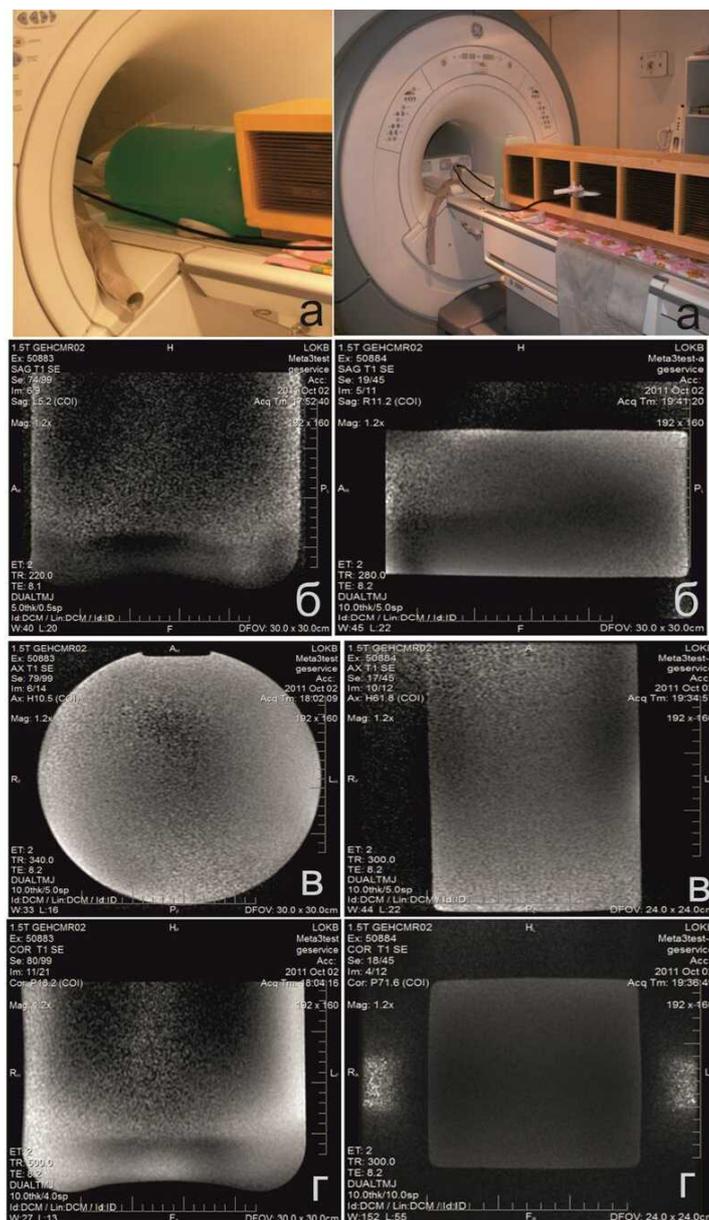


Рис. 2. Результаты измерений с прямой суперлинзой в различных плоскостях (приемные катушки расположены в третьей секции): фантом – 20 литровой бидон (левый столбец); фантом прямоугольной формы, объем – 4 литра (правый столбец): экспериментальные установки (а); сагиттальной (б); аксиальной (в); корональной (г)

Заключение

В работе представлены первые положительные результаты, необходимые для продолжения исследований в области изучения как свойств метаматериалов, так и возможности разработки на их базе устройств для практических применений. Было показано, что при помощи суперлинз на основе метаматериалов можно манипулировать радиочастотным сигналом, излучаемым ядрами атомов водорода в теле человека при сканировании в магнитно-резонансной томографии и регистрируемым приемными катушками. Было продемонстрировано, что используя суперлинзу можно получать изображение объекта, удаленного от приемных катушек на достаточно большое расстояние.

Литература

1. Hornak J. The basics of MRI. – 2007 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.cis.rit.edu/htbooks/mri/inside.htm> [online].
2. Stafford J. High field MRI: technology, application, safety and limitations. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.aapm.org/meetings/05AM/pdf/18-2826-94182-387.pdf, свободный. Яз. англ.
3. Казначеева А.О. Возможности и ограничения высокопольной магнитно-резонансной томографии (1,5 и 3 Тл) // Лучевая диагностика и терапия. – 2010. – № 4. – С. 83–87.
4. Smith D.R., Pendry J.B., Wiltshire M.C.K. Metamaterials and negative refractive index // Science. – 2004. – V. 305. – № 5685. – P. 788–792.
5. Belov P.A., Hao Y., Sudhakaran S. Subwavelength microwave imaging using an array of parallel conducting wires as a lens // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 033108.
6. Park Q.-H. Optical antennas and plasmonics // Contemporary Physics. – 2009. – V. 50. – P. 407–423.
7. Biagioni P., Huang J.-S., Hecht B. Nanoantennas for visible and infrared radiation // Rep. Prog. Phys. – 2012. – V. 75. – P. 024402.
8. Schurig D. et al. Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies // Science. – 2006. – V. 314. – № 5801. – P. 977 – 980.
9. Chanda N., Kan P., Watkinson L.D., Shukla R., Zambre A., Carmack T.L., Engelbrecht H., Lever J.R., Katti K., Fent G.M., Casteel S.W., Smith C.J., Miller W.H., Jurisson S., Katti K.V. Radioactive gold nanoparticles in cancer therapy: therapeutic efficacy studies of (198) AuNP-GA nanoconstruct in prostate tumor-bearing mice // Nanomedicine. – 2010. – V. 6. – P. 201–209.
10. Marqués R., Martin F., Sorolla M. Metamaterials with Negative Parameters: Theory and Microwave Applications. – Wiley, Hoboken, New Jersey, 2008. – 334 p.
11. Freire M.J., Marques R. and Jelinek L. Experimental demonstration of $\mu = -1$ metamaterial lens for magnetic resonance imaging // Applied Physics Letters. – 2008. – V. 93. – P. 231108 (1–3).
12. Radu X., Lapeyronnie A., Craeye C. Numerical and experimental analysis of a wire medium collimator for MRI // Electromagnetic, Special issue on Metamaterials. – 2008. – V. 28. – № 7. – P. 531–543.
13. Radu X., Garray D., Craeye C. Toward a wire medium endoscope for MRI imaging // Metamaterials. – 2009. – V. 3. – № 2. – P. 90–99.
14. Belov P.A., Simovski C.R., Ikonen P. Canalization of sub-wavelength images by electromagnetic crystals // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 71. – № 19. – P. 193105-1–4.
15. Ikonen P., Belov P.A., Simovski C.R., Maslovski S.I. Experimental demonstration of sub-wavelength image canalization using capacitively loaded wire medium // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 073102-1–4.
16. Silveirinha M.G., Belov P.A., Simovski C.R. Sub-wavelength imaging at infrared frequencies using an array of metallic nanorods // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 75. – P. 035108.
17. Белов П.А., Симовский К.Р., Иконен П., Сильверинья М.Г., Хао Я. Передача изображений с разрешением много меньшим длины волны в микроволновом, терагерцовом и оптическом диапазонах частот // Радиотехника и электроника. – 2007. – Т. 52. – № 9. – С. 1092–1107.
18. Агейский А.Э., Косульников С.Ю., Белов П.А. Резонансное возбуждение затухающих пространственных гармоник в среде из параллельных металлических наноцилиндров // Оптика и спектроскопия. – 2011. – Т. 110. – № 4. – С. 613–626.

ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОЕ ИЗМЕНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ

Г.В. Одинцова

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.П. Вейко

Предложен метод лазерного управления цветом металлической поверхности, превосходящий по ряду параметров традиционные методы окрашивания. Метод может найти широкое применение в прикладных и научных областях, в частности, для изменения трибологических и оптических свойств металлов. Определены механизмы образования цветных пленок на поверхности металлов под действием лазерного излучения. Предложен способ расчета фазового состава образующихся пленок на поверхности нержавеющей стали при лазерном воздействии, основанный на методах химической термодинамики с учетом кинетических ограничений. Получены многофакторные связи зависимости цветов от параметров воздействия.

Ключевые слова: лазерное изменение оптических свойств поверхности металлов, лазерное окрашивание, лазерное структурирование, волоконный лазер, расчет фазового состава.

Введение

Хорошо известно, что при нагревании на воздухе металл окисляется. При этом наблюдается образование спектра «цветов побежалости». Лазерное импульсное нагревание предоставляет уникальную возможность управления геометрической структурой (топологией) [1] образующихся окислов и степенью окисления металлов, что в принципе позволяет создавать полноцветное изображение на металлических поверхностях. На основе этого эффекта возможно создание технологии цветной лазерной маркировки (ЦЛМ) [2, 3], которая может занять хорошую нишу в технологиях окрашивания металлов, когда требуется получение долговечного изображения с высокой производительностью, с высокой степенью защиты от подделок. Предлагаемая технология не требует расходных материалов и подготовки трафаретов, а также высококвалифицированного персонала. Ее производительность выше, чем в большинстве аналогичных технологиях, особенно при тех производственных операциях, где не требуется обработка больших площадей поверхности, что в будущем также решается за счет увеличения количества обрабатываемых установок. Но следует учитывать, что спектр получаемых цветов в технологии ЦЛМ является ограниченным.

Предлагаемая технология ЦЛМ имеет следующие потенциальные применения [4]: нанесение цветных логотипов на выпускаемую продукцию, защита от фальсификации продукции (рис. 1, а), кодирование информации (рис. 1, б), рекламный бизнес (сувенирная продукция, визитки, таблички и др.), окрашивание или маркировка ювелирных изделий. Изменение оптических свойств поверхности (в частности, цвета, и связанной с этим поглощательной способностью) играет роль также во многих других случаях, например, при разработке фотоэлектрических элементов [5] (увеличение КПД альтернативных источников энергии за счет окрашивания и текстурирования), устройств сигнализации и считывания и т.д.

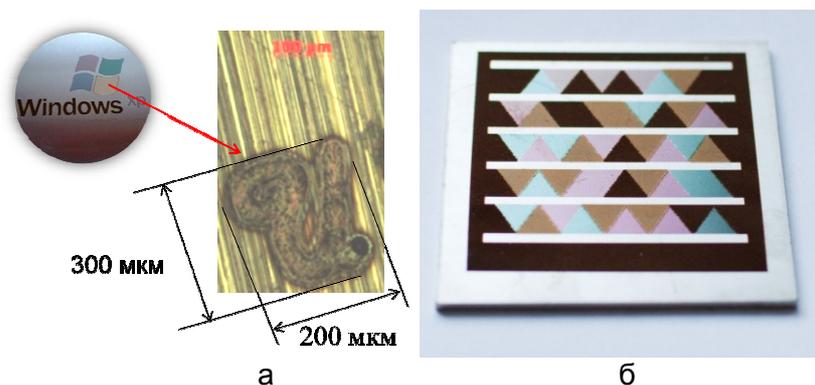


Рис. 1. Примеры применения цветной лазерной маркировки: как защиты от фальсификации продукции, в логотипе «Windows скрыт» символ «И» размером 200×300 мкм, который почти не заметен человеческому глазу (а); Microsoft Tag – цветной штрих код, который позволяет кодировать больше информации, чем монохромная маркировка (б)

Постановка задачи

Целью настоящей работы было исследование лазерно-индуцированного изменения оптических свойств поверхности нержавеющей стали марки 12Х18Н10Т на основе экспериментальных исследований и теоретических расчетов процессов формирования цветных оксидных пленок на поверхности нержавеющей стали при воздействии излучением лазера ИК-диапазона.

Для достижения поставленной цели необходимо решение следующих задач: определение механизмов образования цвета на поверхности металлов при лазерном воздействии, определение фазового состава полученных цветных пленок, получение многофакторных связей зависимости цветов от параметров воздействия на поверхность нержавеющей стали.

Механизмы образования цвета на поверхности металлов под действием лазерного излучения

Можно предложить 3 механизма образования цвета на поверхности металлов под действием лазерного излучения:

1. образование прозрачных интерференционных пленочных покрытий;
2. образование дифракционных решеток на поверхности лазерной гравировкой;
3. образование новых веществ – цветовых пигментов – в результате ее локального лазерного нагрева в атмосфере.

Для реализации первого механизма нужны гладкие поверхности (например, прокатанные, на которых часто наблюдаются цвета побежалости), при этом должны образовываться очень тонкие пленки (соизмеримые с длиной волны). Создание дифракционных решеток или их подобия методом лазерной гравировки в принципе возможно. Однако в данном эксперименте такой цели не ставилось и авторы сознательно уходили от параметров (скорости сканирования, частоты следования импульсов и др.), которые могли бы привести к шагу решетки, соизмеримому с длиной волны, чтобы не усложнять и без того достаточно сложную интерпретацию процессов цветообразования при лазерном воздействии на металлы. Гипотеза образования цветовых пигментов представляется разумной, но она не может объяснить образования разнообразной цветовой палитры при воздействии на один и тот же металл, так как каждому пигменту соответствует свой индивидуальный цвет. Таким образом, наиболее вероятной причиной «лазерного» окрашивания поверхности металла является

образование интерференционных пленок в результате химического взаимодействия металлов с атмосферными газами при их лазерном нагревании.

Термодинамический метод расчета фазового состава цветных пленок на поверхности нержавеющей стали при лазерном воздействии. Экспериментальные методы определения состава полученных пленок, такие как спектроскопия комбинационного рассеяния света, энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия и др., весьма трудоемки, а иногда и невозможны, в связи с многокомпонентностью состава многих сплавов, например, стали [6]. Современный уровень развития методов химической термодинамики (ХТ) с учетом кинетических ограничений в физико-химических исследованиях позволяет получить расчетные решения для разнообразных по своей природе технологических задач, в том числе для оценки состава полученных соединений при лазерном воздействии [7]. Насколько нам известно, методы ХТ практически не использовались в лазерной термохимии, и может быть, первая попытка такого рода, была предпринята в работе [8]. Надо отдать должное смелости авторов и по справедливости оценить их новаторство, однако, обоснования возможности применения методов ХТ в случае импульсного лазерного нагрева однокомпонентного сплава на воздухе в ней не содержится. Также в данной работе не учитываются парциальные давления газов воздуха, зависимости изобарных теплоемкостей от температуры и тепловые эффекты фазовых превращений, в то же время, именно эта работа привлекла наше внимание. В основе данного метода лежит принцип, основанный на 1 и 2 началах термодинамики. Протекающие процессы целесообразно описывать с помощью исследования изменения соответствующей (данному изобарно-изотермическому процессу) термодинамической функции – энергии Гиббса. Самопроизвольное протекание изобарно-изотермического процесса определяется двумя факторами – энтальпийным и энтропийным. Разность этих двух термодинамических функций и определит значение энергии Гиббса исследуемой системы.

Тепловые эффекты процессов зависят от температуры, при которой они проводятся, поэтому для их вычисления при произвольных температурах необходимо знать зависимость стандартных изобарных теплоемкостей реагирующих веществ $C_j^0(P_0, t)$ от температуры, а также температуры T_j и тепловые эффекты (энтальпии) фазовых (структурных, агрегатных) превращений $\Delta H_j^0(P_0, T_j)$, если таковые имеются.

Расчет изменения энергии Гиббса ΔG_T реакции, как разности суммы продуктов и суммы исходных компонентов:

$$\Delta G_T = \Delta_f H^0(P_0, T_0) - TS^0(P_0, T_0) + \int_{P_0}^P V^0(\rho, T) dP - \sum_{j=1}^k \left[T \int_{T_{j-1}}^{T_j} \frac{C_j^0(P_0, t)}{t} dt - \int_{T_{j-1}}^{T_j} C_j^0(P_0, t) dt + \Delta H_j^0(P_0, T_j) \left(\frac{T}{T_j} - 1 \right) \right], \quad (1)$$

где $\Delta_f H^0(P_0, T_0)$, $S^0(P_0, T_0)$ – соответственно энтальпия и энтропия вещества при стандартных ($P_0=1$ бар, $T_0=298,15$ К) условиях; $V^0(\rho, T)$ – барическая зависимость стандартного мольного объема (парциального) на интервале $[P_0, P]$ при температуре T . Отметим, что величины $V^0(\rho, T)$ парциальных объемов здесь дополнительно введены

для учета поправок ΔG_T на отличие реального состояния (по давлению, концентрации) каждого из веществ (компонентов) ΔG_T от стандартного ΔG_T^0 .

Так как процесс лазерной обработки происходит в воздухе, то наиболее вероятно образование реакций взаимодействия компонентов стали (железо, хрома, никеля и кремния) и воздуха (кислорода, азота, углекислого газа) между собой. На рис. 2 приведены кривые зависимости энергии Гиббса образования реакций от температуры, полученные на базе уравнения (1). Для каждой реакции образования расчет энергии Гиббса осуществлялся в соответствующем температурном диапазоне 298–2000 К.

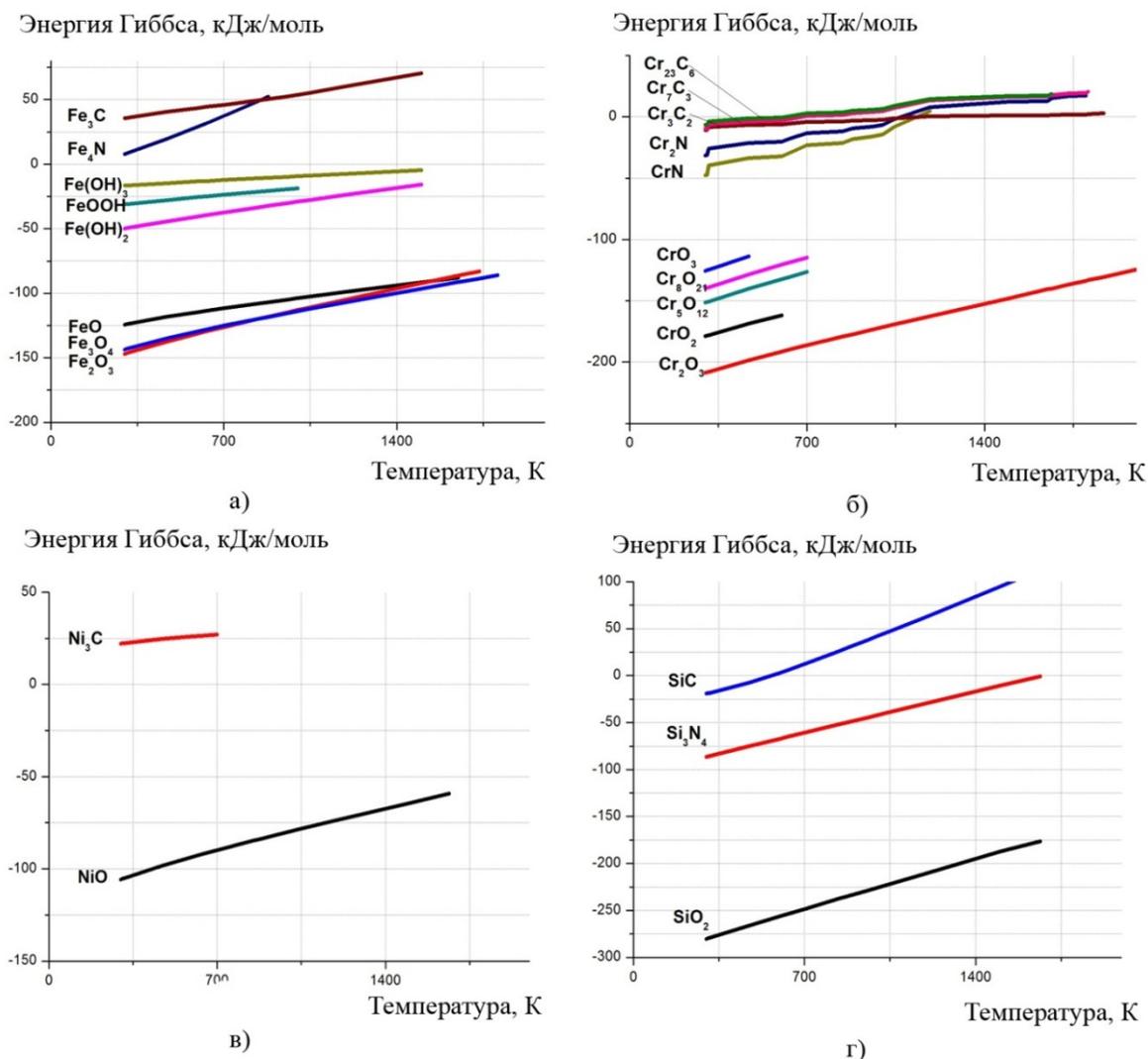


Рис. 2. Зависимость энергии Гиббса образования оксидов, гидроксидов, карбидов и нитридов компонентов стали от температуры: железо (а); хром (б); никель (в); кремний (г)

Величина энергии Гиббса взаимодействия компонентов стали с кислородом значительно меньше, чем с азотом, углеродом или водой, следовательно, образование оксидов наиболее вероятно. Это подтверждают результаты энергодисперсионной спектроскопии [9].

Из рис. 1 видно, что при нагревании поверхности нержавеющей стали марки 12X18H10T до температуры 840 К в атмосфере образуется многокомпонентная пленка (МП) со следующим фазовым составом: Fe₂O₃, Cr₂O₃, NiO, SiO₂.

При температурах 840–2000 К Fe₂O₃ восстанавливается до Fe₃O₄, фазовый состав МП меняется: Fe₃O₄, Cr₂O₃, NiO, SiO₂.

Таким образом, с помощью метода ХТ были определены продукты, которые получают в заданных условиях, но не получен ответ на вопрос: пройдет ли данный

процесс до конца, успеют ли образоваться данные продукты? Для этого были привлечены опытные данные других исследователей, в которых состав стали и режимы воздействия были близки к нашим. В результате с помощью различных экспериментальных методов были получены те же соединения, что и в нашем случае [10–12].

Методика планирования экспериментов для выявления многофакторных связей зависимости цветов от параметров воздействия на поверхность нержавеющей стали. С помощью методики планирования экспериментов разработаны технологические карты, описывающие зависимость получаемого цвета от параметров лазерного воздействия для нержавеющей стали, которые обеспечивают максимальную производительность процесса ЦЛМ.

Основные результаты работы

Показано, что основным фактором, влияющим на цвет нержавеющей стали при лазерном облучении, является интерференция в тонких пленках.

Установлен фазовый состав пленок, полученных при взаимодействии лазерного излучения с поверхностью стали в атмосфере. При нагревании поверхности нержавеющей стали марки 12Х18Н10Т до температуры 840 К в атмосфере образуется МП со следующим фазовым составом: Fe_2O_3 , Cr_2O_3 , NiO , SiO_2 , а при температурах 840–2000 К – Fe_3O_4 , Cr_2O_3 , NiO , SiO_2 .

Получены многофакторные связи зависимости цветов от параметров воздействия.

Направления дальнейших исследований

Исследовать устойчивость полученных цветов на поверхности нержавеющей стали к агрессивному внешнему воздействию (вода, этиловый спирт, УФ-излучение, низкие и высокие температуры).

Определить взаимосвязь между цветом получаемой поверхности и изменением ее трибологических свойств (микротвердость, шероховатость, гидрофобность и др.).

Разработать технологические карты получения цветов, обеспечивающие максимальную производительность, для наиболее распространенных марок стали в промышленности.

На основе полученных технологических карт разработать программное обеспечение по технологии цветной лазерной маркировки к существующим лазерным установкам (например, Минимаркер-2).

Исследовать изменение оптических свойств поверхности (за счет окрашивания и текстурирования) других материалов (в том числе Ti, Si).

Работа поддержана грантами РФФИ № 12-02-09537-моб_з и №10-02-00208, ГК № 11.519.11.4017. Участник ведущей научной школы НШ-619.2012.2.

Литература

1. Veiko V.P., Metev S.M. Laser assisted microtechnology – Heidelberg: Springer, 1998. – 270 p.
2. Вейко В.П., Горный С.Г., Одинцова Г.В., Патров М.И., Юдин К.В. Формирование многоцветного изображения при лазерном окислении металлов // Изв. вузов. Приборостроение. – 2011. – № 2. – С. 47–52.

3. Gorny S.G., Odintsova G.V., Otkeeva A.V., Veiko V.P. Laser induced multicolor image formation on metal surfaces // SPIE. – 2011. – V. 7996. – P. 799605-1–7.
4. Vorobyev A.Y., Guo C. Colorizing metals with femtosecond laser pulses // Applied Physics Letters. – 2008. – № 3. – P. 041914-1–3.
5. Dusser B., Sagan Z., Soder H., Faure N., Colombier J., Jourlin M., Audouard E. Controlled nanostructures formation by ultra fast laser pulses for color marking // Optics Express. – 2010. – V. 18 – № 3. – P. 2913–2924.
6. Вейко В.П., Баранов А.В., Ярчук М.В., Иванов А.И., Богданов К.В. Исследование структуры тонких металлических пленок после воздействия фемтосекундных лазерных импульсов // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2010. – № 5 (69). – С. 21–25.
7. Slobodov A.A. Calculation of phase-chemical transformations in multicomponent systems of various nature on the basis of thermodynamic methods- and databank ASTICS // Proc. of XIV Int. Conf. Chem. Thermod. – 2002. – P. 47–54.
8. Юльметова О.С., Щербак А.Г. Исследование процесса формирования светоконтрастного растра посредством лазерного маркирования // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2010. – № 5 (69). – С. 28–34.
9. Odintsova G.V., Slobodov A.A., Veiko V.P. Products analysis of metals laser oxidation // 20th International Conference on Advanced Laser Technologies ALT'12 Book of Abstracts. – 2012. – P. 314.
10. Козаков А.Т., Ярьско С.И. Исследование методом оже-спектроскопии состава поверхности многокомпонентных сплавов при импульсном лазерном воздействии // Физика и химия обработки материалов. – 2010. – № 3. – С. 67–73.
11. Li Z.L., Zheng H.Y., Teh K.M., Liu Y.C., Lim G.C., Seng H.L., Yakovlev N.L. Analysis of oxide formation induced by UV laser coloration of stainless steel // Applied Surface Science. – 2009. – V. 256. – P. 1582–1588.
12. Jervisa T.R., Williamson D.L., Hirvonena J.-P., Zoccoa T.G. Characterization of the surface oxide formed by excimer laser surface processing of AISI 304 stainless steel // Materials Letters. – 1990. – V. 9. – № 10. – P. 379–383.

УДК 539.2-022.532

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА КОЛЛОИДНОГО ЗОЛОТА И ПРОИСХОДЯЩИХ ПРИ НЕМ ЦВЕТОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

А.В. Пантелеев, С.А. Чивилихин

Цели и задачи работы

Работа посвящалась исследованию химического синтеза наночастиц золота. Проведен химический синтез и экспериментально исследован получившийся раствор. Проверена его стабильность – измерены спектры поглощения и пропускания, выявлена зависимость среднего диаметра частиц от концентрации, а также получены фотографии частиц на сканирующем электронном микроскопе. Рассмотрены возможности применения наночастиц золота в областях человеческой деятельности.

Применяемая методика исследований

В данном проекте для синтеза наночастиц золота использовался цитратный метод. Отличительной особенностью этого метода является то, что цитрат-анион одновременно выступает в роли стабилизатора и восстановителя, поэтому

концентрация этого иона играет критическую роль: его изменение одновременно влияет на скорость восстановления и на процессы роста частиц. Кроме того, в результате реакции в растворе образуются продукты окисления цитрат-аниона – 1,3-ацетондикарбоновая и итаконовая кислоты:

$\text{H}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7 + \text{HAuCl}_4 \rightarrow \text{Au} + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_4 + \text{H}_2\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_4 + \text{HCl}$, где $\text{H}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7 - (\text{HOOC})-\text{CH}_2-\text{C}(\text{OH})(\text{COOH})-\text{CH}_2-(\text{COOH})$ – лимонная кислота; $\text{H}_2\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_4 - \text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{COOH})-\text{CH}_2\text{COOH}$ – итаконовая (метиленантарная, метиленбутандиовая) кислота; $\text{H}_2\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_4 - \text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{COOH})-\text{CH}_2\text{COOH}$ – 1,3-ацетондикарбоновая кислота.

Присутствие этих кислот в растворе может вызвать необходимость дополнительной очистки золя.

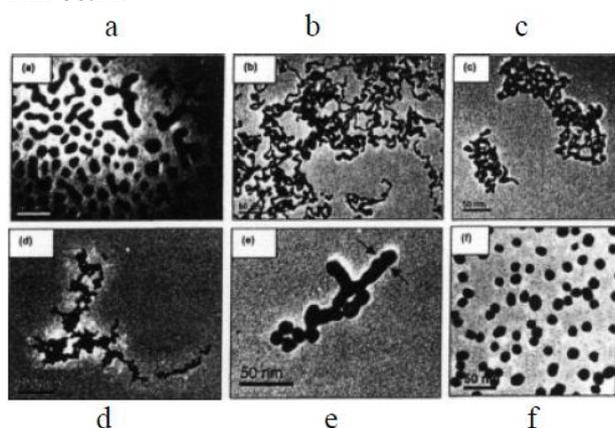


Рис. 1. Изображения золотых наночастиц на разных стадиях синтеза, полученные с помощью просвечивающего электронного микроскопа [2]

Во время синтеза цвет реакционной смеси изменяется. Первоначально слабо желтая окраска иона AuCl_4^- исчезает, раствор становится темно-синим, далее фиолетовым и окончательно рубиново-красным (наночастицы Au). Изменение цвета раствора указывает на структурные превращения, происходящие в системе. Методом пропускающей электронной микроскопии установлено, что бесцветный раствор, образующийся сразу после добавления цитрата, содержит золотые нанокластеры диаметром 3–5 нм (рис. 1, а) [10]. В темно-синем растворе формируется сложная структура, которую можно описать как разветвленную сеть из нанопроволок с диаметром 5 нм (рис. 1, b). В стадии темно-фиолетового цвета возникают небольшие сегменты, которые образуются в результате разрыва основной разветвленной сети нанопроволок (рис. 1, c). Сферические наночастицы с диаметром 10–13 нм начинают откалываться от нанопроволок, когда раствор становится фиолетовым (рис. 1, d, e). Окончательно золотые наносферы формируются, когда раствор становится рубиново-красным (рис. 1, f).

Методика проведения синтеза следующая:

1. колбу с 15–20 мл воды нагреть на магнитной мешалке с обратным холодильником до кипения и кипятить 15 мин, слить воду;
2. налить в колбу 48 мл H_2O ;
3. довести до кипения и подключить обратный холодильник;
4. добавить стеклянной пипеткой 0,5 мл 1% HAuCl_4 и кипятить 2 мин (рис. 2, а);
5. добавить стеклянной пипеткой как можно быстро 1,5 мл 1% Na_3Cit (рис. 2, б);
6. увеличить до максимума обороты мешалки и кипятить 20 мин (рис. 3);
7. выключить нагрев мешалки и после прекращения кипения перелить раствор в стерильный пузырек, подогретый в сушильном шкафу.

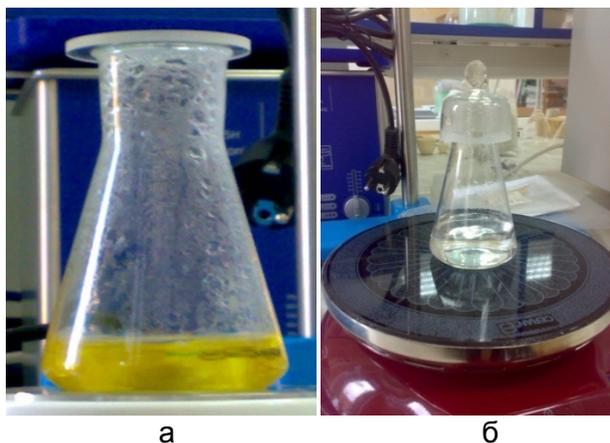


Рис. 2. Смесь тетрахлорауровой кислоты с дистиллированной водой (а); обесцвечивание раствора после добавления цитрата натрия (б)

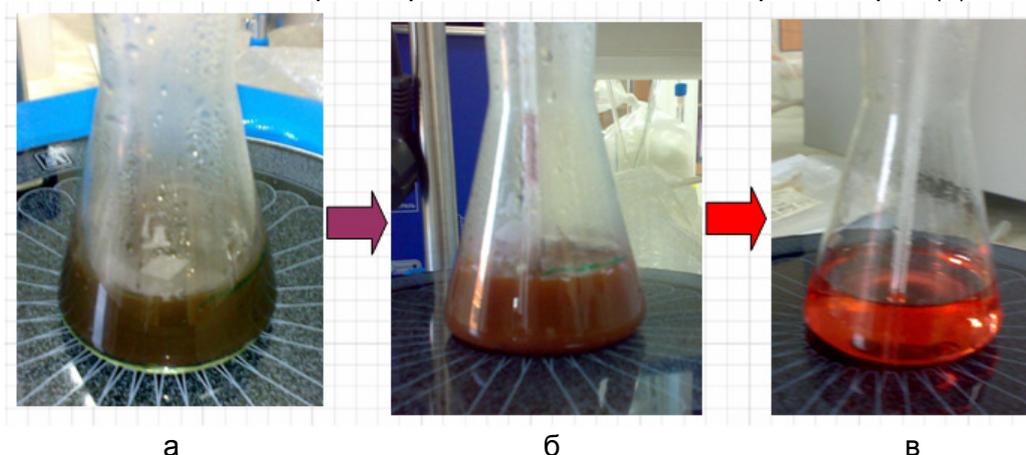


Рис. 3. Процессы смены цвета при синтезе коллоидного золота: раствор приобретает темно-синюю окраску (формируется сеть нанопроволок) (а); темно-фиолетовый цвет (откалывание наночастиц) (б); окончательное формирование золотых наносфер (в)

В результате синтеза у нас получилось 50 мл раствора коллоидного золота. Данный раствор авторы подвергли ряду экспериментальных исследований на спектрофотометре, наносайзере и сканирующем электронном микроскопе.

Измерения на спектрофотометре

Нашей целью было посмотреть стабильность раствора и проверить изменения спектров пропускания и поглощения за две недели.

В результате получились зависимости (рис. 4).

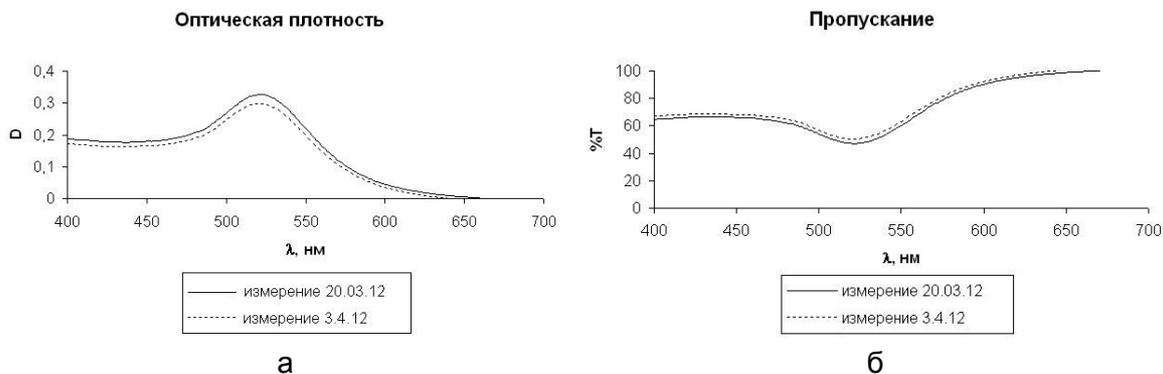


Рис. 4. Графики зависимости от длины волны: оптической плотности (а); пропускания (б)

Измерения на наносайзере

Для измерения размеров наночастиц используется метод динамического рассеяния света. Данный метод позволяет определить коэффициент диффузии наночастиц в жидкости путем анализа характерного времени флуктуаций интенсивности рассеянного света. Далее из коэффициента диффузии рассчитывается радиус наночастиц.

Сначала были проведены измерения исходного раствора (с концентрацией 0,18 г/моль), затем этот раствор стали разбавлять дистиллированной водой в соотношении 1:1, проделав 6 измерений. Таким образом, авторы проводили 2 этапа измерений с разницей в две недели.

В результате получилась зависимость (рис. 5).

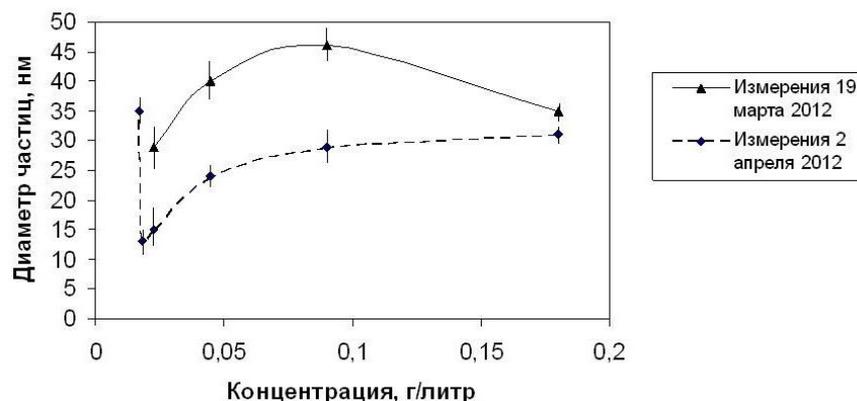


Рис. 5. График зависимости среднего диаметра частиц от концентрации

По этому графику можно сделать вывод, что с уменьшением концентрации раствора, уменьшается и средний диаметр частиц.

Сканирующая электронная микроскопия

При сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) поверхность образца сканируется точно сфокусированным пучком электронов. Облучение электронами приводит к излучению вторичных электронов, обратному рассеянию электронов высокой энергии и возникновению рентгеновских лучей, характеристики которых зависят от элементов образца.

Были получены следующие фотографии (рис. 6) раствора коллоидного золота от 3.03.2012.

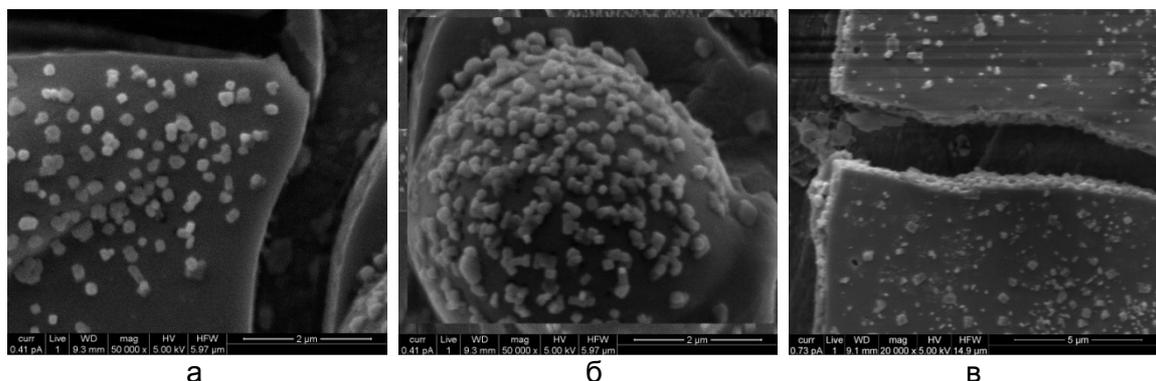


Рис. 6. Фотографии СЭМ: скопления наночастиц (а); напыление наночастиц на пленку (б); разрыв пленки с наночастицами (в)

По результатам СЭМ можно сделать вывод, что размеры частиц, видимых на фотографии схожи с размерами частиц, измеренных наносайзером. Абсолютно точно

их сравнивать смысла не имеет, так как временной промежуток между экспериментами был сравнительно большим.

Применение

Уже 5000 лет назад древние египтяне считали золото средством ментального, физического и духовного очищения. Они считали, что золото стимулирует жизненные силы и повышает уровень вибраций.

Самый известный алхимик Китая, Цо Хун (281–361), утверждал, что растворенное золото и есть эликсир жизни, обладает способностью омолаживать и продлевать жизнь. Из Китая, золотой раствор попал к арабским алхимикам, которые передали свои знания в Европу.

Парацельс (1493–1541), основатель медицинской химии, создал несколько лекарств на базе драгоценных металлов, в частности золота. Он успешно применял обогащенные металлами соли для лечения больных, объявленных безнадежными другими врачами.

Медицинский бестселлер д-р Н. Каиро и д-р А. Бринкманна, Материя Медика (19-е изд., 1956, Сан-Пауло, Бразилия) объясняет, что «коллоидное золото является лучшим средством против ожирения».

Доктор Гай Е. Авраам и Питер Б. Гиммель подтвердили в новейшем исследовании (1997), что артрит можно успешно лечить раствором золота. Кроме того, они утверждают, что золотые частицы, находящиеся в состоянии чистого металла, не имеют побочных эффектов в отличие от соединений золота.

Другое исследование доказывает, что коллоидное золото улучшает мозговую деятельность: ежедневное принятие золотого раствора в течение трех-четырёх недель может повысить интеллектуальный коэффициент (IQ) на 20%, улучшить концентрацию, обострить внимание и понимание. Предполагается, что золотой коллоид увеличивает проводимость нервных окончаний в организме и в центральной нервной системе, а это приводит к повышению уровня физической и умственной деятельности.

Это оценка согласуется с мнением Эдгар Кейса, утверждавшего, что золото способствует регенерации нервной системы. Согласно учению Кейса, правильно дозируя золото и серебро, человек может практически удвоить продолжительность жизни.

По данным медицинских исследований, золото является эффективным лекарством для хронических больных астмой, зависимых от кортикостероида. Длительное употребление золотого коллоида приносит облегчение этой болезни, так как гиперактивность бронхов и дозировка глюкокортикоидов уменьшаются.

В 2002 году ученые в Австралии и Новой Зеландии произвели препарат по борьбе с раком, основанный на золоте и серебре. Он уничтожает раковые клетки в матках мышей, не повреждая здоровые клетки!

Биохимия использует золото в белковых соединениях для создания новых, жизненно важных лекарств. Недавно был испробован новый метод лечения СПИДа посредством золота, способного остановить распространение вируса в зараженных клетках. Золото применяется также при лечении некоторых видов рака. Инъекции микроскопических частиц золота останавливают распространение рака предстательной железы. Рак яичников лечат золотом; специальный лазер на основе золотой пыли (Golddust) уничтожает раковые клетки, оставляя здоровые клетки неповрежденными.

В последние 10–15 лет расширилась область применения наночастиц золота в качестве эффективных оптических преобразователей результатов биоспецифических взаимодействий (например, антители-антиген, адсорбированный на частицах КЗ) в

детектируемый оптический сигнал в устройствах, называемых биочипами и биосенсорами. В основе работы таких устройств лежат уникальные оптические свойства коллоидного золота, в частности, явление поверхностного плазмонного резонанса.

По мере того как современная наука открывает то, что наши предки уже давно знали, мы медленно, но верно осознаем лечебный и физический потенциал золота.

Выводы

В ходе работы был исследован метод химического синтеза коллоидного золота и процессы, его сопровождающие.

Получившийся раствор был исследован на спектрофотометре – получены спектры поглощения и пропускания, наносайзере – получен график зависимости объема наночастиц от концентрации.

В ходе исследований было доказано, что полученный раствор стабилен так как спектры пропускания и поглощения за время существенно не изменились.

Вследствие измерений на наносайзере доказано, что при уменьшении концентрации уменьшается и средний объем частиц. Данная модель может найти свое применение во многих областях человеческой деятельности.

Литература

1. Дыкман Л.А., Богатырев В.А., Щеголев С.Ю., Хлебцов Н.Г. Золотые наночастицы: Синтез, свойства и биомедицинские применения. – М.: Наука, 2008. – 318 с.
2. Евдокимов Ю.М., Сычов В.В. Принципы создания наноконструкций с использованием молекул нуклеиновых кислот в качестве строительных блоков // Успехи химии. – 2008. – Т. 77. – № 2. – С. 194–206.
3. Крутяков Ю.А., Кудринский А.В., Оленин А.Ю., Лисичкин Г.В. Синтез и свойства наночастиц серебра: достижения и перспективы // Успехи химии. – 2008. – Т. 77. – № 3. – С. 242–265.
4. Губин С.П., Юрков Г.Ю., Катаева Н.А. Наночастицы благородных металлов и материалы на их основе. – М.: ООО «Азбука-2000», 2006. – 156 с.
5. Хлебцов Н.Г., Богатырев В.А., Дыкман Л.А., Щеголев С.Ю. Золотые наноструктуры с плазмонным резонансом для биомедицинских исследований // Российские нанотехнологии. – 2007. – Т. 2. – № 3–4. – С. 69–86.
6. Murphy C.J., Sau T.K., Gole A.M., Orendorff C.J., Gao J., Gou L., Hunyadi S.E., Li T. Anisotropic Metal Nanoparticles: Synthesis, Assembly, and Optical Applications // J. Phys. Chem. B. – 2005. – V. 109. – № 29. – P. 13857–13870.
7. Пантелеев А.В., Вавулин Д.Н., Альфимов А.В., Арысланова Е.М., Чивилихин С.А. Исследование химического синтеза коллоидного золота цитратным методом // Доклады конференции «Фундаментальные основы МЭМС- и нанотехнологий». – Новосибирск, 2012. – 281 с.
8. Quan-Yu Cai, Sun Hee Kim, Kyu Sil Choi, Soo Yeon Kim, Seung Jae Byun, Kyoung Woo Kim, Seong Hoon Park, Seon Kwan Juhng, Kwon-Ha Yoon. // Invest. Radiol. – 2007. – V. 42. – P. 797–806.
9. Grieshaber D., MacKenzie R., Voros J., Reimhult E. Electrochemical Biosensors – Sensor Principles and Architectures // Sensors. – 2008. – V. 8. – № 3. – P. 1400–1458.
10. Daniel Huang, Frank Liao, Steven Molesa, David Redinger, Vivek Subramanian. Plastic-Compatible Low Resistance Printable Gold Nanoparticle Conductors for Flexible Electronics // Journal of the Electrochemical Society. – 2003. – V. 150. – № 7. – P. G412–G417.

11. Pong B.K., Elim H.I., Jian-Xiong Chong, Wei Ji, Bernhardt L. Trout, Jim-Yang Lee. New insights on the nanoparticle growth mechanism in the citrate reduction of gold (III) salt: formation of the Au nanowire intermediate and its non-linear optical properties // *J. Phys. Chem. C.* – 2007. – V. 111. – № 17. – P. 6281–6287.
12. Whetten R.L., Khoury J.T., Alvarez M.M., Srihari Mu&y, Vezmar I., Wang Z.L., Stephens P.W., Cleveland C.L., Luedtke W.D., Landman U. Nanocrystal gold molecules // *Adv. Mater.* – 1996. – V. 8. – № 5. – P. 428–433.
13. McFarland A.D., Haynes C.L., Mirkin C.A., Van Duyne R.P., Godwin H.A. Color My Nanoworld // *J. Chem. Ed.* – 2004. – V. 81. – P. 544A–544B.
14. Liz-Marzan L.M. Nanometals: formation and color // *Materialstoday* 2004, February. – P. 26–31.
15. Rayford II C.E., Schatz G., Shuford K. Optical Properties of Gold Nanospheres // *Nanoscape.* – 2005. – V. 2. – № 1. – P. 27–33.

УДК 621.01

АНАЛИЗ И СИНТЕЗ МЕХАНИЗМА ДЛЯ ПЛЕТЕНИЯ ТОРСИОННЫХ ПОДВЕСОВ ПРИБОРОВ

А.Д. Перечесова

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.М. Мусалимов

Цель работы – синтез механизма плетения с учетом особенностей структуры торсионов, моделируемых как эквивалентные спирально-анизотропные стержни. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи: произведен анализ механизма плетения существующего устройства для изготовления спирально-анизотропных торсионов УИСАТ-1; построена динамическая модель механизма плетения с учетом влияния характеристик торсионного подвеса; исследована геометрия образцов, полученных с помощью механизма плетения, и их физико-механические свойства; разработаны новые подходы к оценке физико-механических характеристик винтовых элементов спирально-анизотропных стержней.

Ключевые слова: механизм для плетения торсионных подвесов приборов, спирально-анизотропный стержень, кевлар, оптимизация, SimMechanics.

Введение

Известны механизмы и машины для плетения, которые применяются: в текстильной промышленности, как для достижения определенных свойств материала, так и в декоративных целях; в канатной промышленности при изготовлении канатов, арматурных канатов, стальных канатов закрытого типа; в кабельной промышленности при изготовлении многопроволочной токопроводящей жилы, при создании оболочек для кабелей (изоляционно-экранирующей, огнестойкой, звукоизоляционной, армирующей, демпфирующей и т.д.); в других областях: при изготовлении арматуры конвейерной ленты; для изготовления металлических сеток, замкнутых безузловых плетеных сетей, т.е. плетеных изделий замкнутой геометрической формы (а также для шнуроплетения); для изготовления трубчатых армированных изделий из композиционных материалов (труб, отводов, тройников, переходников).

В меньшей степени разработаны механизмы для плетения компонентов чувствительных элементов (ЧЭ) с микронными толщинами, например, торсионных подвесов ЧЭ приборов, где в качестве сырья для плетения ЧЭ используется особый материал – филаменты синтетических высокомодульных нитей (относятся к классу параарамидных волокон) с диаметром 0,016 мм и длиной 400 мм.

В настоящее время упругие торсионные подвесы, используемые в качестве подвесов магниточувствительных элементах (МЧЭ) магнитостатического вариометра (МСВ), входящего в состав геофизического комплекса GI-MTS-1 (СПбФ ИЗМИРАН),

изготавливаются с помощью устройства для изготовления спирально-анизотропных торсионов УИСАТ-1 [1]. Данные торсионные подвесы обладают свойствами упругой анизотропии. В свою очередь, использование таких торсионных подвесов при изготовлении ЧЭ приборов позволяет снизить модуль кручения (повысить чувствительность), повысить устойчивость к изменению климатических факторов, повысить временную стабильность (уменьшить температурный дрейф нуля), повысить устойчивость к динамическим нагрузкам.

Проектирование современных механизмов плетения торсионов связано с их анализом, т.е. описанием кинематики и динамики с одной стороны, а с другой стороны – синтезом такого механизма, который заключается в разработке структуры и геометрии механизмов на основе заданных кинематических и динамических характеристик. Этим определялась актуальность работы.

Синтез производился также с учетом особенностей структуры торсионов.

Цель работы – синтез механизма плетения с учетом особенностей структуры торсионов, моделируемых как эквивалентные спирально-анизотропные стержни (САС).

Задачи исследования. Для достижения поставленной цели необходимо решение следующих задач:

1. провести анализ механизма плетения устройства УИСАТ-1;
2. построить динамическую модель механизма плетения с учетом влияния характеристик торсионного подвеса;
3. исследовать геометрию образцов, полученных с помощью механизма плетения, и их физико-механические свойства;
4. разработать новые подходы к оценке физико-механических характеристик винтовых элементов САС.

Методы исследования. Результаты работы основаны на использовании базовых положений теории машин и механизмов, теории оптимизации, основных уравнений теории упругости САС.

Математическое моделирование и обработка результатов исследования выполнялись на персональном компьютере при помощи программного обеспечения Microsoft Excel, MATLAB и др. Качественные и количественные характеристики САС оценивались экспериментально.

Состояние вопроса и постановка задач исследования

Описанное устройство для производства плетеных изделий, предназначенное для изготовления торсионных подвесов ЧЭ приборов, может найти применение в магнитометрии, сейсмологии, геодезии, метеорологии, электротехнике и др., т.е. использоваться для производства торсионов ЧЭ высокочувствительных магнитометров, акселерометров, сейсмометров, наклономеров, микробарографов, гальванометров, а также в датчиках охранной сигнализации.

Известное устройство УИСАТ-1 позволяет изготавливать путем плетения из трех прядей торсионный подвес, диаметром не более 0,046 мм, с заранее заданными характеристиками (материалом, толщиной, структурой, плотностью плетения, модулем кручения, прочностью и др.), которые обладают свойствами упругой анизотропии.

Факторы, влияющие на характеристики продукта в процессе плетения: толщина, структура, предварительная закрутка, материал, скорость подачи и натяжение прядей, а также угол плетения.

Специфика и уникальность данного устройства в том, что в качестве сырья для плетения используется особый материал – филаменты кевларовых нитей (параарамидные волокна) диаметром 0,016 мм и длиной 400 мм.

На сегодняшний день данные торсионные подвесы используются в качестве

подвеса МЧЭ МСВ, входящего в состав геофизического комплекса GI-MTS-1 (СПбФ ИЗМИРАН). Главным достоинством МСВ с таким МЧЭ является регистрация магнитных полей и их вариаций в диапазоне частот 0–15 Гц со среднеквадратичным уровнем шумов не превышающим $1 [нТл/\sqrt{Гц}]$, при этом приборы менее чувствительны к изменению температуры и климатических факторов, обладают повышенной устойчивостью к динамическим нагрузкам [2].

Упругий торсионный подвес представляет собой САС из трех прядей (по одной нити в каждой пряди) и служит для создания оси вращения индикаторного магнита. Плотность плетения – 7 узлов/мм. Огибающая поперечного сечения упругого торсионного подвеса представляет собой эллипс с большей осью 0,046 мм и меньшей осью 0,033 мм; общая длина подвеса – 100 мм.

Внешний вид устройства УИСАТ-1 и фотографии упругого торсионного подвеса приведены на рис. 1.

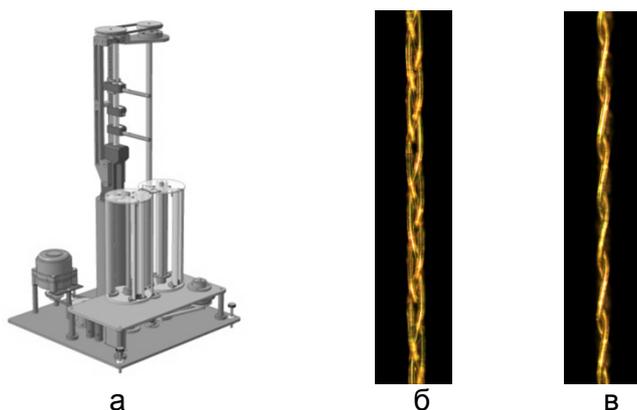


Рис. 1. Внешний вид устройства УИСАТ-1 (а); фотографии плетеных торсионных подвесов, две проекции: вид сверху (б), сбоку (в)

Известное устройство обладает следующими недостатками:

- нестабильность работы, обусловленная несогласованностью движений звеньев механизма плетения, связанная с формой переключателя (влияет на равномерность плетения);
- некоторая сложность в эксплуатации и настройке;
- недостаточная регулировка плотности плетения (для задания различных характеристик);
- недостаточно высокое быстродействие (составляющее не более 100 мм/час), связанное с конструктивными особенностями, заданными при проектировании устройства.

Перечисленные факторы влияют на качество торсионного подвеса, удобство эксплуатации механизма, его обслуживание и настройку, а также на быстродействие.

Структурными элементами механизма плетения торсионных подвесов являются:

- исполнительный механизм плетения;
- блок механизма сбора продукции;
- плетеный торсион (САС);
- механизмы привода.

Новые подходы к решению задачи об оценке физико-механических характеристик винтовых элементов САС

САС является одним из элементов синтеза механизма плетения.

Многослойные пружины, канаты, тросы, нити представляют собой объекты механики деформируемого твердого тела, которые моделируются как САС. На рис. 2

приведена типичная конструкция гибкого кабеля. Механические свойства винтовых составляющих этих конструкций определяются их физико-механическими характеристиками E_1 , G_1 , ν_1 , соотнесенными с геометрией подвижного репера ξ , η , τ (рис. 2). Механические свойства самих конструкций традиционно соотнесены с геометрией стержня – осью z и радиусом r (рис. 2). При механических испытаниях САС регистрируются линейные e и угловые θ деформации при различных граничных условиях, определяющих деформированное состояние: свободное и стесненное растяжение, свободное и стесненное кручение. В работах В.М. Мусалимова представлены уравнения, связывающие внешние силы и моменты с линейными и угловыми деформациями САС:

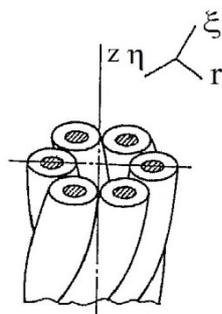


Рис. 2. Типичная конструкция САС

$$\left. \begin{aligned} \frac{P}{\pi R^2 E_1} &= A_{11}e + A_{12}\hat{\theta}; \\ \frac{M}{\pi R^3 E_1} &= A_{21}e + A_{22}\hat{\theta}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Здесь при A_{11} , A_{22} , $A_{12}=A_{21}$ – соответственно модули растяжения, кручения, растяжения-кручения; E_1 – модуль упругости САС; P – осевая нагрузка; M – скручивающий момент; R – радиус САС.

Введем следующие обозначения:

$$A_{11}E_1 = \alpha_{11}, \quad A_{12}E_1 = \alpha_{12}, \quad A_{21}E_1 = \alpha_{21}, \quad A_{22}E_1 = \alpha_{22}.$$

В указанных работах приведены также уравнения, связывающие экспериментально определенные модули с физико-механическими характеристиками винтовых составляющих САС:

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= G_1(9\varphi_1 + 18\varphi_2) - \frac{1}{2 - \nu_1} 9\varphi_2 E_1 + E_1 - 3\varphi_1 E_1; \\ \alpha_{12} &= -G_1(3\varphi_1 + 12\varphi_2) + \frac{1}{2 - \nu_1} 6\varphi_2 E_1 + \varphi_1 E_1; \\ \alpha_{22} &= G_1\left(\frac{\text{tg}^2 \alpha_0}{2} + 8\varphi_2\right) - \frac{1}{2 - \nu_1} 4\varphi_2 E_1, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\varphi_1 = 1 - 2\text{ctg}^2 \alpha_0 \ln \sec \alpha_0$; $\varphi_2 = \frac{1}{2} \sin^2 \alpha_0 - \varphi_1$; α_0 – угол наклона винтовых линий относительно оси цилиндра z ; E_1 , G_1 , и ν_1 – интегральные упругие постоянные САС.

Соотношения (2) являются слабообусловленной нелинейной алгебраической системой уравнений относительно интегральных упругих постоянных E_1 , G_1 , и ν_1 .

Ранее для решения системы уравнений были использованы вероятностные методы и методы на основе детерминированного подхода. В настоящей работе для определения интегральных упругих постоянных САС разработаны оригинальные оптимизаторы – методы поиска оптимума (программы «Парабола»; «Гребень»; «Координатная»;

«Симплекс»).

В работе в качестве модулей растяжения α_{11} , растяжения-кручения (коэффициент влияния) α_{12} , кручения α_{22} использованы данные систематических исследований по механике кабеля. Они приняты в качестве эталонных при тестировании методов оптимизации.

На рис. 3 для $\nu_1=0,3$ приведены оценки, полученные с помощью алгоритмов, описанных в работе методов. Угол наклона к оси анизотропии упруго-эквивалентных спиралей $\alpha_0=15^\circ$. Результат: $E_1=2,4465 \cdot 10^9$ Па, $G_1=7,2913 \cdot 10^8$ Па.

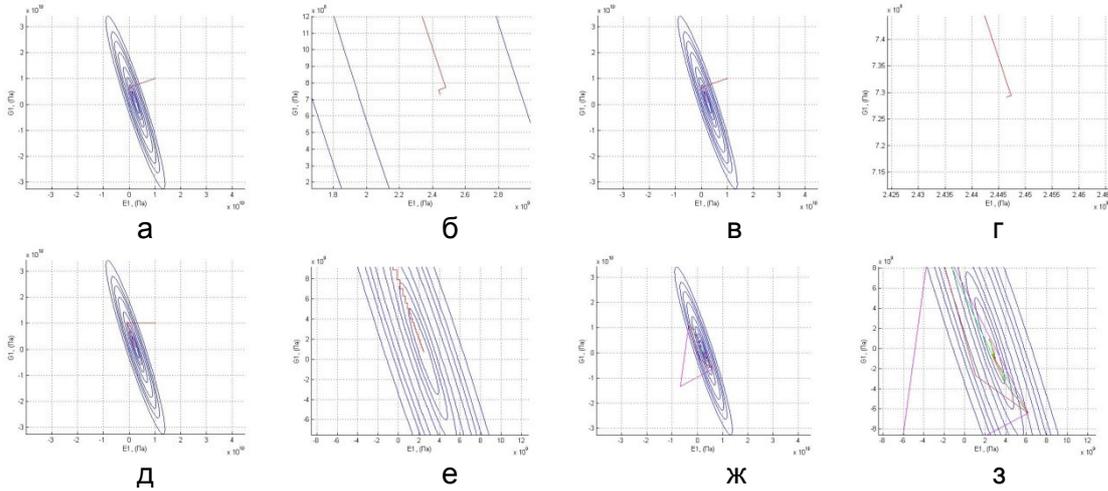


Рис. 3. Графическое отображение работы программ оптимизации: «Парабола» (а); «Гребень» (в); «Координатная» (д); «Симплекс» (ж); увеличенное графическое отображение работы программ оптимизации: «Парабола» (б); «Гребень» (г); «Координатная» (е); «Симплекс» (з)

Следует отметить, что с помощью оптимизаторов вычисляются все значения физико-механических характеристик E_1, G_1 , для заданных ν_1 [3, 4].

Для изотропных тел выполняется соотношение $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$, а для анизотропных не

выполняется, так как E_1, G, ν_1 независимы, т.е. для изотропных тел $\frac{2G}{E} = \frac{1}{1+\nu}$, для анизотропных $\frac{2G}{E} = m$. Для эталонных рассчитанных значений при $\nu_1=0,3$, получаем:

$$\frac{2G}{E} = \frac{1}{1+\nu} = 0,769 \text{ и } \frac{2G}{E} = m = 0,655 \text{ соответственно. Следовательно, } \frac{1}{1+\nu} \neq m.$$

На рис. 4 показан характер изменения отношения $2G/E_1$ в функции ν_1 и показана соответствующая точка для изотропного тела при $\nu_1=0,3$.

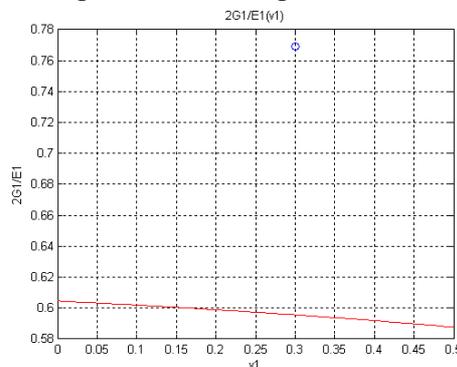


Рис. 4. Характер изменения отношения $2G_1/E_1$ в функции ν_1

Приведенные результаты расчетов для САС сделаны на примере исходных

многочисленных экспериментальных данных кабеля, для каждого α_0 они являются стандартными (безразмерными характеристиками) и взяты за основу оценки модулей кевларовых торсионных подвесов. Используем приведенную на рис. 4 закономерность, из нее следует, с учетом данных для исходных нитей $E=100 \cdot 10^9$ Па,

$$G = \frac{mE}{2} = \frac{0,655 \cdot 100}{2} \cdot 10^9 = 0,3275 \cdot 10^{11} \text{ Па} = 33 \text{ ГПа}.$$

Развиты новые подходы к оценке физико-механических характеристик винтовых элементов САС. Показано, что предложенные методы оптимизации позволяют эффективно решать слабообусловленные нелинейные системы алгебраических уравнений, эти методы были использованы при оценке физико-механических характеристик торсионов.

Пути оптимизации механизма для плетения торсионного подвеса ЧЭ МСВ

Переход к синтезу механизма ориентирован на:

- устранение нестабильности работы, обусловленной несогласованностью движений звеньев механизма плетения, связанной с формой переключателя (влияет на равномерность плетения);
- устранение некоторой сложности в эксплуатации и настройке;
- повышение быстродействия (составляющее не более 100 мм/час).

Перечисленные факторы влияют на качество торсионного подвеса, удобство эксплуатации механизма, его обслуживания и настройку, а также на быстродействие.

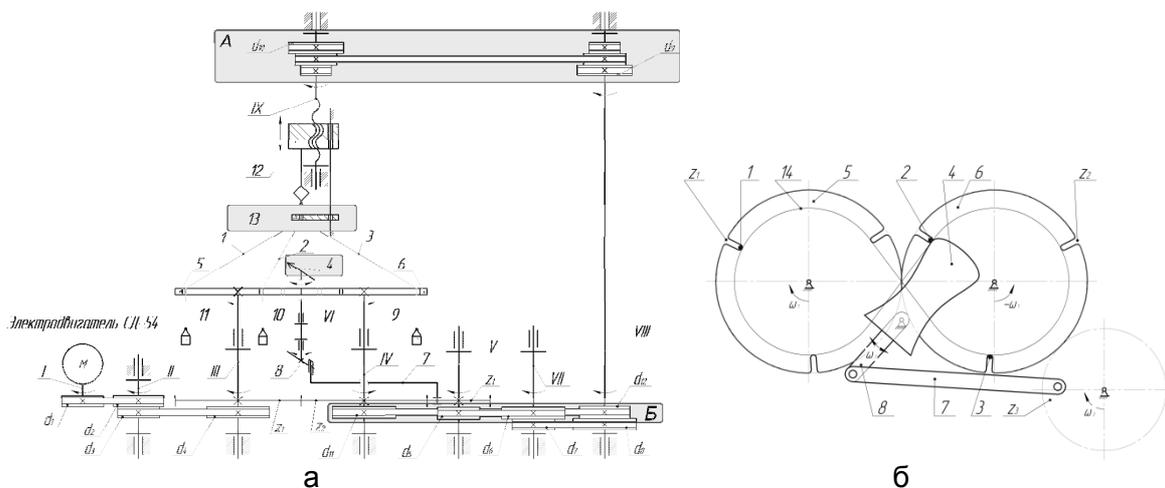


Рис. 5. Кинематическая схема устройства (а) и исполнительный механизм плетения с оптимизированным профилем переключателя (б): 1–3 – пряжи; 4 – переключатель; 5, 6 – диски; 7 – шатун; 8 – рычаг стрелки; 9–11 – грузы; 12 – гайка; 13 – направляющая; 14 – оптимальная траектория движения прядей; I–IX – валы; z_1 – z_3 – зубчатые колеса; d_1 – d_{12} – шкивы, А – вариатор, Б – реверс

На рис. 5 изображена кинематическая схема синтезированного механизма плетения и представлен исполнительный механизм плетения с оптимизированным профилем переключателя. Блок механизма сбора продукции (торсиона) представляет собой захват, фиксирующий начала прядей и обладающий способностью вертикального перемещения относительно исполнительного механизма плетения. Блок механизма сбора продукции (торсиона) снабжается направляющей с отверстием 13, стягивающей пряди, которая имеет два возможных положения (по высоте), данная направляющая позволяет изменять угол плетения, но этого недостаточно для регулирования плотности плетения. Также на оси винта, приводящего в движение гайку (на которой расположен захват, фиксирующий начала прядей), располагают вариатор А, позволяющий изменять

скорость перемещения захвата относительно механизма плетения. Вариатор А выполнен в виде ведущего трехступенчатого шкива d_9 , расположенного на выходном валу VII механического редуктора и ведомого трехступенчатого шкива d_{10} , установленного на оси винта IX, приводящего в движение гайку. Внесенные изменения выделены на рисунке серыми блоками.

Блок механизма сбора продукции оснащен реверсом Б (переключателем направления перемещения), осуществляющим переключение перемещения гайки, и используется для возврата блока механизма сбора в исходное (начальное) положение. Реверс Б выполнен в виде механического редуктора, состоящего из шкивов d_{11} и d_{12} .

Критическим элементом в механизме плетения является блок исполнительного механизма, который осуществляет перекидку нитей, поэтому принято решение оптимизировать профиль переключателя 4 – основного элемента плетения. Форма рабочей поверхности (конструктивного профиля) переключателя получена «геометрическим» способом построения профилей кулачковых механизмов. Опираясь на теорию машин и механизмов, а именно, область анализа и проектирования кулачковых механизмов, была решена задача синтеза кулачкового механизма при условии, что задан теоретический (центральной) профиль, который в системе координат кулачка описывает центр сечения рабочего профиля пряжи при движении ее по конструктивному профилю кулачка. Траектория движения пряжей представляет собой замкнутую линию в виде цифры восемь, размерные характеристики определяются конструкцией.

Форма рабочей поверхности переключателя, введение направляющей с отверстием, стягивающим пряжи, вариатора и реверса, влияют на достижение ожидаемого результата. Изменение формы рабочей поверхности основного элемента плетения – переключателя, позволяет избежать проблем, связанных с нестабильностью работы исполнительного механизма плетения, который осуществляет перекидку нитей, обусловленных несогласованностью движений механизма плетения, что влияет на равномерность плетения.

Введение вариатора и направляющей с отверстием, стягивающим пряжи, в конструкцию устройства дает возможность дополнительной регулировки плотности плетения, что, в свою очередь, упрощает настройку устройства и позволяет повысить качество торсионного подвеса. Использование вариатора также позволяет повысить быстродействие в процессе плетения и в режиме реверса.

Для повышения быстродействия внесены изменения в характеристики механического редуктора (d_1-d_8 , z_1-z_3) – изменены передаточные отношения шкивов.

Введение вариатора, реверса и внесение изменений в характеристики механического редуктора позволяют упростить эксплуатацию и обслуживание устройства за счет полуавтоматического ускоренного возврата блока механизма сбора в исходное (начальное) положение и повысить быстродействие механизма плетения в целом [5].

Исследование кинематики и динамики исполнительного механизма плетения

Для исследования динамики исполнительного механизма плетения осуществлено моделирование в среде Simulink (пакет SimMechanics, MATLAB). Математическая модель записана в виде структурной модели SimMechanics с использованием блоков.

На рис. 6 представлена модель SimMechanics исполнительного механизма плетения.

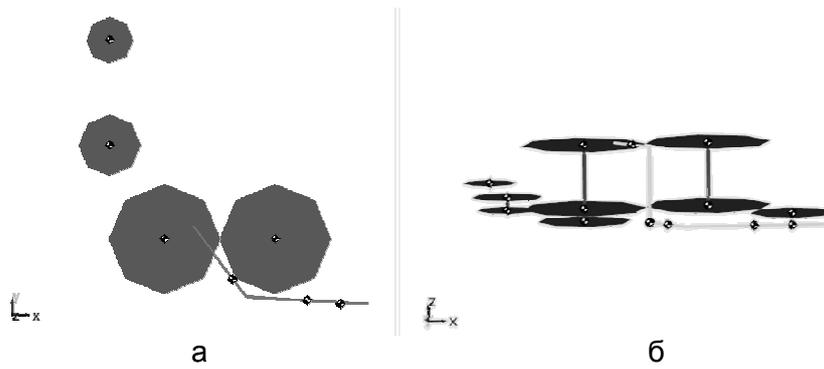
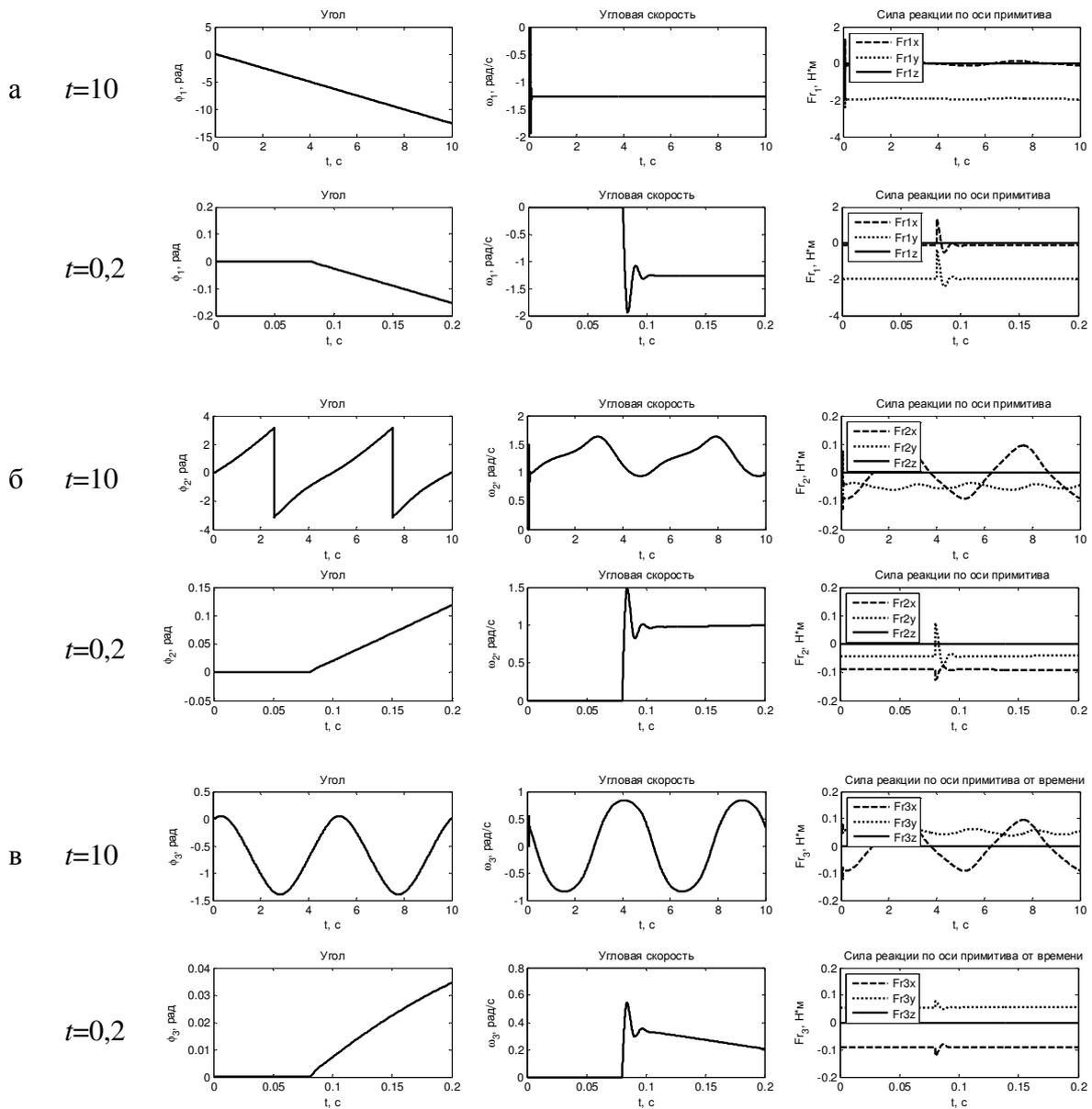


Рис. 6. Модель SimMechanics исполнительного механизма плетения вид сверху (плоскость xy) (а) и произвольный вид (б)

На рис. 7 представлены результаты расчетов моделирования исполнительного механизма плетения с синхронным двигателем в среде SimMechanics.



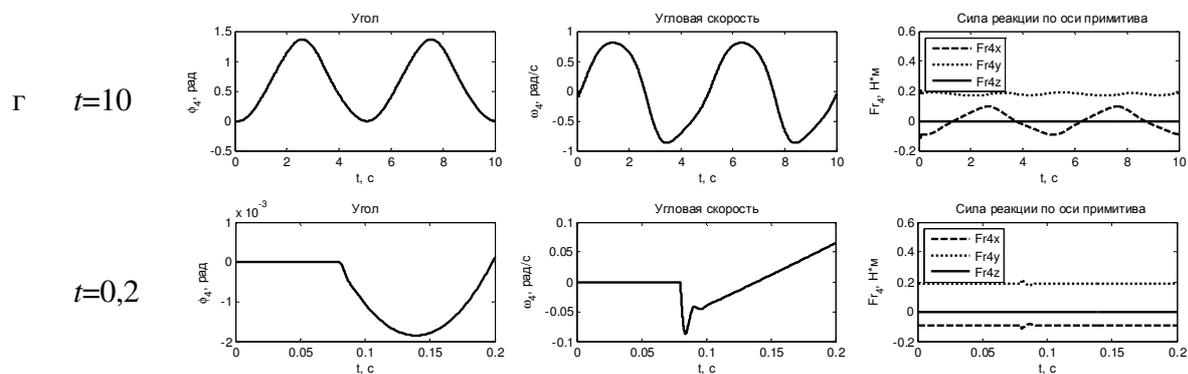


Рис. 7. Данные поступившие с: датчика 1 (кривошип) (а); датчика 2 (шатун) (б); датчика 3 (рычаг переключателя) (в); датчика 4 (переключатель) исполнительного механизма плетения (г)

Представлена модель исполнительного механизма плетения с кинематическим приводом и с синхронным двигателем, выполненная с помощью пакета прикладных программ MATLAB (Simulink / SimMechanics). Получены основные законы изменения во времени угла, угловой скорости, силы реакции относительно примитива (по осям x, y, z). На рис. 10 у модели с синхронным двигателем в течение короткого промежутка времени (0,11 с) наблюдается переходной процесс [6].

Структура плетеных кевларовых торсионных подвесов чувствительных элементов приборов

Результаты измерений шести образцов (филаментов исходных нитей, торсионных подвесов) с помощью Микровизора μ Vizo-MET-222 и микроскопа Meiji Techno IM7200 приведены в таблице.

Таблица. Результаты измерений

Объект	Микровизор μ Vizo-MET-222		Микроскоп Meiji Techno IM7200	
	Результат	Среднее значение	Результат	Среднее значение
1 филамент	16,4 мкм	16,4 мкм	16,0 мкм	15,8 мкм
	16,6 мкм		15,5 мкм	
	16,2 мкм		16,0 мкм	
Торсионный подвес (малая ось)	32,4 мкм	32,6 мкм	33,2 мкм	32,7 мкм
	32,4 мкм		32,4 мкм	
	33,1 мкм		32,6 мкм	
Торсионный подвес (большая ось)	46,0 мкм	46 мкм	46,1 мкм	46,1 мкм
	46,8 мкм		45,0 мкм	
	45,2 мкм		47,3 мкм	
Торсионный подвес (плотность плетения)	6,9 узлов/мм	6,9 узлов/мм	6,9 узлов/мм	7,0 узлов/мм
	6,8 узлов/мм		7,0 узлов/мм	
	6,9 узлов/мм		7,2 узлов/мм	

Приведены результаты измерений шести образцов (филаментов исходных нитей, торсионных подвесов), определены геометрические характеристики спирально-анизотропного кевларового торсионного подвеса, а именно, плотности плетения и размеры поперечного сечения вдоль большой и малой оси. А также произведена оценка размеров поперечного сечения филамента исходной нити. На основании проведенных измерений подтверждена высокая стабильность геометрических характеристик

спирально-анизотропного кевларового торсиона, изготовленного с помощью механизма для плетения подвесов ЧЭ приборов. Достоверность результатов подтверждена использованием двух измерительных систем (Микровизора μ Vizo-MET-222 («ЛОМО») и микроскопа Meiji Techno IM7200).

Основные выводы и результаты работы

- Произведен анализ механизма плетения устройства УИСАТ-1.
- Построена динамическая модель механизма плетения с учетом влияния торсионного подвеса.
- Исследована геометрия образцов, полученных с помощью механизма плетения, и их физико-механические свойства.
- Разработаны новые подходы к оценке физико-механических характеристик винтовых элементов САС.

Цель работы, заключающаяся в синтезе механизма плетения с учетом особенностей структуры торсионов, моделируемых как эквивалентные спирально-анизотропные стержни, была достигнута.

Литература

1. Kopytenko Yuri A., Sergushin Pavel A., Petrishchev Maksim S., Levanenko Valery A., Perechesova Anna D. Device for Manufacturing Torsion Bars with Helical Anisotropy UISAT-1 // Key Engineering Materials (2010). – Trans Tech Publications, Switzerland. – 2010. – V. 437. – P. 625–628.
2. Sergushin P., Perechesova A., Petrishchev M. The torsion magnetic variometer with Kevlar-hanger-based sensor // Proceedings of ISMTII-2009. – St. Petersburg, 29 June – 2 July 2009. – V. 4. – P. 411–414.
3. Perechesova A. Calculation of Elastic Constants of the Torsion Bars with Helical Anisotropy using the methods of Optimization theory // Proceedings of the 23rd International Congress of Theoretical and Applied Mechanics. – Beijing (China), 2012. – SM04-050.
4. Мусалимов В.М., Заморуев Г.Б., Перечесова А.Д. Расчет физико-механических характеристик винтовых элементов спирально-анизотропных стержней // Изв. вузов. Приборостроение. – 2012. – Т. 55. – № 6. – С. 24–30.
5. Перечесова А.Д. Оптимизация устройства для изготовления торсионных подвесов чувствительных элементов приборов УИСАТ-1 // Сборник научных трудов SWorld. Материалы международной научно-практической конференции «Перспективные инновации в науке, образовании, производстве и транспорте '2012». – Одесса, КУПРИЕНКО, 2012. – Т. 7. – Вып. 2. – С. 47–53.
6. Перечесова А.Д. Моделирование динамики исполнительного механизма УИСАТ-1 в среде SimMechanics // XXXIX неделя науки СПбГПУ: Материалы международной научно-практической конференции. – СПб, 6–11 декабря 2010. – Ч. XXI. – СПб: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. – 89 с.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ФАЗОВОГО РАЗДЕЛЕНИЯ В СМЕСИ НЕСОВМЕСТИМЫХ ПОЛИМЕРОВ

А.В. Подшивалов¹, В.В. Зуев¹, С.В. Бронников²

(¹Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики; ²Институт высокомолекулярных соединений РАН)

Научный руководитель – д.х.н., профессор В.В. Зуев

(Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики)

Методом электронной микроскопии исследована морфология смеси полиэтилен низкой плотности (ПЭНП)/полиамид-6 (ПА-6) в соотношении 75%/25% с добавками эмульгатора и совместителя. Гистограммы размера частиц фазы ПА-6, полученные при статистической обработке микрофотографий смеси, описаны с использованием модели агрегации, построенной в рамках термодинамики необратимых процессов. Установлено, что при смешении компонентов смеси происходит диспергирование частиц ПА-6 в фазе ПЭНП и их последующая коалесценция. Обнаружено влияние количества введенных в смесь совместителя и эмульгатора на средний размер частиц ПА-6 и механические свойства смеси.

Ключевые слова: морфология, смесь полимеров, совместитель, эмульгатор, термодинамика необратимых процессов

Введение

В настоящее время актуальным направлением получения новых полимерных материалов технического назначения является создание полимерных многокомпонентных смесей, обладающих требуемыми эксплуатационными свойствами и низкой стоимостью. Целью настоящей работы являлось изучение морфологии смеси коммерческих полимеров: полиэтилена низкой плотности (ПЭНП) и полиамида-6 (ПА-6) в соотношении 75%/25%. Для улучшения совместимости полимеров в смесь вводили добавки: эмульгатор – органически модифицированную глину (20А) и совместитель – блок-сополимера стирола, этиленбутена и стирола с привитым малеиновым ангидридом (SEBS-g-MA).

Экспериментальная часть

В качестве метода исследования была использована электронная микроскопия с последующим статистическим анализом электронно-микроскопических фотографий реплик сколов смесей и аналитическим описанием гистограмм размера частиц минорной фазы с использованием принципов необратимой термодинамики.

Электронные микрофотографии смеси полимеров были подвергнуты сегментированию в графическом редакторе. Далее сегментированные микрофотографии анализировались статистически с использованием программного обеспечения Image Tool 3.0, в результате чего были получены гистограммы размера частиц фазы ПА-6. Для аналитического описания полученных гистограмм был использован алгоритм, построенный на использовании модели агрегации [1].

В основе модели агрегации лежат принципы необратимой термодинамики, используемые для описания эволюции микроструктуры, которая в каждый момент времени рассматривается как последовательность ограниченных квазиравновесных состояний. В рамках модели статистическое распределение размера частиц $h(s)$ фазы ПА-6 имеет вид [1]:

$$h(s) = \sum_{i=1}^N a_i s_i^2 \exp\left(-\frac{s_i \Delta u_{0i}}{kT}\right), \quad (1)$$

где a_i – нормировочный параметр; s_i – площадь частиц в i -ом ансамбле; Δu_{0i} – энергия агрегации i -го ансамбля; T – абсолютная температура; N – количество статистических ансамблей; i – номер статистического ансамбля.

Аналитическое описание гистограмм позволяет определить средний размер частиц $\langle s_i \rangle$ как нормированное математическое ожидание $M s_i$:

$$\langle s_i \rangle = M s_i = \frac{\int_0^{\infty} s_i h(s_i) ds}{\int_0^{\infty} h(s_i) ds} = \frac{3kT}{\Delta u_{0i}}. \quad (2)$$

Результаты и их обсуждение

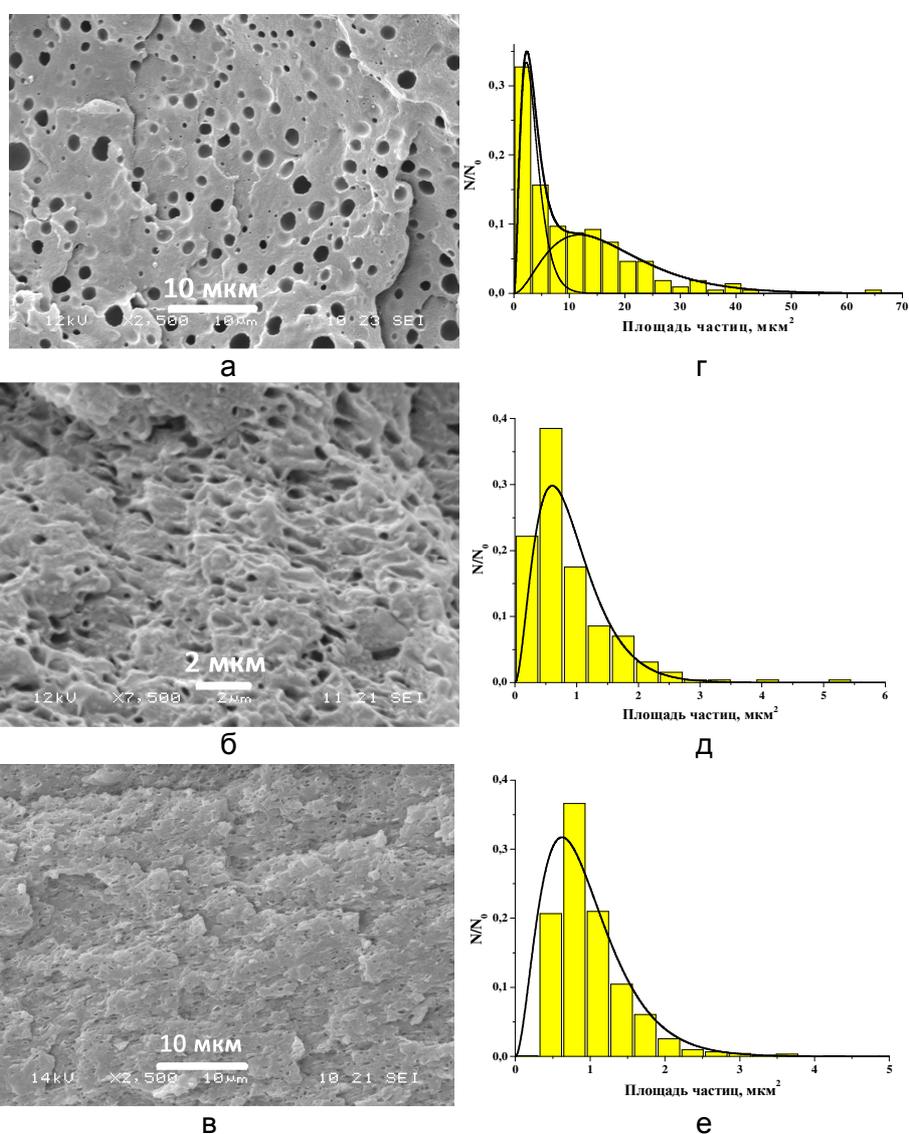


Рис. 1. Микрофотографии реплик сколов смесей ПЭНП/ПА-6 (75%/25%) (а); ПЭНП/ПА-6/20А (75%/25%/5%) (б) и ПЭНП/ПА-6/20А (75%/25%/10%) (в), а также соответствующие им статистические распределения размера частиц ПА-6 (г, д, е), аналитически описанные с использованием уравнения (1)

На рис. 1 приведены микрофотографии протравленных муравьиной кислотой реплик скола смесей ПЭНП/ПА-6, ПЭНП/ПА-6 с добавками 20А в количестве 5‰ и 10‰, а также статистические распределения площади частиц минорной фазы (ПА-6), описанные с использованием модели обратимой агрегации [1]. На рис. 1, а–в, темные области представляют собой фазу ПА-6, а светлая область – фазу ПЭНП.

Для описания статистических распределений, приведенных на рис. 1, д, е, использовали мономодальное распределение (уравнение (1), $N=1$), а для описания статистического распределения, приведенного на рис. 1, г – бимодальное распределение (уравнение (1), $N=2$). На рис. 1, г, тонкие линии показывают индивидуальные (модовые) распределения, а толстая линия показывает суммарное распределение.

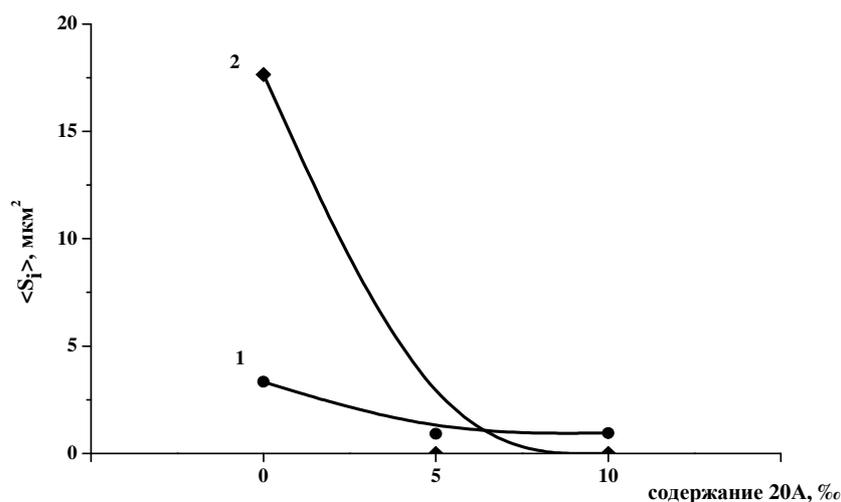


Рис. 2. Средняя площадь диспергированных (1) и коалесцированных (2) частиц фазы ПА-6 в зависимости от содержания эмульгатора 20А в смеси состава ПЭНП/ПА-6/20А

Из работ [2–4] известно, что в процессе смешения несовместимых полимеров обычно протекают два процесса: диспергирование частиц минорной фазы и их последующая коалесценция. Таким образом, становится ясным физический смысл частиц фазы ПА-6, образующих два статистических ансамбля: это диспергированные и коалесцированные частицы.

На рис. 2 представлена зависимость средней площади диспергированных и коалесцированных частиц фазы ПА-6, вычисленной с использованием уравнения (2), от количества добавленного эмульгатора 20А.

Как видно из рис. 2, при добавке к смеси полимеров эмульгатора средний размер диспергированных частиц фазы ПА-6 уменьшается, а коалесцированные частицы исчезают полностью. Из литературных данных [5, 6] известно, что уменьшение среднего размера частиц и отсутствие их коалесценции повышает прочность и модуль Юнга смеси полимеров при испытаниях на растяжение.

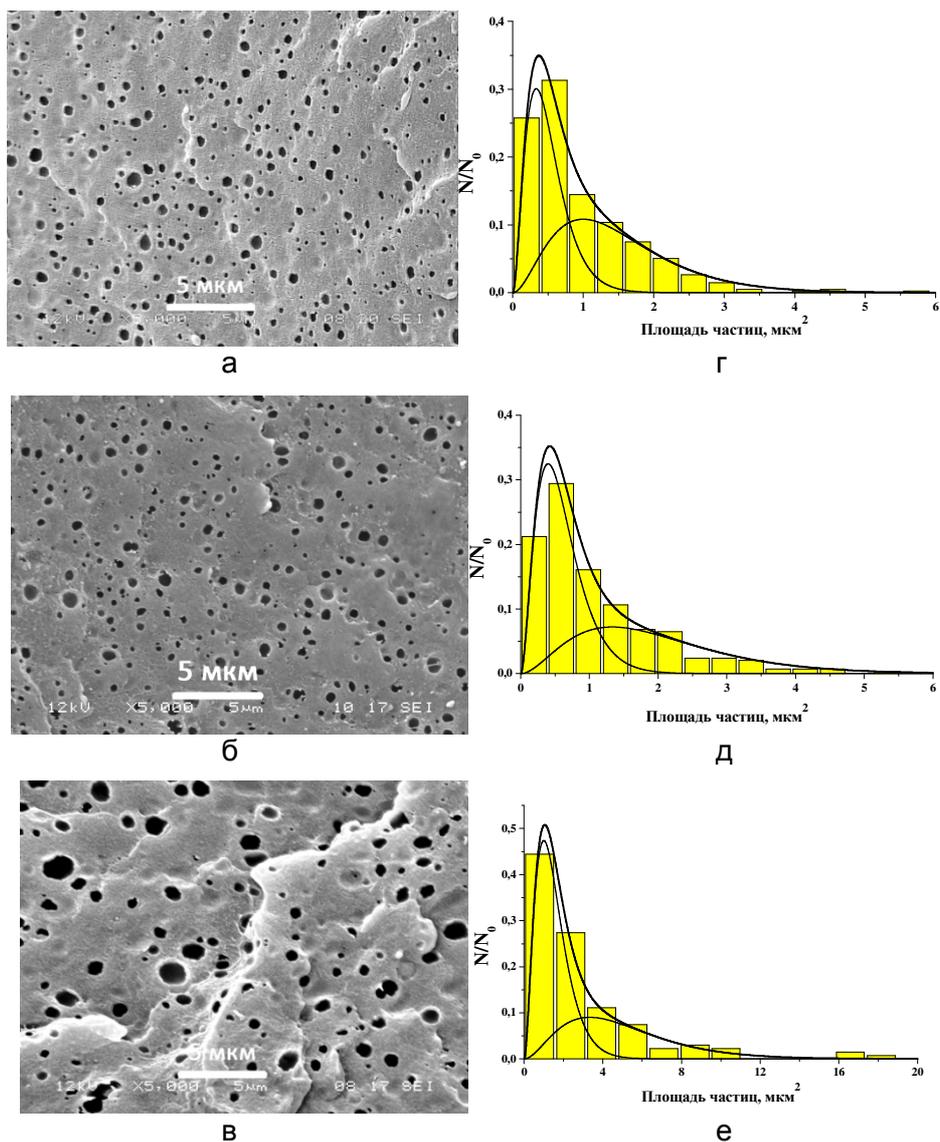


Рис. 3. Микрофотографии реплик смесей ПЭНП/ПА-6/SEBS-g-MA (75%/25%/2%) (а), ПЭНП/ПА/SEBS-g-MA/20A (75%/25%/2%/0,22%) (б) и ПЭНП/ПА/SEBS-g-MA/20A (75%/25%/2%/1,33%) (в), а также соответствующие им статистические распределения размера частиц минорной фазы (ПА-6) (г–е), аналитически описанные с использованием уравнения (1) при $N=2$

Аналогичным образом анализировали микрофотографии смеси ПЭНП/ПА-6 с добавками не только эмульгатора 20А, но и совместителя SEBS-g-MA (рис. 3). Видно, что использование уравнения (1) оказалось успешным при $N=1$. С использованием формулы (2) была определена средняя площадь частиц фазы ПА-6, зависимость которой от содержания добавок приведена на рис. 4.

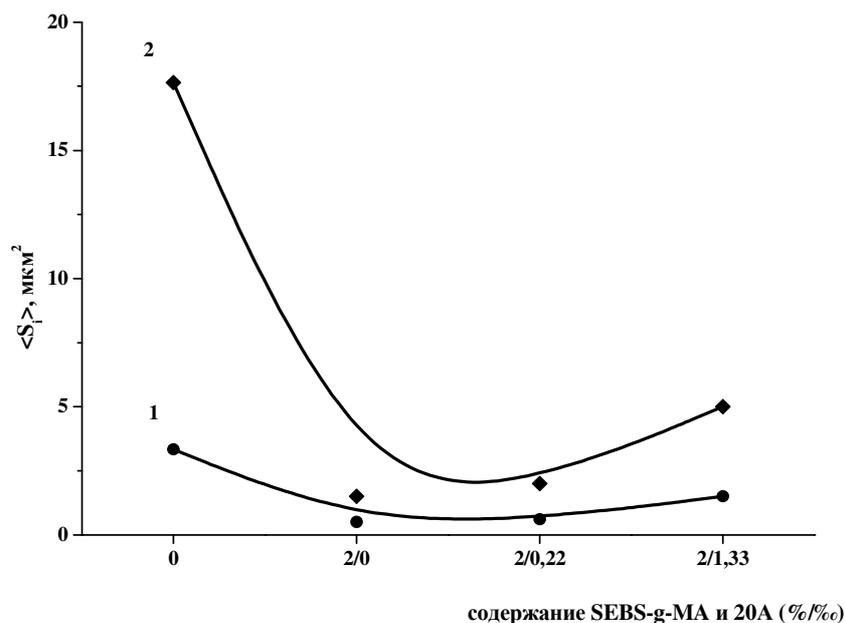


Рис. 4 Средняя площадь диспергированных (1) и коалесцированных (2) частиц фазы ПА-6 в зависимости от содержания совместителя SEBS-g-MA и эмульгатора 20A в смеси состава ПЭНП/ПА-6/SEBS-g-MA/20A

Как следует из рис. 4, добавка совместителя SEBS-g-MA резко снижает средний размер как диспергированных, так и коалесцированных частиц фазы ПА-6, в то время как совместная добавка SEBS-g-MA и 20A немного увеличивает его. Таким образом, совместное использование совместителя и эмульгатора при смешении ПЭНП с ПА-6 не предотвращает коалесценцию частиц фазы ПА-6. Согласно литературным данным [5, 6], смеси ПЭНП/ПА-6 при наличии совместителя и эмульгатора обладают хорошими ударопрочными свойствами.

Заключение

В результате выполненных исследований установлено, что морфологию смеси ПЭНП/ПА-6 с добавками эмульгатора и совместителя можно описать с использованием принципов термодинамики необратимых процессов. Показано, что в процессе смешения полимеров частицы ПА-6 диспергируются, а затем коалесцируют в фазе ПЭНП. Установлено, что введение эмульгатора в количестве не менее 5% улучшает диспергирование частиц ПА-6 и подавляет процесс их коалесценции, что способствует улучшению механических свойств смеси на растяжение. В то же время, совместное использование эмульгатора и совместителя также улучшает диспергирование частиц ПА-6, но не препятствует их коалесценции, что способствует улучшению ударных механических свойств смеси.

Литература

1. Kilian H.-G., Bronnikov S., Sukhanova T. Transformations of the micro-domain structure of polyimide films during thermally induced chemical conversion: characterization via thermodynamics of irreversible processes // J. Phys. Chem. B. – 2003. – V. 107. – № 49. – P. 13575–13582.

2. Fortelny I., Zivny A., Juza J. Coarsening of the phase structure in immiscible polymer blends: Coalescence or Ostwald ripening? // J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys. – 1999. – V. 37. – P. 181–187.
3. Fellahi S., Favis B.D., Fisa B. Morphological stability in injection-moulded LDPE/PA-6 blends // Polymer. – 1996. – V. 37. – № 13. – P. 2615–2626.
4. Fillipone G., Netti P.A., Acierno D. Microstructural evolutions of LDPE/PA-6 blends by rheological and rheo-optical analyses: Influence of flow and compatibilizer on break-up and coalescence processes // Polymer. – 2007. – V. 48. – P. 564–573.
5. Filippi S., Dintcheva N.T., Scaffaro R., La Mantia F.P., Polacco G., Magagnini P. Effects of organoclay on morphology and properties of nanocomposites based on LDPE/PA-6 blends without and with SEBS-g-MA compatibilizer // Polym. Eng. Sci. – 2009. – V. 49. – № 6. – P. 1187–1197.
6. Chow W.S., Ishak Z.A., Ishiaku U.S., Karger-Kocsis J., Apostolov A.A. The effect of organoclay on the mechanical properties and morphology of injection-molded polyamide 6/polypropylene nanocomposites // J. Appl. Polym. Sci. – 2004. – V. 91. – P. 175–189.

УДК 004.67

СБОР, ПЕРЕДАЧА, ХРАНЕНИЕ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ДАННЫХ С РАЗЛИЧНЫХ ПРИБОРОВ УЧЕТА

С.О. Попов, А.О. Олейников, Н.Ю. Пигасов, П.Д. Золов, Е.В. Черный

**Научные руководители: д.т.н., профессор В.Г. Парфенов, к.т.н., доцент Д.И. Муромцев,
ассистент Р.А. Елизаров**

В работе описано создание умной среды, а именно разработка инфраструктуры по обработке разнородных данных и управлению системами. В том числе рассмотрены устройства и встроенные системы, единый и простой в реализации протокол по объединению систем, а также личные кабинеты пользователей.

Цель работы

В настоящее время на рынке присутствует множество систем домашней автоматизации («умный дом»), систем сбора показаний с приборов учета, систем позиционирования автотранспорта и других систем удаленного администрирования и контроля. Многие из этих систем строятся независимо друг от друга, что не позволяет в полной мере использовать возможности по экономии различных ресурсов, а также создает проблемы при разработке новых сервисов из-за необходимости создания каждого сервиса с нуля.

Основной целью данного проекта являлось построение централизованной, гибкой и расширяемой системы для накопления данных и контроля над объектами. Данная система позволяет быстро создавать новые сервисы, например, по автоматическому управлению освещением на улицах, поскольку она позволит разработчикам быстро выпускать новые продукты, минуя проблему хранения и обеспечения безопасности данных. Также значительно облегчится интеграция с уже существующими решениями и создание интеллектуальных алгоритмов управления.

Актуальность

Компьютеризация, уменьшение стоимости и увеличение производительности встраиваемых вычислительных машин приводит к расширению круга возможных применений компьютеров в повседневной жизни. При этом сейчас встроенные системы

почти отсутствуют в быту человека, несмотря на их широкий потенциал. Это в том числе обусловлено дороговизной разработки каждой отдельно взятой системы.

Стоит отметить, что создание подобных разработок является одним из приоритетных направлений развития экономики и активно поддерживается правительством Российской Федерации (РФ), а именно приказом президента РФ от 7 июля 2011 г. № 899 о приоритетных направлениях развития науки, технологий и техники в РФ. Данные разработки обеспечивают необходимую базу для мониторинга систем, на основе получаемых от них данных можно делать выводы об их энергоэффективности.

Новизна

Новизной системы является применение осмысленного семантического подхода к получению и хранению данных, что позволяет сделать систему более расширяемой и гибкой, предоставив возможность подключения и использования множества разнообразных устройств. Семантический подход уже с успехом используется в сети Интернет, что позволяет хранить веб-страницы в виде, одинаково пригодном и удобном для восприятия, как человеком, так и компьютерной техникой. Таким образом, с применением семантического подхода становится возможным создание сервиса по сбору, хранению и предоставлению данных для широкого круга генерирующих данные устройств.

Важной особенностью является возможность использования мобильных устройств, получивших широкое распространение в последнее время, для получения информации и управления предлагаемой системой.

Характеристика аналогов

Аналогичным сервисом можно назвать <http://cosm.com/>, он предоставляет возможность отправки данных и просмотра графиков их значений (рис. 1). Однако данный сервис недостаточно гибок для решения поставленной задачи по быстрой и удобной интерпретации данных, получаемых с устройств.



Рис. 1. Пример графика энергопотребления. Данные присланы контроллером, сделанным с использованием собственных разработок и программ. Текущая мощность 240 Вт

Постановка задачи

Задача проекта состоит в построении масштабируемого Интернет-сервиса и коробочных устройств к нему.

Коробочные устройства должны быть максимально простыми в установке и не требовать программирования. В стандартном случае устройство должно просто устанавливаться на DIN-рейку и не требовать настройки. Если требуется сменить какие-либо настройки, то в устройстве должен быть предусмотрен внутренний сайт для корректировки настроек, но он должен быть не сложнее настройки роутера, чтобы с настройкой мог справиться системный администратор без навыков программирования.

Благодаря описанному выше семантическому подходу, сервис должен обеспечивать возможность подключения дополнительных внешних баз данных с целью организации сторонних сервисов (рис. 2), примерами которых могут являться:

- сервис обработки информации со счетчиков электроэнергии и передачи получаемой статистики электрогенерирующим организациям с целью более эффективного расходования ресурсов;
- сервис автоматического предоставления счетов за потребление ресурсов;
- сервис охраны и мониторинга систем;
- сервис прогнозирования действий пользователя, основой которого является анализ данных с подключенных к системе устройств с целью оптимизации взаимодействия пользователя и системы;
- сервис, обеспечивающий эффективное взаимодействие внешних систем. Примером могут служить автоматические роботы-уборщики, которые будут работать, только когда человека нет дома, или система кондиционирования, которая не будет работать, когда открыто окно.

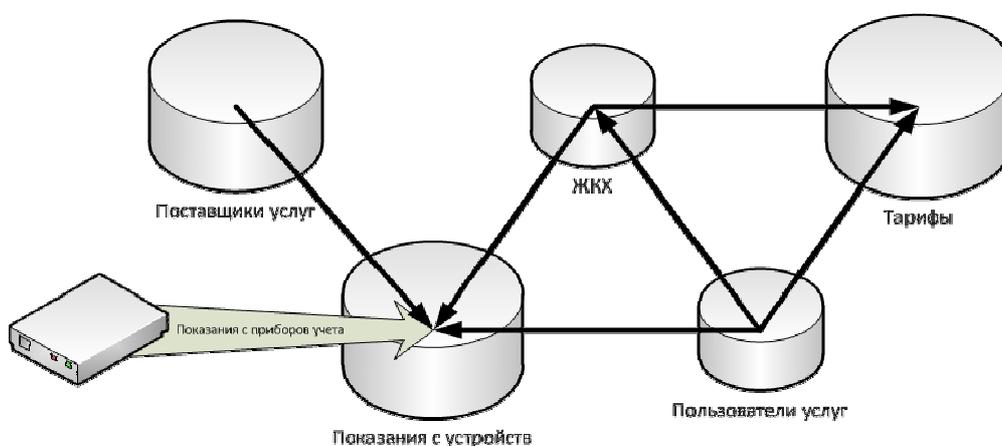


Рис. 2. Пример взаимодействия баз данных с целью оптимизации и обеспечения прозрачности расходования ресурсов

Методы исследования



Рис. 3. Малый электрический стенд

Примером реализации и демонстрации системы является малый электрический стенд (рис. 3), выполненный в переносимом корпусе и оснащенный точкой доступа Wi-Fi, который предоставляет возможность управлять четырьмя розетками и считывать показания со счетчика. Со счетчика считывается время и дата, показания тарифов,

текущая мощность нагрузки. На контроллере имеется сайт управления, через который и осуществляется работа со стендом.

В качестве контроллера используется ATmega 2560. Связь с интернетом обеспечивается с помощью схемы WizNet 5100. Для соединения со счетчиками и между контроллерами используются интегральные схемы производства Maxim IC. Для связи со счетчиком производства ЗАО «Электротехнические заводы «Энергомера» используются платы собственной разработки, произведенные в ООО «Резонит».

Ожидаемые и полученные результаты

В ближайшее время планируется завершение работ по следующим направлениям.

- Разработка масштабируемого хранилища получаемых с устройств данных с применением семантических технологий (рис. 4).
- Создание сайта с шаблонами для отображения получаемой информации.
- Изучение возможности использования промышленного протокола MTConnect (<http://www.mtconnect.org/>) в качестве протокола обмена данными между контроллерами и серверами хранения данных.
- Разработка платы для корпусов D4MG с целью организации более удобной сборки устройств и монтажа системы «умный дом» на DIN-рейку.

По завершению реализации станет возможным серийное коробочное производство и повсеместное внедрение системы. Система сможет найти себе применение, как у частного лица, так и у организаций, например в ЖКХ для сбора данных с приборов учета. Система позволит производить мониторинг состояния других систем, что даст возможность оптимизации расхода различных ресурсов.

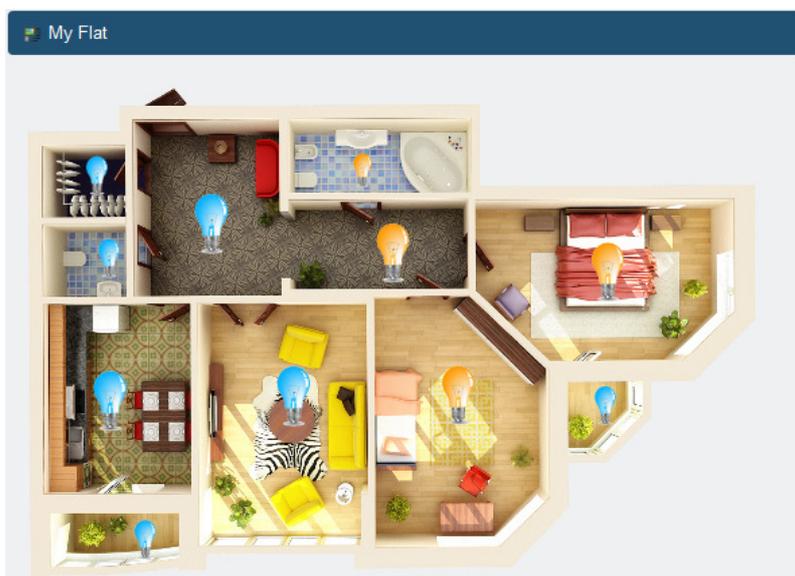


Рис. 4. Пример пользовательского интерфейса для управления освещением

Экономическая эффективность

Использование коробочных продуктов и гибкой системы сбора данных позволит:

- сэкономить средства на установке и наладке оборудования за счет использования подготовленных серийных продуктов;
- сократить затраты, в том числе временные, на разработку новых устройств за счет использования единой схемы сбора данных с устройств и общего подхода к их представлению пользователю;

- привлекать к работе менее высокооплачиваемый персонал, за счет использования привычных системному администратору или электрику способов монтажа и настройки. Установка устройства не должна быть сложнее настройки роутера, который присутствует при конфигурировании сети Интернет в обычной квартире;
- продавать устройства в универсальных магазинах и розничных сетях.

План коммерциализации полученных результатов

Полученная система и коробочные продукты смогут окупиться за счет:

- продажи оборудования собственной разработки и производства;
- предоставления сервиса по хранению и обработке данных сторонним организациям;
- размещения рекламы на страницах сервиса;
- получения анонимной статистики, аналитическая работа.

Публикации по теме работы

1. Попов С.О. Разработка системы управления умным домом для встроенных веб-серверов // Сборник тезисов докладов конгресса молодых ученых. Вып. 1. Труды молодых ученых. – СПб: НИУ ИТМО, 2012. – С. 203–204 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://fppo.ifmo.ru/kmu/kmu9/edition_1/1_7.pdf, свободн.
2. Попов С.О. Формат образа ПЗУ и протоколы обмена встроенных серверов WIZnet // Сборник тезисов докладов конгресса молодых ученых. Вып. 2. Труды молодых ученых. – СПб: НИУ ИТМО, 2012. – С. 299–300 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://fppo.ifmo.ru/kmu/kmu9/edition_2/2_7.pdf, свободн.

УДК 51-73

ЯВНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В ЗАДАЧАХ О МЕТАМАТЕРИАЛАХ

К.В. Правдин

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор И.Ю. Попов

В настоящей работе представлены результаты по исследованию поведения электромагнитного поля точечного потенциала при взаимодействии со слоем метаматериала.

Ключевые слова: метаматериал, коэффициент преломления, NIM, уравнения Максвелла, точечный потенциал, функция Грина.

Введение

В последние годы материалы с отрицательным показателем преломления (negative index materials, NIMs), вызывают большой интерес благодаря работам Веселаго [2] и Пендри [3]. В общем случае NIM-системы характеризуются существованием таких частот ω , при которых относительная электрическая проницаемость $\varepsilon(\omega)$ и относительная магнитная проницаемость $\mu(\omega)$ становятся отрицательными. Особенным является случай, называемый NIM-ситуацией, когда обе величины для одной и той же частоты $\hat{\omega}$ (NIM-частоты) принимают значения -1 в противоположность случаю с вакуумом, когда они равны $+1$.

Существование материалов с отрицательным показателем преломления обсуждалось в научной литературе с различных точек зрения [4]. В частности знак показателя преломления, который следует выбрать при извлечении квадратного корня

$n = \pm\sqrt{\epsilon\mu}$, был предметом дискуссий. При первом рассмотрении он равен +1, как для случая вакуума, так и для случая NIM-системы. Однако для NIM-ситуации знак противоположный. Вычисления, основанные на простейшей модели, в которой одна половина пространства состоит из вакуума ($\epsilon=\mu=1$), а другая заполнена NIM ($\epsilon=\mu=-1$ не зависимо от частоты), также давали двусмысленные результаты. Теоретические результаты, полученные на основе феноменологических уравнений Максвелла, должны помочь разрешить эту проблему.

Обзор результатов теоретических исследований

Общая постановка. Отправной точкой теоретических исследований в работе [1] являются феноменологические уравнения Максвелла

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) &= \partial_{\mathbf{x}} \times \mathbf{H}(\mathbf{x}, t), \quad \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\partial_{\mathbf{x}} \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \\ \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

с материальными уравнениями

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{P}(\mathbf{x}, t) = \int_{t_0}^t ds \chi_e(\mathbf{x}, t-s) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \\ \mathbf{H}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{M}(\mathbf{x}, t) = \int_{t_0}^t ds \chi_m(\mathbf{x}, t-s) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\chi_e(\mathbf{x}, t)$ и $\chi_m(\mathbf{x}, t)$ – тензоры электрической и магнитной восприимчивостей. Рассматривается рассеивающая (dispersive), непоглощающая (nonabsorptive) система. Ставятся условия «причинности» (causality condition) и «пассивности» (passivity condition) системы. Причинность означает, что $\chi_e(\mathbf{x}, t) = \chi_m(\mathbf{x}, t) = 0$ для $t \leq t_0$ ($t_0 = 0$). Пассивность предполагает, что электромагнитная энергия

$$\epsilon_{em}(t) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \{ \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)^2 + \mathbf{H}(\mathbf{x}, t)^2 \} \quad (3)$$

не может возрасти как функция времени.

Вводя формализм дополнительных полей (auxiliary fields formalism, AFF) авторы работы показывают, что $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{x}, t)$ имеют собственную временную эволюцию (proper time evolution). Если они являются функциями, интегрируемыми в квадрате в начальный момент времени, то они сохраняют свойство интегрируемости в квадрате в любой следующий момент.

Уравнения Максвелла могут быть получены в эквивалентных выражениях при помощи преобразования Лапласа

$$\hat{f}(z) = \int_0^{\infty} dt \exp[izt] f(t), \quad f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} dz \exp[-izt] \hat{f}(z), \quad (4)$$

где Γ – прямая от $-\infty$ до $+\infty$, параллельная действительной оси и расположенная на некотором расстоянии $\delta > 0$ от нее, $z = \omega + i\delta$, $\delta \rightarrow 0$ (т.е. $\text{Im } z > 0$).

Рассматриваемая система предполагается изотропной (isotropic), т.е. $\hat{\chi}(\mathbf{x}, z) = \hat{\chi}(\mathbf{x}, z) \mathbf{U}$, где \mathbf{U} – единичная матрица 3×3 . Электрическая и магнитная восприимчивости считаются равными и состоящими из единственного термина Лоренца. Таким образом, электрическая и магнитная проницаемости имеют следующий вид:

$$\epsilon(\omega) = \mu(\omega) = 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (5)$$

Для такой системы частота $\omega = \pm\hat{\omega}$, $\hat{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\Omega^2}{2}}$ является NIM-частотой, так как $\epsilon(\pm\hat{\omega}) = \mu(\pm\hat{\omega}) = -1$.

После применения преобразования Лапласа для уравнений Максвелла авторы [1] получают их в следующем виде:

$$\mathbf{L}^e(z) \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, z) = \mathbf{g}^e(\mathbf{x}, z), \quad \mathbf{L}^m(z) \cdot \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{x}, z) = \mathbf{g}^m(\mathbf{x}, z), \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^e(z) &= z^2 \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, z) + (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}, z)^{-1} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}), \\ \mathbf{L}^m(z) &= z^2 \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}, z) + (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, z)^{-1} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}), \\ \mathbf{g}^e(\mathbf{x}, z) &= iz \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) + i(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}) \cdot \{\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}, z)^{-1} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{x}, 0)\}, \\ \mathbf{g}^m(\mathbf{x}, z) &= iz \mathbf{H}(\mathbf{x}, 0) - i(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}) \cdot \{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, z)^{-1} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0)\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{L}^e(z)$ и $\mathbf{L}^m(z)$ – электрический и магнитный операторы Гельмгольца, $\boldsymbol{\varepsilon}$ – символ Леви-Чивита, $\mathbf{p} = -i\partial_{\mathbf{x}}$ и $(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}) \cdot \mathbf{f} = i\partial_{\mathbf{x}} \times \mathbf{f}$. В обозначениях

$$\mathbf{R}^e(z) = \mathbf{L}^e(z)^{-1}, \quad \mathbf{R}^m(z) = \mathbf{L}^m(z)^{-1} \quad (8)$$

получаем выражения:

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, z) = \mathbf{R}^e(z) \cdot \mathbf{g}^e(\mathbf{x}, z), \quad \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{x}, z) = \mathbf{R}^m(z) \cdot \mathbf{g}^m(\mathbf{x}, z). \quad (9)$$

Далее вводится функция Грина

$$\mathbf{G}^{e,m}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{R}^{e,m} | \mathbf{y} \rangle, \quad (10)$$

$$\mathbf{L}^{e,m}(z) \cdot \mathbf{G}^{e,m}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{U}. \quad (11)$$

Тогда $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ может быть найдено при помощи обратного преобразования Лапласа для выражения

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, z) = \int d\mathbf{y} \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \cdot \mathbf{g}(\mathbf{y}, z), \quad (12)$$

где $\mathbf{g}(\mathbf{y}, z)$ – некоторая конфигурация интегрируемого в квадрате начального поля или источника плотности.

Слоистые системы. В работе [1] исследуются изотропные слоистые системы со следующей структурой:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, z) = \boldsymbol{\varepsilon}(x_3, z) = \boldsymbol{\varepsilon}_j(z), \quad \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}, z) = \boldsymbol{\mu}(x_3, z) = \boldsymbol{\mu}_j(z), \quad x_3 \in M_j, \quad (13)$$

где M_j – слои, параллельные плоскости $X_1 X_2$. По направлениям X_1 и X_2 предполагается трансляционная инвариантность. Опуская индекс в третьей координате ($x = x_3, y = y_3$) для $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$, $\boldsymbol{\kappa} = (k_1, k_2, 0) = \boldsymbol{\kappa} \mathbf{e}_{\boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{k}^{\perp} \perp \mathbf{e}_3$, имеем

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) = \frac{1}{2\pi} \int d\boldsymbol{\kappa} \exp[-i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x}^{\perp} - \mathbf{y}^{\perp})] \mathbf{G}_{\boldsymbol{\kappa}}(x, y, z), \quad (14)$$

$$\mathbf{G}_{\boldsymbol{\kappa}}(x, y, z) = \mathbf{G}_s(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}) + \mathbf{G}_p(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}), \quad (15)$$

$$\mathbf{G}_s(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}) = G_s(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}) \mathbf{e}_3 \times \mathbf{e}_{\boldsymbol{\kappa}} \mathbf{e}_3 \times \mathbf{e}_{\boldsymbol{\kappa}}, \quad (16)$$

$$\mathbf{G}_p(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}) = \left(\mathbf{e}_{\boldsymbol{\kappa}} + \frac{i\boldsymbol{\kappa}}{\zeta(x)^2} \partial_x \mathbf{e}_3 \right) \left(\mathbf{e}_{\boldsymbol{\kappa}} - \frac{i\boldsymbol{\kappa}}{\zeta(y)^2} \partial_x \mathbf{e}_2 \right) G_p(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}), \quad (17)$$

где скалярные функции Грина G_s и G_p удовлетворяют следующим дифференциальным уравнениям:

$$\begin{aligned} \left\{ z^2 \boldsymbol{\varepsilon}(x, z) - p \frac{z^2 \boldsymbol{\varepsilon}(x, z)}{\zeta(x, \boldsymbol{\kappa}, z)^2} p \right\} G_p(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}) &= \delta(x - y), \\ \left\{ \frac{\zeta(x, \boldsymbol{\kappa}, z)^2}{\boldsymbol{\mu}(x, z)} - p \frac{1}{\boldsymbol{\mu}(x, z)} p \right\} G_s(x, y, z, \boldsymbol{\kappa}) &= \delta(x - y). \end{aligned} \quad (18)$$

Два полупространства, заполненные различными материалами. Авторы [1] рассматривают ситуацию с полупространствами $x > 0$ и $x < 0$, которые заполнены материалами с проводимостями

$$\varepsilon(x, z) = \begin{cases} \varepsilon_+(z), & x > 0 \\ \varepsilon_-(z), & x < 0 \end{cases}, \quad \mu(x, z) = \begin{cases} \mu_+(z), & x > 0 \\ \mu_-(z), & x < 0 \end{cases}, \quad (19)$$

и получают выражения для функций Грина G_s и G_p в общем виде.

Особый интерес представляет случай, когда область $x > 0$ состоит из вакуума ($\varepsilon_+(z) = 0$) и начальное состояние содержится в этой области ($y > 0$). Подобная ситуация реализуется, если электромагнитный волновой пакет путешествует по направлению к материалу. В подробном исследовании авторы получили точные формулы G_s и G_p для частот $z = \pm \hat{\omega}$ при $\hat{\omega} > \kappa$ (radiative regime) и асимптотики G_s и G_p для частот $z \rightarrow \pm \hat{\omega}$ при $\hat{\omega} < \kappa$ (evanescent regime).

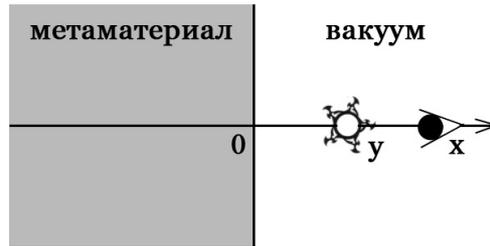


Рис. 1. Случай «отражения». В точке y расположен источник поля, в точке x – приемник поля (изображена ситуация $x > y$)

В случае «отражения» $x, y > 0$ (источник и приемник электромагнитного поля находятся за пределами материала в вакууме, как показано на рис. 1) и $\hat{\omega} > \kappa$ на частоте $z = \pm \hat{\omega}$ отражение отсутствует:

$$\rho(\hat{\omega}) = \sqrt{\left| \omega^2 \left(1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2} \right)^2 - \kappa^2 \right|}, \quad (20)$$

$$G_p(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{\rho(\hat{\omega})}{2i\hat{\omega}^2} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})|x - y|],$$

$$G_s(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{1}{2i\rho(\hat{\omega})} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})|x - y|]. \quad (21)$$

При $\hat{\omega} < \kappa$ наблюдается затухание, типичное для evanescent-ситуации:

$$G_p(x, y, z) \underset{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} \frac{\rho(\hat{\omega})}{2\hat{\omega}^2} \exp[-\rho(\hat{\omega})|x - y|] + \frac{\rho(\hat{\omega})^3 \Omega^2}{4\hat{\omega}^2 \kappa^2} \frac{1}{(z - \hat{\omega})(z + \hat{\omega})} \exp[-\rho(\hat{\omega})(x + y)],$$

$$G_s(x, y, z) \underset{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} -\frac{1}{2\rho(\hat{\omega})} \exp[-\rho(\hat{\omega})|x - y|] + \frac{\rho(\hat{\omega})\Omega^2}{4\kappa^2} \frac{1}{(z - \hat{\omega})(z + \hat{\omega})} \times \exp[-\rho(\hat{\omega})(x + y)]. \quad (22)$$

В случае «преломления» $x < 0 < y$ (источник находится в вакууме, приемник – в метаматериале, как показано на рис. 2) и $\hat{\omega} > \kappa$ для частоты $z = \pm \hat{\omega}$ имеется два различных scattering-канала амплитуд для отражения и преломления:

$$G_p(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{\rho(\hat{\omega})}{2i\hat{\omega}^2} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})|x + y|],$$

$$G_s(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{1}{2i\rho(\hat{\omega})} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})|x + y|]. \quad (23)$$

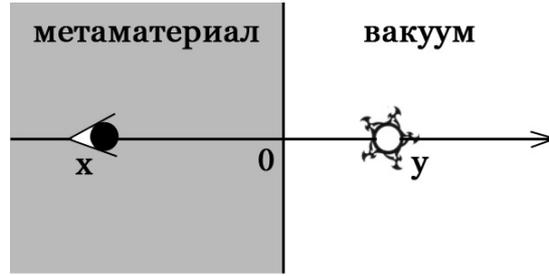


Рис. 2. Случай «преломления». В точке y расположен источник поля, в точке x – приемник поля

При $\hat{\omega} < \kappa$ наблюдается затухание:

$$G_p(x, y, z) \underset{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} \frac{\rho(\hat{\omega})^3 \Omega^2}{4\hat{\omega}^2 \kappa^2 (z^2 - \hat{\omega}^2)} \exp[-\rho(\hat{\omega})(y-x)],$$

$$G_s(x, y, z) \underset{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} \frac{\rho(\hat{\omega}) \Omega^2}{4\kappa^2 (z^2 - \hat{\omega}^2)} \exp[-\rho(\hat{\omega})(y-x)]. \quad (24)$$

Так как функции Грина имеют полюсы в $z = \pm \hat{\omega}$, то при восстановлении $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ возникают незатухающие вклады, осциллирующие пропорционально $\exp[\pm i\hat{\omega}t]$.

Основной результат

Мы рассмотрели ситуацию, при которой слой (a, b) метаматериала находится в вакууме:

$$\varepsilon(x, z) = \begin{cases} \varepsilon(z), & x \in (a, b) \\ 1, & x \notin (a, b) \end{cases}, \quad \mu(x, z) = \begin{cases} \mu(z), & x \in (a, b) \\ 1, & x \notin (a, b) \end{cases}, \quad (25)$$

При этом источник поля располагается в вакууме ($y < 0$). Мы получили точные формулы G_s и G_p для частот $z = \pm \hat{\omega}$ при $\hat{\omega} > \kappa$ (radiative regime) и асимптотики G_s и G_p для частот $z \rightarrow \pm \hat{\omega}$ при $\hat{\omega} < \kappa$ (evanescent regime).

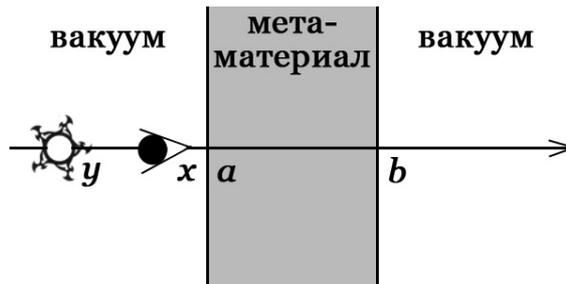


Рис. 3. Случай «отражения». В точке y расположен источник поля, в точке x – приемник поля (изображена ситуация $x > y$)

В случае «отражения» $x, y < a < b$ (источник и приемник электромагнитного поля находятся за пределами материала в вакууме, как показано на рис. 3) и $\hat{\omega} > \kappa$ на частоте $z = \pm \hat{\omega}$ отражение отсутствует:

$$G_p(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{\rho(\hat{\omega})}{2i\hat{\omega}^2} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})|x-y|],$$

$$G_s(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{1}{2i\rho(\hat{\omega})} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})|x-y|]. \quad (26)$$

При $\hat{\omega} < \kappa$ наблюдается затухание, типичное для evanescent-ситуации:

$$G_p(x, y, z) \stackrel{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} \frac{\rho(\hat{\omega})}{2\hat{\omega}^2} \exp[-\rho(\hat{\omega})|x-y|] + \frac{\Omega^2}{4\hat{\omega}^2 \kappa^2} \frac{\rho(\hat{\omega})^3 (1-4\rho(\hat{\omega})^2)}{(z-\hat{\omega})(z+\hat{\omega})} \times$$

$$\times \exp[-\rho(\hat{\omega})(a-x+a-y)],$$

$$G_s(x, y, z) \stackrel{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} -\frac{1}{2\rho(\hat{\omega})} \exp[-\rho(\hat{\omega})|x-y|] + \frac{\Omega^2}{4\kappa^2} \frac{\rho(\hat{\omega})(1-4\rho(\hat{\omega})^2)}{(z-\hat{\omega})(z+\hat{\omega})} \times$$

$$\times \exp[-\rho(\hat{\omega})(a-x+a-y)].$$

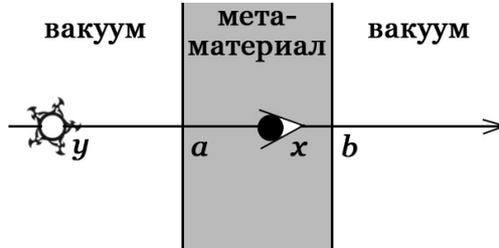


Рис. 4. Случай «преломления». В точке y расположен источник поля, в точке x – приемник поля

В случае «преломления» $y < a < x < b$ (источник находится в вакууме, приемник – в метаматериале, как показано на рис. 4) и $\hat{\omega} > \kappa$ для частоты $z = \pm \hat{\omega}$ имеется два различных scattering-канала амплитуд для отражения и преломления:

$$G_p(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{\rho(\hat{\omega})}{2i\hat{\omega}^2} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})(a-x+a-y)],$$

$$G_s(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{1}{2i\rho(\hat{\omega})} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})(a-x+a-y)]. \quad (27)$$

При $\hat{\omega} < \kappa$:

$$G_p(x, y, z) \stackrel{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} \frac{\Omega^2}{4\hat{\omega}^2 \kappa^2} \frac{\rho(\hat{\omega})^3 (1+4\rho(\hat{\omega})^2)}{(z-\hat{\omega})(z+\hat{\omega})} \exp[-\rho(\hat{\omega})(x-y)] - \frac{2\rho(\hat{\omega})^3}{\hat{\omega}^2} \times$$

$$\times \exp[-\rho(\hat{\omega})(a-x+a-y)],$$

$$G_s(x, y, z) \stackrel{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} -\frac{\Omega^2}{4\kappa^2} \frac{\rho(\hat{\omega})(1+4\rho(\hat{\omega})^2)}{(z-\hat{\omega})(z+\hat{\omega})} \exp[-\rho(\hat{\omega})(y-x)] - 2\rho(\hat{\omega}) \times$$

$$\times \exp[-\rho(\hat{\omega})(a-x+a-y)]. \quad (28)$$



Рис. 5. Случай «пропускания». В точке y расположен источник поля,

в вакууме по другую сторону слоя по отношению к источнику, как показано на рис. 5) и $\hat{\omega} > \kappa$ для частоты $z = \pm \hat{\omega}$:

$$G_p(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{\rho(\hat{\omega})}{2i\hat{\omega}^2} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})(x-y-2(b-a))],$$

$$G_s(x, y, \pm \hat{\omega}) = \pm \frac{1}{2i\rho(\hat{\omega})} \exp[\pm i\rho(\hat{\omega})(x-y-2(b-a))]. \quad (29)$$

При $\hat{\omega} < \kappa$:

$$G_p(x, y, z) \stackrel{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} -\frac{2\rho(\hat{\omega})^3}{\hat{\omega}^2} \exp[-\rho(\hat{\omega})(x - y - 2(b - a))],$$
$$G_s(x, y, z) \stackrel{z \rightarrow \pm \hat{\omega}}{\sim} 2\rho(\hat{\omega}) \exp[-\rho(\hat{\omega})(x - y - 2(b - a))]. \quad (30)$$

Так как функции Грина имеют полюсы в $z = \pm \hat{\omega}$, то при восстановлении $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ возникают незатухающие вклады, осциллирующие пропорционально $\exp[\pm i\hat{\omega}t]$.

Перспектива исследований

Наиболее интересной является слоистая система, состоящая из одного слоя метаматериала (single layer, slab), который находится в вакууме. Интерес вызван, в первую очередь, идеей создания идеальной линзы («perfect lenses»). Среди многочисленных работ по данной тематике наиболее полное исследование было представлено Коллином [5].

Непосредственным продолжением исследований мог бы стать поиск функции Грина в периодической слоистой системе, состоящий из произвольного числа слоев.

Литература

1. Gralak B., Tip A. Macroscopic Maxwell's equations and negative index materials // Journal of mathematical physics. – 2010. – № 51. – P. 1–28.
2. Веселаго В.Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ϵ и μ // Успехи физических наук. – 1967. – № 92 (3). – С. 517–526.
3. Pendry J.B. Negative Refraction Makes a Perfect Lens // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85. – № 18. – P. 3966–3975.
4. Hoofdt G.W.'t // Phys. Rev. Lett. – 2001. – № 87; Valanju P.M., Walser R.M., ibid. – 2002. – № 88; Garcia N., Nieto-Garcia M., ibid. – 2002. – № 88; Nieto-Vesperinas M., J. Opt. Soc. Am. A. – 2004. – № 21. – С. 491; Maystre D., Enoch S., ibid. – 2004. – № 21. – С. 122; Stockman I. // Phys. Rev. Lett. – 2007. – № 98.
5. Collin R.E. Frequency dispersion limits resolution in Veselago lens // PIER B. – 2010. – № 19. – P. 233.

ОСНОВЫ ПОСТРОЕНИЯ ЭВОЛЮЦИОННОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ИЗНАШИВАНИЯ ЗУБЧАТОГО ЗАЦЕПЛЕНИЯ

С.С. Резников

Рассмотрена возможность построения математической модели изнашивания зубьев в передаче. Указаны допущения, при которых будет производиться создание модели.

Введение

Статистический анализ показывает, что основной причиной выхода из строя машин и механизмов является не их поломка, а износ подвижных сопряжений. Выход из строя вследствие изнашивания наиболее характерен для механизмов и устройств, работающих в различных отраслях промышленности. Они работают в средах, загрязненных абразивными частицами, в условиях либо ограниченной смазки, либо вообще без смазки (смазывание осуществляется однократно, в момент сборки). Несмотря на то, что износостойкость является основным показателем работоспособности таких механизмов, их проектирование базируется в первую очередь на прочностных расчетах. Расчеты на износ производятся крайне редко и имеют неудовлетворительное методическое обеспечение.

Отсутствие обоснованных методик расчета передач на износ в первую очередь связано со сложностью математического моделирования изнашивания зубчатого зацепления. Его описание требует анализа различных процессов, зависящих от большого числа параметров, характеризующих свойства материалов колес, условия работы передачи, макро- и микрогеометрию взаимодействующих поверхностей, кинематику зацепления.

Предположения и допущения

Изнашивание, по своей природе, процесс непрерывного изменения формы взаимодействующих поверхностей. В связи с этим математическая модель изнашивающегося зубчатого зацепления должна учитывать непрерывное изменение формы зубьев и вызываемое им изменение силовых и геометро-кинематических показателей передачи.

В настоящей работе рассмотрен процесс изнашивания цилиндрической прямозубой передачи. Для ее описания использовались положения упруго-статической модели, успешно применяемой при синтезе приближенных зацеплений [1, 2].

В соответствии с этой моделью предполагается:

- – все зубья геометрически одинаковы и равномерно распределены по ободу колеса;
- – контакт зубьев осуществляется по активным поверхностям;
- – под нагрузкой зубья колес деформируются и их упругие свойства одинаковы;
- – пластические деформации отсутствуют.

Дополнительно приняты следующие допущения:

- зубья каждого колеса изнашиваются одинаково;
- условия работы передачи считаются неизменными;
- к выходному валу приложен постоянный момент сопротивления;
- шестерня вращается с постоянной угловой скоростью;
- износ считается достаточно малым, чтобы можно было не учитывать изменение упругих свойств зубьев;
- трение в зацеплении не учитывается.

Построение модели

Эволюционный подход к моделированию основан на том, что процесс изнашивания разбивается на ряд шагов. Приращение наработки Δn на каждом шаге выбирается настолько малым, что условия изнашивания в его пределах можно считать постоянными. Тогда приращение износа ΔH_i в любой i -ой точке профиля с достаточной степенью точности выражается уравнением (1):

$$\Delta H_i = J_i \cdot \Delta n . \quad (1)$$

Износ эквивалентен перемещению точки по нормали к поверхности трения (рисунок). Исходя из этого, если нам известны координаты достаточно большого (m) числа точек, задающих профиль зуба в начале шага изнашивания $\{x_i, y_i\}$, то их координаты $\{x_i^h, y_i^h\}$ в конце этого шага равны:

$$x_i^h = x_i + J_i e_{ix} \cdot \Delta n \quad y_i^h = y_i + J_i e_{iy} \cdot \Delta n , \quad (2)$$

где e_{ix}, e_{iy} – проекции орта нормали на оси координат.

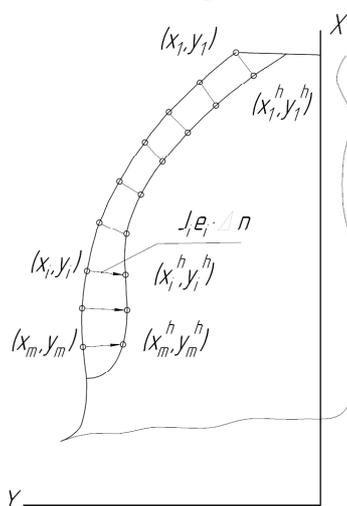


Рисунок. Модель построения

Координаты точек $\{x_i^h, y_i^h\}$ определяют новую форму профилей зубьев. Для продолжения моделирования процесса в каждой из этих точек необходимо найти новые значения ортов нормалей и аргументов функции интенсивности изнашивания, т.е. нагрузку, радиусы кривизны и скорости общей точки по профилям зубьев шестерни и колеса. Это производится в ходе решения обратной задачи теории зацепления. По этой причине алгоритм решения обратной задачи при точечном задании профилей зубьев является основой любой эволюционной модели процесса изнашивания зацепления.

В классической постановке обратной задачи профили зубьев считаются заданными аналитически в виде функций или систем уравнений, описывающих инструмент и станочное зацепление. Следовательно, первым этапом ее решения в нашем случае должен быть переход от координатного к аналитическому описанию профилей изнашивающихся зубьев.

При моделировании удобно задаваться шагом износа ΔH , равным приращению износа в точке с максимальной интенсивностью изнашивания J_m .

Шаг наработки и шаг износа связаны уравнением (3):

$$\Delta n = \frac{\Delta H}{J_m} . \quad (3)$$

С точки зрения математики изложенная модель представляет собой численное решение в каждой i -ой точке профиля с радиусом-вектором \vec{r}_i задачи Коши для дифференциального уравнения:

$$\vec{r}_i' = J_i \vec{e}_i. \quad (4)$$

Способ решения соответствует методу Эйлера, который обеспечивает первый относительно Δn порядок точности. Если на каждом шаге производить уточнение координат точек изношенного профиля по формулам (5) и (6):

$$x_i^h = x_i + \frac{1}{2} (J_i e_{ix} + J_i^* e_{ix}^*) \cdot \Delta n, \quad (5)$$

$$y_i^h = y_i + \frac{1}{2} (J_i e_{iy} + J_i^* e_{iy}^*) \cdot \Delta n, \quad (6)$$

где J_i^*, \vec{e}_i^* – интенсивность изнашивания и орт нормали для профиля, координаты точек которого предварительно рассчитываются по уравнению (2), то способ решения будет соответствовать модифицированному методу Эйлера, который обеспечивает второй порядок точности.

Недостатком этого метода является увеличение вдвое по сравнению с методом (2) объема требуемых вычислений, и, соответственно, машинного времени, необходимого для моделирования изнашивания.

При моделировании процесса изнашивания считаются заданными конструктивные параметры исходной передачи, условия ее работы и функция интенсивности изнашивания.

Решение задачи на каждом шаге изнашивания включает следующие этапы.

1. Переход от точечного к аналитическому заданию профилей зубьев.
2. Решение обратной задачи в окрестности каждой точки профилей, определение ортов нормалей и геометро-кинематических показателей, являющихся аргументами функции интенсивности изнашивания и таблично заданных функций $\varphi_2(\varphi_1)$, $h(\varphi_1)$, где φ_1, φ_2 – углы поворота шестерни и колеса; h – плечо контактной нормали относительно оси вращения колеса.
3. Определение нагрузки в контактных точках для зон однопарного зацепления и упругого пересопряжения зубьев.
4. Определение интенсивностей изнашивания J_i и шага наработки Δn .
5. Расчет координат точек изношенных профилей.

Профили исходного зацепления задаются наборами попарно сопряженных точек: i -я точка профиля зуба шестерни в процессе передачи движения контактирует с i -ой точкой профиля зуба колеса ($i = 1, \dots, m$). За шаг изнашивания каждая точка перемещается на величину износа ΔN_i , не превосходящую шаг износа ΔN . Новые точки перестают быть сопряженными. Однако вследствие того, что шаг износа задается достаточно малым (десятитысячные доли модуля), а смещение точек происходит по нормальям к профилям, в ближайшей окрестности i -ой точки профиля шестерни должна находиться точка сопряженная с i -ой точкой профиля колеса и наоборот. Такие точки будем называть в дальнейшем квазисопряженными.

При решении обратной задачи в окрестности каждой пары квазисопряженных точек отыскивается пара сопряженных точек. Точки, координаты которых определяются в конце шага изнашивания, вновь становятся квазисопряженными.

Последовательный переход от квазисопряженных точек к сопряженным и наоборот, имеет принципиальное значение для обеспечения возможности реализации эволюционной модели на компьютере. При моделировании каждый профиль разбивается на несколько десятков точек. Число шагов изнашивания доходит до

нескольких тысяч. В связи с этим решение обратной задачи на каждом шаге в окрестности каждой точки профиля обычными итерационными методами требует больших вычислительных затрат, что сильно уменьшает возможности проведения математических экспериментов.

При решении обратной задачи в окрестности квазисопряженных точек профили зубьев могут быть заменены соприкасающимися окружностями. Это позволяет получить решение в явном виде, без применения итерационных методов наряду с большой экономией вычислительной мощности, такой подход позволяет обходиться минимальной информацией о геометрии профилей зубьев. Для анализа зацепления необходимо знать только радиусы кривизны и орты нормалей в квазисопряженных точках.

Правильный выбор шага износа и числа точек, задающих профили зубьев, во многом определяет точность результатов расчетов. При выборе шага износа остаются в силе все соображения, исходя из которых, выбирается шаг при решении численными методами дифференциальных уравнений. Следует отметить некоторые особенности этой процедуры в случае моделирования процесса изнашивания. Если величина недостаточно мала, то возрастают погрешности, связанные с допущениями о неизменности условий изнашивания в пределах шага, а также с заменой профилей зубьев в окрестностях квазисопряженных точек.

С другой стороны, при слишком малом ΔH увеличиваются погрешности, связанные с конечным представлением чисел в памяти компьютера (ошибка округления). Опасность возрастания этих погрешностей усугубляется тем, что ΔH определяет максимальный износ на шаге изнашивания. Для большинства точек профилей износ ΔH_i имеет гораздо меньшее значение.

При выборе числа точек, задающих профили зубьев, следует учитывать, что малое их количество приводит к потере информации о геометрии зацепления. При слишком большом количестве точек, малость расстояния между ними обуславливает возрастание влияния погрешностей определения их координат на такие геометрические параметры, как направление ортов нормалей и радиусы кривизны профилей.

Литература

1. Гуляев К.И., Рязанцева И.Л. Профильная модификация зубьев колес эвольвентной цилиндрической передачи с учетом деформации зацепления // Изв. вузов. Приборостроение. – 1981. – № 5. – С. 52–60.
2. Гуляев К.И., Черный Б.А. Упругая модель в задаче синтеза приближенного зацепления // Теория и расчет передаточных механизмов. – Хабаровск, 1973. – С. 20–25.

ЛАЗЕРНАЯ ОЧИСТКА ШЕРОХОВАТЫХ И ПРОФИЛИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

А.А. Самохвалов

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.П. Вейко

Представлена технология лазерной очистки, а также методика ее контроля посредством лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии в режиме реального времени. Выявлен спектральный критерий безопасной лазерной очистки микрорельефных поверхностей, позволяющий сохранять структуру поверхности при максимальном эффекте очистки.

Ключевые слова: лазерная очистка, растрiroванный вал, волоконный лазер, термомеханический эффект, лазерно-искровая эмиссионная спектроскопия, обратная связь.

Введение

Лазерная очистка (ЛО) является уже достаточно известным методом и используется во многих сферах приложений, из которых реставрацию культурного наследия (очистка памятников, картин, мрамора, старинных монет и т.д.) [1], и микроэлектронику (очистка кремниевых подложек) [2], можно считать традиционными областями ее применения. Также к современным применениям ЛО можно отнести: удаление слоев коррозии, красок и различных покрытий с поверхностей деталей и узлов машин (турбинные лопатки, полиграфические (анилоксовые) валы, литьевые формы и т.д.), удаление радиоактивных загрязнений с объектов атомной энергетики [3], очистку железнодорожного полотна [4], очистку стен от граффити и т.д.

Несмотря на различные технологические преимущества лазерного метода (бесконтактность, мобильность, отсутствие расходных материалов, экологическая безопасность, возможность селективного удаления загрязнений), нерешенной остается проблема контролируемости ЛО.

Данная проблема частично нашла решение в применении метода лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии (ЛИЭС) [5], что было успешно продемонстрировано при реставрации предметов искусства [6–9]. Как правило, при ЛО культурного наследия используется режим одиночных импульсов с энергией порядка 50–100 мДж, где традиционная схема ЛИЭС с сигналом задержки [5] успешно применима. Но при очистке промышленных объектов технологически оправданным является многоимпульсный режим воздействия при энергии в импульсе порядка 0,5–1 мДж, что делает невозможным использование традиционной схемы ЛИЭС.

Постановка задачи

Целью данной работы являлась оптимизация метода ЛИЭС для контроля многоимпульсной ЛО на примере очистки растрiroванного вала. А также разработка методики спектрального контроля при промышленной лазерной очистке, которая в отличие от очистки культурных ценностей [6–9], является многоимпульсной, и в процессе ее надо обеспечить не расшифровку спектров, а выявление степени удаления и, главное, момента ее завершения.

Объект исследования

В данном случае исследовался процесс очистки от краски поверхности растрiroванного вала, представляющего собой металлический цилиндр с плазменным

напылением Cr_2O_3 , в котором выполнена лазерная гравировка в виде шестиугольных микроячеек (рис. 1, 2).

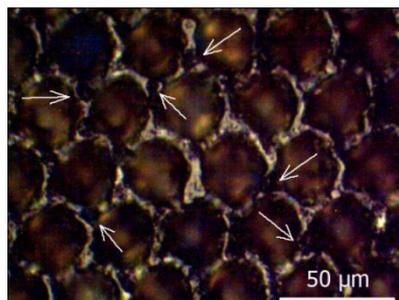


Рис. 1. Поверхность растриванного вала до очистки. Стрелками показаны характерные эксплуатационные трещины и каверны поверхности вала, возникшие во время его эксплуатации

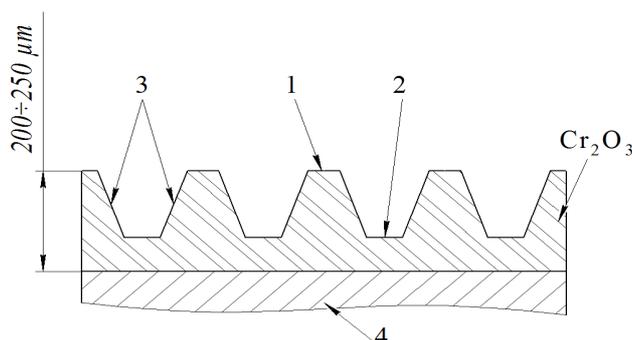


Рис. 2. Поперечное сечение растриванного вала: 1 – перемычка; 2 – дно ячейки; 3 – стенки ячейки; 4 – металлическая основа вала

В качестве образца был взят растриванный вал, вышедший из эксплуатации, и загрязненный УФ-отверждающейся краской (данная краска наиболее часто применяется во флексографии). В случае анилоксовых валов, где загрязнителями выступают различные органические и полимерные краски, регистрация и расшифровка их спектров методом ЛИЭС не представляется ни реальной, ни разумной. Так как температуры испарения этих красок достаточно малы (порядка $300\text{--}400^\circ\text{C}$) даже по сравнению с температурой плавления плазменного покрытия Cr_2O_3 (2435°C), то представляется необходимой и достаточной регистрацией порогов появления в спектре вторичных линий подложки (хрома Cr I), что должно обеспечить требования сохранности микрорельефа.

На экспериментальную проверку этого положения, в сущности, и была направлена настоящая работа.

Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 3. В качестве излучателя был использован волоконный импульсный иттербиевый лазер (IPG-Photonics $P_{\text{max}}=20$ Вт, $f=20\text{--}100$ кГц, $\tau=100$ нс, $J=1$ мДж), установленный для сканирования поверхности вала на двухкоординатном столе ISEL, вращение анилоксового вала осуществлялось через специальный механизм с приводом от бесколлекторного электродвигателя постоянного тока. С помощью изменения частоты вращения вала и скорости/шага координатного стола, а также условий фокусировки достигалась оптимальная для очистки развертка лазерного луча, т.е. спираль с определенным шагом.

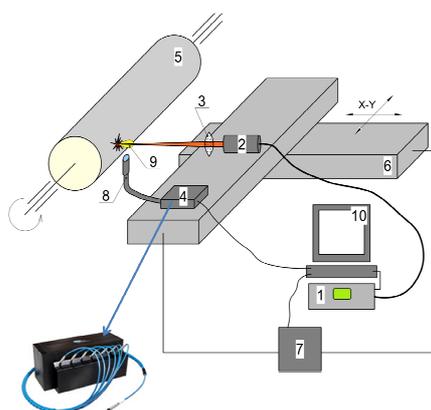


Рис. 3. Экспериментальная установка для ЛО растриванных валов

Для регистрации спектра плазмы, возникающей в процессе ЛО, использовался широкополосный волоконный спектрометр Ocean Optics LIBS2500-5PLUS, в наших экспериментах был задействован наиболее информативный диапазон длин волн 390–515 нм. Очистка растриванного вала происходила в многоимпульсном режиме при непрерывном сканировании, поэтому на очищаемой поверхности присутствовал стационарный плазменный факел. Вследствие этого для спектрометра был выбран режим скоростного считывания данных (High-Speed Acquisition) с частотой смены кадров 20 мс. Таким образом, процесс очистки контролировался в режиме реального времени. Плотность мощности лазерного излучения плавно регулировалась путем изменения средней мощности в параллельном пучке, что позволяло точно выявить энергетические пороги появления новых пиков атомных линий.

Результаты эксперимента

В ходе экспериментов были получены эмиссионные спектры, соответствующие различным режимам ЛО анилоксового вала (рис. 4).

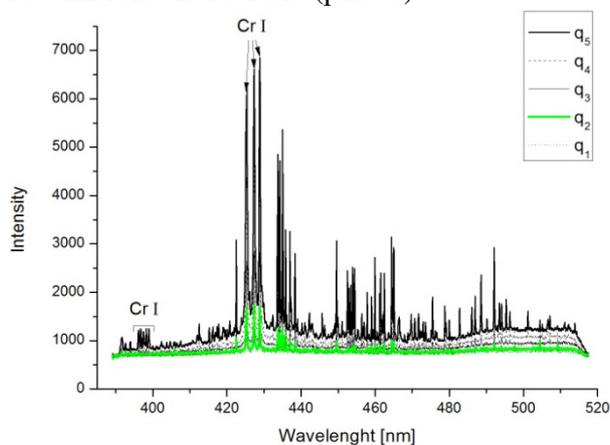


Рис. 4. Эмиссионные спектры при ЛО анилоксового вала

Во всех режимах очистки в спектре наблюдались линии хрома Cr I. Основные линии Cr I (425,37 нм, 427,42 нм, 428,87 нм) были зарегистрированы даже при минимальной плотности мощности, что говорит о локальной абляции микроструктуры анилоксового вала. Также был обнаружен энергетический порог воздействия лазерного излучения, при котором в эмиссионном спектре возникала группа равноотстоящих спектральных линий (396,2 нм, 396,75 нм, 397,45 нм, 398,21 нм, 398,9 нм) одинаковой интенсивности, данная структура является мультиплетным расщеплением линий Cr I (рис. 5).

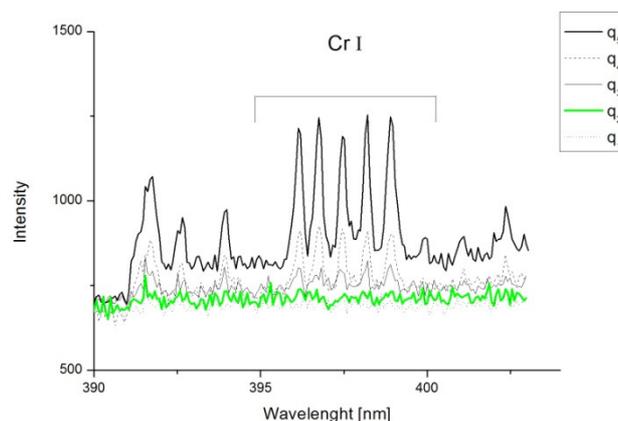


Рис. 5. Мультиплетное расщепление линий хрома Cr I

Заметим, что молекулярных полос органических соединений в полученных спектрах обнаружено не было, данный факт связан с тем, что молекулы углеводородов, из которых состоит УФ-отверждающаяся краска, обладают невысокой энергией диссоциации (порядка 2–3 эВ) и, в данном случае не могут быть зарегистрированы методом ЛИЭС.

Решение поставленной задачи контроля ЛО и выбора оптимального режима осуществлялось сопоставлением полученных эмиссионных спектров и микрофотографий поверхности анилоксового вала (рис. 6).

Визуальным фактором для оценки безопасности ЛО при микроскопии поверхности являются резкие края перемычек и микротрещины, как до обработки поверхности. Появление размытых блестящих перемычек соответствует плавлению поверхности, что уменьшает высоту микрорельефа и недопустимо в технологическом процессе флексопечати.

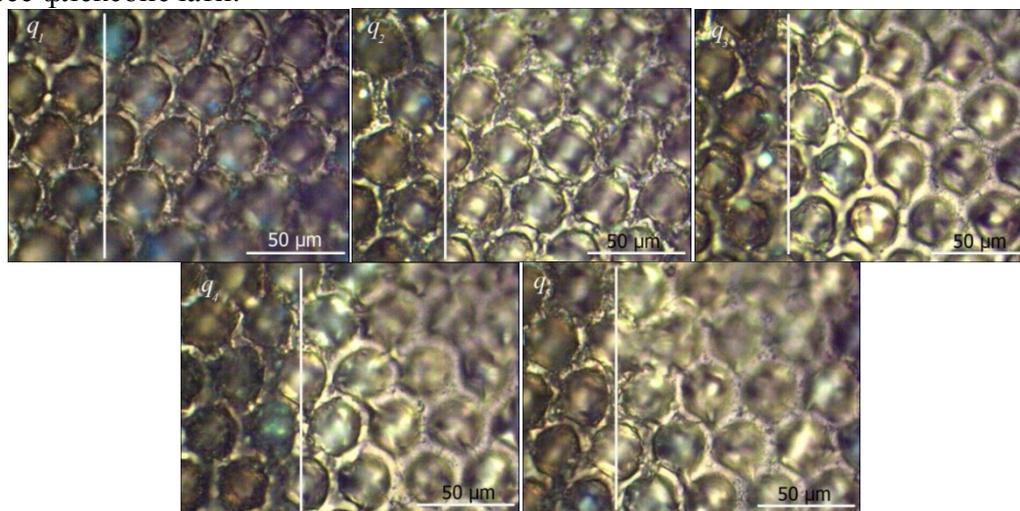


Рис. 6. Микрофотографии различных режимов ЛО поверхности анилоксового вала. (Белой линией обозначена граница между необработанной и обработанной зонами вала). $q_1=1,86 \times 10^{10}$ Вт/м², $q_2=2,83 \times 10^{10}$ Вт/м², $q_3=3,88 \times 10^{10}$ Вт/м², $q_4=6,23 \times 10^{10}$ Вт/м², $q_5=9,9 \times 10^{10}$ Вт/м²

Обсуждение результатов

Анализируя микрофотографии (рис. 6), можно видеть, что начиная с режима q_3 , перемычки начинают значительно плавиться, что вызывает недопустимое уменьшение высоты микрорельефа растриваемого вала. Режимы q_4 , q_5 соответствуют существенному плавлению перемычек и также не являются рабочими.

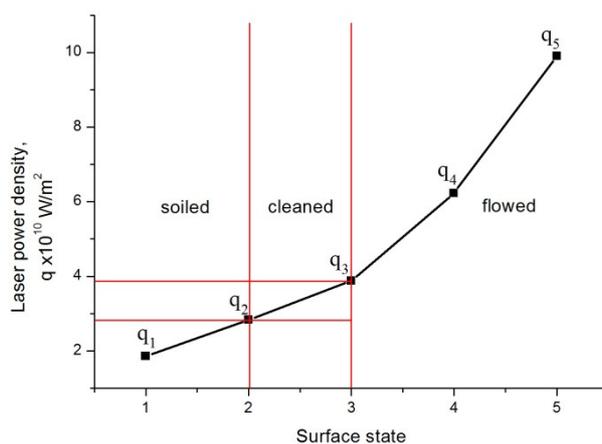


Рис. 7. Режимы очистки растриванного вала

При уменьшении плотности мощности до режимов q_2 , q_1 расплавленные перемычки отсутствуют. Более того, из микрофотографии (рис. 6, q_2 , q_1) можно заметить, что эксплуатационные микротрещины вала имеют исходный вид, как и до ЛО (рис. 1), что свидетельствует о безопасности этих режимов. Однако эффект очистки в режиме q_1 недостаточен, что видно из микрофотографии (рис. 6) – дно ячеек затемнено, а на стенках ячеек присутствуют фрагменты (синие) оставшейся краски. Таким образом, оптимальным является режим q_2 , при котором отсутствуют повреждения вала, а эффект очистки максимален. На рис. 7 представлен график режимов ЛО растриванного вала.

Сопоставление микрофотографий с эмиссионными спектрами показало, что порог появления группы равноотстоящих спектральных линий (рис. 5), соответствует режиму q_3 . Таким образом, «опорным» спектром при ЛО в данном случае является спектр, в котором данная группа линий отсутствует, т.е. спектр q_2 . При этом диапазон рабочих плотностей мощности лежит в интервале $2,83\text{--}3,88 \times 10^{10} \text{ Вт/м}^2$.

Основные результаты работы

Итогом проделанной работы явился спектральный критерий ЛО анилоксовых валов, заключающийся в том, что при ЛО растриванного вала интенсивность определенной линии в наблюдаемом эмиссионном спектре не должна превышать ее интенсивности в «опорном» спектре.

В проделанной работе продемонстрирована работоспособность и эффективность спектрального критерия при ЛО в многоимпульсном режиме очистки с помощью волоконных импульсных лазеров.

Результаты работы могут быть использованы при разработке других процессов ЛО с волоконными лазерами, которые на сегодняшний день широко применяются в промышленности.

Направления дальнейших исследований

Экспериментальное исследование влажной лазерной очистки, выявление энергетических порогов удаления различных загрязнителей с микрорельфных поверхностей.

Исследование влажной лазерной очистки методом высокоскоростной съемки, изучение и выявление влияния сопутствующих кавитационных и взрывных эффектов на процесс очистки.

Исследование оптоакустического метода контроля процесса влажной лазерной очистки, разработка критерия обратной связи на его основе.

Исследование свойств поверхности после влажной лазерной очистки (поверхностного натяжения, микротвердости, шероховатости и т.д.)

Работа поддержана грантами У.М.Н.И.К-2011/2012. Участник ведущей научной школы НШ-619.2012.2.

Литература

1. Marczak J., Koss A., Targowski P., Góra M., Strzelec M., Sarzyński A., Skrzeczanowski W., Ostrowski R. and A. Rycyk. Characterization of Laser Cleaning of Artworks // *Sensors*. – 2008. – V. 8. – P. 6507–6548.
2. Leiderer P., Boneberg J., Dobler V., Mosbacher M., Münzer H.-J., Chaoui N., Siegel J., Solis J., Afonso C.N., Fourier T., Schrems G., Bäuerle D. Laser-induced Particle Removal from Silicon Wafers // *Proc. SPIE*. – 2000. – V. 4065. – P. 249–259.
3. Mutin T., Smirnov V., Veiko V., Volkov S. Cleaning laser spark spectroscopy for online cleaning quality control method development // *Proc. SPIE*. 2010. – V. 7996. – P.7996-40.
4. Industrial Laser Solutions [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.industrial-lasers.com/articles/print/volume-21/issue-3/features/working-on-the-railroad.html>, свободный.
5. Cremers D.A., Radziemski L.J. Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy. – John Wiley & Sons, Ltd. – 2006. – 313 p.
6. Lentjes M., Klomp D. and K. Dickmann. Sensor Concept for Controlled Laser Cleaning via Photodiode. Lasers in the Conservation of Artworks // *LACONA V Proceedings*. – Osnabrück, Germany. – Sept. 15–18. – 2003. – P. 193–195.
7. Klein S., Stratoudaki T., Zafiropulos V., Hildenhagen J., Dickmann K., Lehmkuhl Th. Laser-induced breakdown spectroscopy for on-line control of laser cleaning of sandstone and stained glass // *Appl. Phys. A*. – 1999. – V. 69. – P. 441–444,
8. Scholten J.H., Teule J.M., Zafiropulos V., Heerenc R.M.A. Controlled laser cleaning of painted artworks using accurate beam manipulation and on-line LIBS-detection // *J. Cult. Heritage*. – 2000. – V.1. – P. 215–220.
9. Lentjes Marco, Dickmann Klaus and Meijer Johan. Controlled Laser Cleaning of Artworks with Low Resolution LIBS and Linear Correlation Analysis // *International Conference on Applications of Lasers and Electro-optics, ICALEO'05*. – 31 Oct.–3 Nov. – 2005. – Miami, USA. – P. 286–292.
10. Whitehead D.J., Crouse P.L., Schmidt M.J.J., Li L., Turner M.W., Smith A.J.E. Monitoring laser cleaning of titanium alloys by probe beam reflection and emission spectroscopy // *Appl. Phys. A*. – 2008. – V. 93. – P. 123–127.

ИНТЕГРАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ КОМПЬЮТЕРНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ОНТОЛОГИИ

И.А. Семерханов

Научный руководитель – к.т.н., доцент Д.И. Муромцев

Рассматриваются проблемы интеграции сложных распределенных компьютерных систем. Автор проводит анализ основных подходов к их интеграции и предлагает способ решения проблемы семантической интероперабельности. Подход, основанный на метаданных, предложенный автором, будет использовать онтологию предметной области для создания общей метамодели между системами. Представлена концептуальная и архитектурная схемы, с помощью которых можно реализовать решение.

Ключевые слова: интеграция, интероперабельность, семанетик веб, метаданные, онтология.

Введение

Под интеграцией данных в информационных системах понимается объединение данных, находящихся в различных источниках, и предоставление данных пользователям в унифицированном виде. Традиционные методы и средства интеграции информационных систем, основанные на ручном построении правил обмена между ними и создании соответствующих приложений-конверторов, не отвечают современным потребностям отрасли и современному уровню развития информационных технологий. В последние годы в широко развернувшихся во многих странах разработках электронных библиотек проблемы интеграции неоднородных данных стали играть ключевую роль, причем возникает также задача интеграции текстовых информационных ресурсов из различных независимых источников [1]. Сложность решения проблемы существенным образом зависит от уровня интеграции, который необходимо обеспечить, свойств отдельных источников данных и всего множества источников в целом, требуемых способов интеграции.

В рамках активно развивающегося проекта «Система информационной поддержки проектной деятельности» (СПИД) НИУ ИТМО была сформулирована задача по интеграции распределенных компьютерных систем университета. На данный момент сведения о проектах и результатах научно-практической деятельности в университете вносятся в большое количество различных компьютерных систем. К результатам научно-практической деятельности относятся публикации (статьи, тезисы, монографии), участие/проведение мероприятий (конференции, выставки), результаты интеллектуальной деятельности (изобретения, ноу-хау, полезные модели, промышленные образцы, программы для ЭВМ), награды и прочие. Источниками этой информации могут быть студенты, аспиранты, преподаватели, сотрудники, творческие коллективы, подразделения, в том числе кафедры, и собственно университет. Для совместного функционирования систем необходимо решить задачу интеграции данных между различными распределенными систем НИУ ИТМО.

Подходы к интеграции сложных систем

Проблемы интеграции сложных компьютерных систем обуславливаются тем, что компьютерные системы в большинстве случаев являются распределенными, т.е. физически удалены друг от друга. Помимо этого, различные информационные системы строятся на различных технологиях с применением разных протоколов обмена данными. Кроме того, чаще всего информационные системы проектируются для работы независимо от других систем. Все эти факторы препятствуют построению единого унифицированного хранилища данных.

В решении задачи по интеграции информационных систем важную роль играет понятие интероперабельности. Под этим понятием понимается способность информационной системы взаимодействовать с другими системами. Такое взаимодействие может выражаться в виде обмена данными, распределенного выполнения поисковых запросов, согласованного изменения баз данных. Проблема обеспечения интероперабельности информационных систем имеет фундаментальный характер. Она актуальна как для унаследованных систем, которые требуется связать с вновь создаваемыми, так и для проектируемых хранилищ данных, в которых необходимо предусмотреть возможности реализации взаимодействия с другими системами в перспективе.

Можно выделить два вида интероперабельности: структурный и семантический. Структурный вид означает способность к структурному согласованию сущностей систем. Семантический вид означает возможность установления соответствия между смыслами единиц информационных систем. Существующие методы решения проблемы интеграции в основном направлены на решение проблемы структурной интероперабельности. На данный момент отсутствуют четко сформулированные методы решения проблемы семантической интероперабельности. Основные типичные проблемы, препятствующие созданию такого метода заключаются в следующем:

- многократное избыточное описание предметов и процессов предметной области;
- концептуальная несовместимость, нецелостность, противоречивость и т.п.
- необходимость учета знания об обработке данных, распределенного между их структурой и процедурами их обработки, при формировании единого информационного хранилища;
- проблемы интероперабельности разноплатформенных данных и интерфейсов, унаследованных и вновь разрабатываемых программных комплексов.

На данный момент уже существуют примеры проектов, в которых попытались использовать семантическую интероперабельность [2].

- eCulture – семантическая поисковая система, которая позволяет одновременно искать в нескольких коллекциях учреждений культурного наследия. Работает путем переноса коллекций в RDF, связывая объекты коллекций как экземпляры классов через общедоступные словари, тем самым создавая большой RDF-граф.
- Проект IPISAR исследует распространение, изучение и рациональное использование культурного наследия. В рамках проекта предложен ряд идей, которые возможно, упростят интеграцию информации. В проекте разработано приложение «Pescador», которое будет хранить каталогизированные данные в устойчивых триплсторах.
- Онтология SWHi разработана для электронной библиотеки с точки зрения, когда основные источники данных в репозитории описаны метаданными. Эти метаданные отображаются и хранятся в онтологии, которая базируется на онтологии схемы. Для обогащения онтологии также добавляют новую, связанную информацию из выбранных веб-документов.
- Проект AMA – для упрощения и доступности процесса отображения было разработано программное обеспечение (ПО) AMA Mapping Tool. Этот инструмент способствует сопоставлению различных моделей данных с разной структурой, в том числе и работа с неструктурированными данными (текстовое описание). ПО AMA Mapping Tool основывается на известной онтологии CIDOC CRM. Для неструктурированных документов используется ПО AMA TextTool. Большая часть информации для наполнения CIDOC CRM-онтологии получается из текстов вручную. Для этого в рамках проекта разработано ПО AMA TextTool, которое предназначено для полуавтоматического кодирования археологических текстов в CIDOC-CRM. Данное ПО работает на понятиях и методиках компьютерной лингвистики.

Один из подходов к интеграции данных заключается в использовании метаданных для описания информационных ресурсов. Однако в том виде, в котором данный подход в основном используется, он обеспечивает лишь описание структур информационных единиц, без анализа их смысла и назначения. На основании такого описания невозможно делать корректные выводы о соответствии информационных единиц и их связей в различных системах, функционирующих в одной предметной области. Для формирования заключений необходимо оперировать не только структурными характеристиками объектов информационных систем, но и оценивать их смысловое назначение, погруженное в единое информационное пространство определенной предметной области.

В любой системе существуют две основные категории предметов восприятия, такие как сами объекты, составляющие систему, и взаимосвязи между этими объектами. В терминах онтологии, понятие взаимосвязи описывает зависимости между объектами системы в реальном мире, а термины – описывают сами реальные объекты. Онтологическая модель помогает описывать поведение объектов и соответствующее изменение взаимосвязей между ними. Таким образом, онтология представляет собой словарь данных, включающий в себя и терминологию, и модель поведения системы. Поскольку каждая концептуальная модель предметной области является подмножеством онтологии, задача интеграции информационных систем сводится к задаче объединения метамodelей информационных систем, т.е. построения отображений между этими метамodelями, в терминах онтологии [3].

Предлагаемое решение

В программном решении будут создаваться RDF-утверждения на основе информации, извлеченной из реляционных баз данных интегрируемых информационных систем и онтологии предметной области. Для этого сначала из интегрируемых систем будут извлекаться структурные схемы данных для достижения структурной интероперабельности. Для осуществления семантической интероперабельности будет использоваться концептуальная модель предметной области. Эта модель будет создаваться для каждой информационной системы при помощи онтологии. Онтология содержит словарь концептов и хранит общую сеть связей между этими концептами. Далее строится общая модель взаимодействия двух информационных систем на основе концептуальных моделей и онтологии. На рис. 1 изображена концептуальная схема предлагаемого решения.

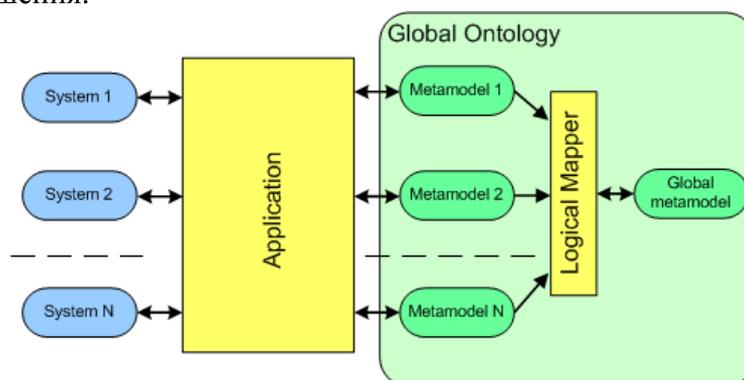


Рис. 1. Концептуальная схема решения

Для решения проблемы интеграции разрабатывается специальная онтология университета [4]. Моделирование онтологии конкретных предметных областей, является дорогой и трудоемкой задачей, требующей участия экспертов. Однако данная работа должна быть выполнена только один раз основным сообществом, которое умеет разрабатывать и поддерживать словари с помощью средств совместной работы,

разработанных сообществом Semantic Web. Даже не эксперты могут добавлять и отображать новые источники данных с помощью широко признанных вспомогательных онтологий, например, Dublin Core, FOAF, SOAP, DOAP и т.д. Для конкретной прикладной области разумным считается следующий подход:

- вначале выполнить поиск существующих онтологий;
- затем заполнить разрывы между ними на основе подхода снизу-вверх, от частных понятий к более общим.

Эксперименты во многих прикладных проектах Semantic Web показали, что подход сверху-вниз часто является не очень многообещающим, приводящим к долгим философским спорам между участниками. Обычно не практичным является также попытка описать сразу всю предметную область, хотя начальные источники данных описывают только небольшую часть данной предметной области. Вместо этого лучше использовать подход снизу-вверх и моделировать необходимые понятия и концепты на основе существующих онтологий, в то же время сохраняя некоторую степень обобщенности и планируя возможные будущие точки расширения.

Для взаимодействия со всеми информационными системами предлагаемое программное средство будет использоваться для обмена данными технологий веб-сервисов SOAP. Веб-сервисы поддерживают различные стандарты, такие как HTTP, XML-протоколы, SOAP и WSDL. Это означает, что приложения, базирующиеся на разных платформах и написанные на разных языках, могут легко обмениваться данными через Интернет, используя веб-сервисы. SOAP является XML-протоколом от W3C для обмена данными по протоколу HTTP. Он обеспечивает простой, основанный на стандартах, метод для отправки XML-сообщений между приложениями. Веб-сервисы используют SOAP для передачи сообщений между провайдерами и их клиентами. Поскольку HTTP поддерживается всеми веб-серверами и браузерами, SOAP-сообщения можно передавать между приложениями, независимо от их платформы и языка разработки. На рис. 2 изображена архитектурная схема предлагаемого решения.

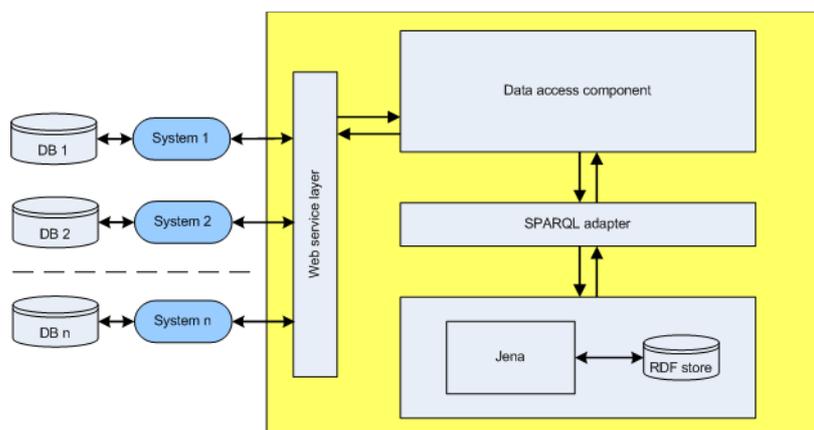


Рис. 2. Архитектурная схема решения

Заключение

При успешной реализации решения по интеграции распределенных компьютерных систем университета будут представлены метод и инструмент, которые смогут включать в единое информационное поле, задаваемое онтологией, различные информационные системы, а также предоставлять возможность взаимодействия с другими системами из данной предметной области.

Использование семантических форматов позволит в перспективе осуществлять интеграцию как с вновь разрабатываемыми системами, так и с внешними информационными ресурсами.

Литература

1. Kalinichenko L.A., Briukhov D.O., Skvortsov N.A., Zakharov V.N. Infrastructure of the subject mediating environment aiming at semantic interoperability of heterogeneous digital library collections // Second Scientific Conference «Digital Libraries: Advanced Methods and Technologies, Digital Collections». – Protvino, 2000. – P. 78–90.
2. Новицкий А.В. Обзор некоторых направлений интеграции гетерогенных ресурсов в электронных библиотеках // Труды 11 Всероссийской научной конференции «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции». RCDL'2009. – Петрозаводск, Россия, 2009. – С. 350–356.
3. Семерханов И.А., Варгин Г.В., Муромцев Д.И. Применение онтологий в системе управления интеллектуальными ресурсами // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2011. – № 2 (72). – С. 170–171.
4. Semerhanov I.A., Vargin G.V., Muromtsev D.I. Integration of computer systems with the use of ontology // 12th Conference of Open Innovations Association FRUCT. – Oulu, Finland. – 5–9 November. – 2012. – P. 290–293.

УДК 547.97: 535.8; 541.147

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОЧАСТИЦ SiO₂ НА САМООРГАНИЗАЦИЮ В УЛЬТРАФИОЛЕТ- ПОЛИМЕРИЗУЕМЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ

С.А. Семьина

Научный руководитель – д.ф.-м. н., профессор И.Ю. Денисюк

Исследование посвящено разработке метода изготовления нанокompозитов, основанного на процессах самоорганизации при формировании тонких полимеризуемых оболочек вокруг каждой наночастицы, и приводящего к получению оптического квазигомогенного материала. В работе продемонстрированы изменения оптических и структурных свойств полимерных нанокompозитов с помощью различных методик измерения. Рассмотрена гипотеза о влиянии наночастиц на процесс полимеризации в качестве фотокатализаторов. Представлены примеры использования нанокompозитов в роли материала для изготовления структур с высоким форматным соотношением и улучшенным пространственным разрешением в нанометровом масштабе.

Ключевые слова: нанокристалл, показатель преломления, наполненный полимер, УФ-отверждаемый нанокompозит, структура нанокompозита, наночастица.

Введение

Введение наночастиц металлов и их оксидов в полимерные матрицы в последние годы является интенсивно развиваемой областью физикохимии наноразмерного состояния. Структурная организация таких наноразмерных частиц – серьезнейшая проблема, без решения которой трудно определить и оптимизировать области их практического использования. Необходимость повышения устойчивости нанокompозитов и контроля над обратимыми переходами в таких системах привлекает все более пристальное внимание к поиску путей управления их морфологией, структурной организацией и архитектурой. Поиск и исследование саморегулирующихся систем, в которых одновременно протекают синтез полимерной матрицы и процесс зарождения и роста наночастиц, может стать наилучшим решением задачи стабилизации наночастиц полимерами и их структурной организации [1–3].

Несмотря на разнообразие исследований, практически отсутствуют данные по оптическим наноматериалам, в которых высокая концентрация наночастиц сочетается с хорошими оптическими свойствами. Трудность задачи заключается в том, что высокая

концентрация структурирующих добавок может, и обычно сопровождается, значительным светорассеянием либо на них, либо на флуктуациях их концентрации.

Настоящая работа является продолжением исследований лаборатории кафедры Оптики квантоворазмерных систем НИУ ИТМО в области наноструктурирования полимеров оптического назначения [4, 5]. Авторами были изготовлены оптически прозрачные нанокомпозиты, получаемые при синтезе полимерной матрицы в присутствии наночастиц, активно воздействующих на морфологию материала.

Целью работы являлось исследование структурных изменений полимерных УФ-отверждаемых нанокомпозитов как основных причин, определяющих их свойства, такие как механические, сорбционные и оптические. Как было обнаружено, наночастицы SiO_2 активно участвуют в процессе УФ-полимеризации. Введение в полимеризуемый состав наночастиц SiO_2 приводит к образованию прозрачного и малорассеивающего нанокомпозита с хорошими эксплуатационными свойствами.

Условия эксперимента

В работе использовались акрилатные мономеры, инициатор УФ-полимеризации. В качестве структурирующего наномодификатора были использованы наночастицы SiO_2 размером 14 нм.

Полимерные пленки (толщина 100 мкм) получали из ранее приготовленных мономерных растворов, помещенных между двух лавсановых пленок для исключения ингибирующего воздействия кислорода воздуха, с последующим УФ-отверждением мономера.

Спектры пропускания пленок были измерены на спектрофотометре Perkin-Elmer 555 UV-Vis. Показатель преломления измерялся на рефрактометре ИРФ-454 методами в соответствии с рекомендациями европейского стандарта ASTM D542. Твердость измерялась по методу Бринелля с помощью микротвердомера «Булат-Т1». Рассеяние света измерялось при помощи фотометрического шара методами в соответствии с рекомендациями европейского стандарта ASTM D1003. Исследование профиля поверхности образцов на атомно-силовом микроскопе Ntegra проводилось в контактном режиме.

Эксперимент и обсуждение результатов

При введении SiO_2 в мономерную композицию BisA/2Carb (30/70), начиная с концентрации 8 вес.%, происходит заметное увеличение вязкости растворов. При более высоких концентрациях (10 вес.% и выше) раствор приобретает характер малотекучего геля.

Совместимость наночастиц SiO_2 с мономерной смесью BisA/2Carb (30/70) с образованием прозрачной пленки при УФ-полимеризации наблюдается вплоть до 12 вес.%. При введении в мономерную композицию BisA/2Carb (30/70) более 12 вес.% частиц SiO_2 при УФ-полимеризации образуются непрозрачные сильно рассеивающие пленки. Происходит расслоение системы, она становится гетерогенной.

Полученные пленки прозрачны в видимой и УФ области спектра. При высоких концентрациях наночастиц (более 8 вес.%), происходит значительное понижение оптического пропускания.

На рис. 1, а, представлены расчетные и экспериментально полученные значения показателей преломления нанокомпозиционных материалов.

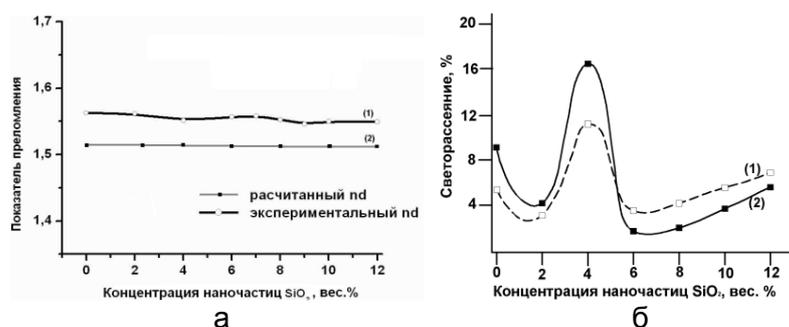


Рис. 1. Зависимость показателя преломления (а); светорассеяния (б). Кривая 1 – до влагопоглощения, кривая 2 – после влагопоглощения для композиций BisA/2Carb от концентрации наночастиц при введении 0, 4, 12 вес.% SiO₂

Для теоретического расчета значений показателя преломления использовалась модель эффективной среды Максвелла–Гарнета [6]. Вычисления производились по формуле (1):

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_2}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_2} = f_1 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2}, \quad (1)$$

где ε_1 – диэлектрическая проницаемость среды; ε_2 – диэлектрическая проницаемость включений; ε_{eff} – диэлектрическая проницаемость композитной среды; $f_1 = (1/V)\sum V_i$ – объемный фактор заполнения (V_i – объем i -ой частицы, V – объем композитной среды).

Данная модель применима в том случае, когда объемный фактор заполнения $f_1 \leq 1/3$, т.е. доля включений невелика.

Экспериментально полученные значения для пленочных образцов ниже теоретически рассчитанных. Предположительно, это происходит вследствие недополимеризации мономерной композиции. При введении максимально возможной концентрации SiO₂ (12 вес.%) показатель преломления композиции уменьшается на 0,02 по сравнению с исходной мономерной смесью.

На рис. 1, б, продемонстрирована зависимость светорассеяния полимерной композиции BisA/2Carb от концентрации наночастиц SiO₂. До концентрации 8 вес.%, вследствие недостатка вводимого наномодификатора, структурированный полимерный композит неоднороден, что проявляется в немонотонном изменении величины светорассеяния. При концентрации нанодобавки свыше 8 вес.% светорассеяние перестает зависеть от концентрации добавки. SiO₂ достаточно для равномерного распределения по всему объему и происходит формирование квазигомогенного композита. Для такой структуры наблюдается снижение рассеяния света нанокompозитом по сравнению с чистым мономерным составом приблизительно в два раза.

Косвенным способом изучения влияния SiO₂ на структуру формирующегося композита является исследование твердости пленок (рис. 2).

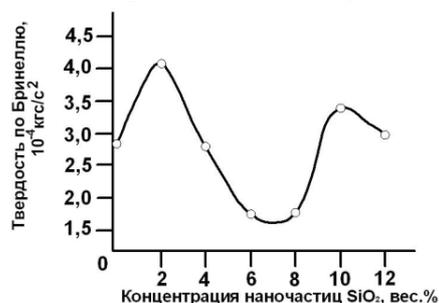


Рис. 2. Твердость по Бринеллю для композиции BisA/2Carb (30/70) в зависимости от концентрации наночастиц SiO₂

Твердость пленок при введении 2 вес.% SiO_2 резко возрастает по сравнению с исходной. В области концентраций 2–8 вес.% наблюдается резкое уменьшение твердости композита, т.е. происходит разрыхление полимерного каркаса. При увеличении концентрации SiO_2 значения твердости начинают увеличиваться и при максимальной концентрации SiO_2 12 вес.% сопоставимы с величиной чистого полимера.

Характер изменения исследуемых в работе свойств полимерного нанокомпозита (светорассеяние, твердость) говорит о модификации надмолекулярной структуры исходного полимера при введении нанодобавки в результате возможного взаимодействия SiO_2 с активными группами полимера [7].

Подтверждением вышеизложенного являются микрофотографии (рис. 3) изменения рельефа поверхности и жесткости полимера при введении наночастиц, исследованные методом атомно-силовой микроскопии (АСМ).

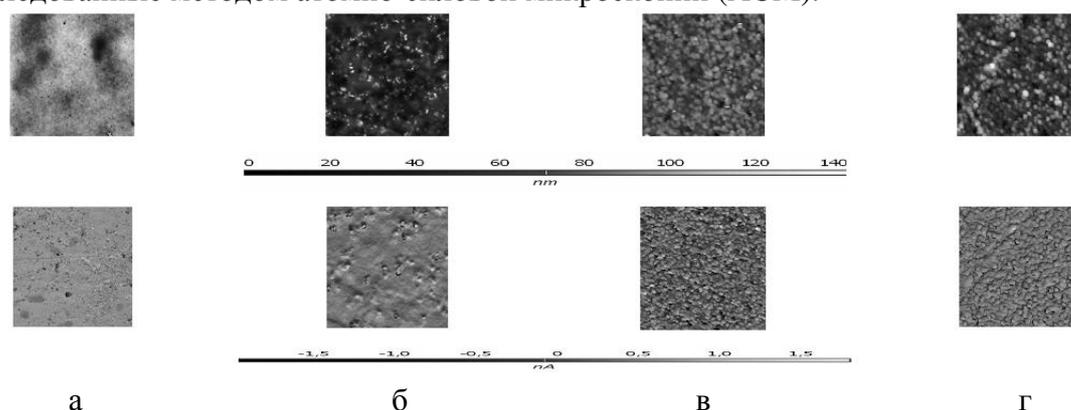


Рис. 3. Рельеф (верх) и жесткость поверхности (низ) полимерных пленок при введении 0 вес.% (а), 4 вес.% (б), 8 вес.% (в), 12 вес.% (г) наночастиц SiO_2 . АСМ. Размер фотографий $5 \times 5 \mu\text{м}$

Как видно, уже при введении 4 вес.% наночастиц SiO_2 , происходят существенные изменения структуры композиции по сравнению с исходной для чистого полимера. Отчетливо наблюдается формирование отдельных полимерных областей, структурированных SiO_2 . При введении 12 вес.% SiO_2 видна зернистая структура, равномерная по всему материалу. Данная зернистая структура обусловлена, по-видимому, как способностью наночастиц SiO_2 образовывать слабые связи с активными группами мономерных молекул, так и выступать в качестве центров полимеризации последних. При малых концентрациях наночастиц сосуществуют две фазы: полимерная и структурированная. Начиная с концентраций SiO_2 более 8 вес.%, практически исчезает свободная полимерная фаза, а весь имеющийся полимер образует сферы на наночастицах.

Исходя из вышеизложенного, наночастицы SiO_2 выступают в качестве центров образования новой полимерной фазы – нанокомпозита, с иными, чем у чистого полимера, свойствами. При малых концентрациях наночастиц, образуемые ими области модифицированного полимера немногочисленны и композит неоднороден, что проявляется в его свойствах. С увеличением концентрации SiO_2 размеры и количество гибридных областей растут, обуславливая тем самым возникновение совершенно иной структуры материала.

Именно это, т.е. образование субмикронных сфер вокруг каждой наночастицы и является причиной формирования квазигомогенного материала, величина светорассеяния в котором не превосходит значения для чистого полимера. Действительно, как показывают микрофотографии (рис. 3), субмикронные сферы, образованные вокруг каждой наночастицы, имеют практически идентичные диаметры, что может быть объяснено их одинаковыми скоростями роста.

Результатом этого является выстраивание сферических частиц в самоорганизованную квазирешетку, которое в конце концов приводит к однородному распределению наночастиц и формированию гомогенной среды.

Заключение

В работе исследовались пленочные полимерные нанокомпозиты на основе BisA/2Carb (30/70) с их модификацией наночастицами SiO₂. В зависимости от концентрации наночастиц изучались изменения твердости по Бринеллю, оптического пропускания, показателей преломления и светорассеяния. Композиты прозрачны в видимой области спектра при высоких концентрациях наночастиц SiO₂ (9 вес.%) для BisA/2Carb (30/70). При введении 12 вес.% SiO₂ показатель преломления уменьшается на 0,02.

Значения твердости при максимальных концентрациях наночастиц 12 вес.% SiO₂ не превышают значения твердости чистого полимера, при этом светорассеяние не увеличивается.

Наблюдаемая немонотонность изменения свойств, данные по микрофотографиям пленок (АСМ) свидетельствуют о способности наночастиц выступать центрами полимеризации и, следовательно, образования новой структурированной фазы – нанокомпозита.

Литература

1. Rozenberg A.S., Dzhardimalieva G.I., Pomogailo A.D. Polymer Composites of Nano-sized Particles Isolated in Matrix // Polym. Adv. Technol. – 1998. – V. 9. – P. 527–535.
2. Pomogailo A.D., Savostyanov V.S. Synthesis and Polymerization of Metal-Containing Monomers. – CRC Press, Boca Raton, London, NY, 1994. – 164 p.
3. Pomogailo D., Rozenberg A.S., Dzhardimalieva G.I., Leonowicz M. // Adv. Mat. Sci. – 2001. – V. 1. – P. 19–27.
4. Бурункова Ю.Э., Семьина С.А., Капорский Л.Н., Левичев В.В. Наномодифицированные оптические акрилатные композиты // Оптический журнал. – 2008. – Т. 75. – № 10. – С. 54–56.
5. Denisyuk I.Yu., Williams T.R., Burunkova J.E. Hybrid optical material based on high nanoparticles concentration in UV-curable polymers – technology and properties // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2008. – V. 497. – P. 142–153.
6. Виноградов А.П. Электродинамика композитных материалов. – М.: УРСС, 2001. – 208 с.
7. Jigueta S., Bertscha A., Judelewicz M., Hofmann H., Renauda P. SU-8 nanocomposite photoresist with low stress properties for microfabrication applications // Microelectronic Engineering. – 2006. – № 83. – P. 1966–1979.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ЛАЗЕРНОГО ОКИСЛЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ХРОМА

Д.А. Синев

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.А. Шахно

Термохимическое воздействие лазерного излучения на тонкие металлические пленки является основой для ряда методов получения планарных микро- и наноразмерных элементов, и используется, например, для прецизионного изготовления дифракционных оптических элементов. Обрабатываемые для этих целей пленки хрома могут быть облучены в различных режимах (однолучевом, многолучевом, многопроходовом), что приводит к усложнению задач теоретического моделирования этого процесса. В работе приведены обоснования целесообразности применения многопроходового метода облучения при лазерной локальной термохимической обработке тонких пленок хрома.

Ключевые слова: лазерная термохимия, взаимодействие лазерного излучения с веществом, тонкие металлические пленки.

Введение

Воздействие лазерного излучения является основой для ряда методов получения планарных микро- и наноразмерных элементов. Особенностью лазерной термохимической технологии является тот факт, что пленка локально, в пределах облученной зоны, в процессе окисления материала приобретает иные физико-химические свойства, и это позволяет выявить структуру нанесенного изображения путем жидкостного химического травления. Одной из основных областей применения этой технологии с использованием пленок хрома является прецизионное изготовление дифракционных оптических элементов (ДОЭ) [1], которое является сложной технической задачей. В настоящее время используются несколько основных способов изготовления ДОЭ: оптические (интерференционные или голографические), алмазное точение, запись сканирующим пучком (электронным или лазерным). Оптические методы широко применялись на раннем этапе развития дифракционной оптики. Возможности этих методов ограничены в основном изготовлением круговых или линейных зонных пластинок с киноформным профилем. Алмазное точение – хорошо зарекомендовавший себя и широко применяемый процесс для изготовления высокоточных оптических поверхностей в металлах, полимерах и кристаллах. Однако область применения алмазного точения ограничена изготовлением элементов с аксиальной симметрией. Сканирующие методы прямой лучевой записи являются наиболее универсальными и широко используются также в микроэлектронике [2]. В связи со всплеском интереса в последнее время к формированию структур микро- и нанометровых размеров, представляется необходимым сфокусировать внимание на развитии исследований в данной области в соответствии с современными инновационными тенденциями.

Многопроходовой режим обработки

Однолучевое воздействие. Для совершенствования существующей технологии формирования планарных микро- и наноструктур методами лазерного термохимического воздействия может быть предложено облучение тонких пленок хрома несколько раз по одной и той же траектории (многопроходовой режим). В этом случае из-за изменения оптических свойств хрома происходит усугубление роста толщины оксида локально в области трека. Для теоретического моделирования окисления тонкой пленки хрома при многопроходовом режиме облучения в исходную модель, разработанную для окисления пленки одиночным сканирующим пучком с

гауссовым распределением интенсивности в пучке [3], было введено допущение о том, что после каждого прохода, вследствие формирования на поверхности металла слоя окисла, поглощательная способность материала увеличивается пропорционально толщине окисла. При этом изменение теплофизических характеристик (тепло- и температуропроводности) было, в отличие от методики, использованной в новейшей работе [4], сочтено незначительным, в силу относительной малости толщины окисла по сравнению с толщиной пленки хрома.

Проведение расчетов позволило получить возникающие последовательно, от прохода к проходу, пространственные распределения толщины возникающего окисла (рис. 1, а). Очевидным, как и ожидалось, явилось постепенное углубление окисленной области, и уже к четвертому проходу сканирующего непрерывного лазерного луча мощностью 3,7 мВт толщина окисла была равна ~3 нм и являлась достаточной для защиты от травителя и уверенного формирования топологии элемента.

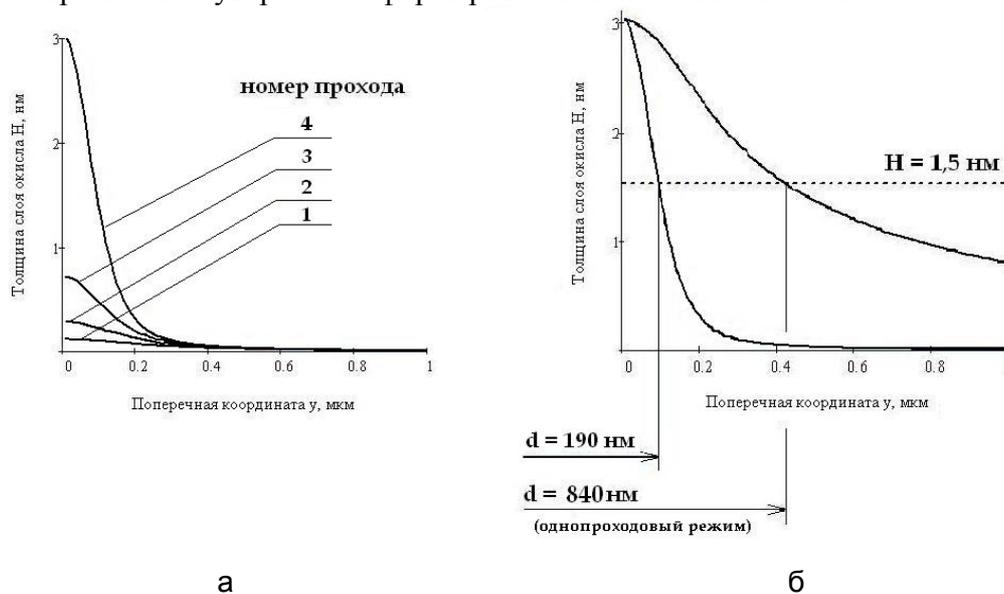


Рис. 1. Поперечное распределение толщины окисленного слоя, возникающего при различном количестве проходов сканирующего лазерного луча (а); сравнение толщин возникающего окисла хрома при обработке сканирующими непрерывными лазерными лучами при четырех проходах со скоростью сканирования $V_{ск} = 0,5$ м/с (нижний график) и при одном проходе со скоростью сканирования $V_{ск} = 0,069$ м/с (верхний график) (б). $P = 3,7$ мВт, $r_0 = 0,2$ мкм, $h_{Cr} = 30$ нм

Принципиальным для доказательства утверждения, что многопроходный режим облучения более перспективен и обладает большим количеством возможностей, чем однопроходный, являлось сравнение требуемых режимов для получения одинаковых результатов. В таком случае, в соответствии с рис. 1, б, для получения окисла такой же толщины в центре облучаемой зоны, как при четырех последовательных проходах, при однократном облучении лазерным пучком потребовалось бы уменьшить скорость сканирования с $V_{ск} = 0,5$ м/с до значения $V_{ск} = 0,069$ м/с при сохранении всех параметров облучения, включая мощность $P = 3,7$ мВт. В этом случае, вследствие высокого уровня тепловой диффузии, минимально возможным для получения размером элемента, судя по уровню $H = 1,5$ нм (толщина слоя окисла, принимаемого достаточным для защиты от травления), была бы область диаметром $d = 840$ нм. Соответствующее значение для многопроходной обработки равно $d = 190$ нм; таким образом, режим многопроходной обработки не только позволяет увеличить производительность в 1,5–2 раза, но и качественно повышает технологическую разрешающую способность, в 4,4 раза уменьшая размер элемента, минимально возможного для получения.

Двулучевое воздействие. Построенные ранее модели многолучевого [4] и многопроходного воздействия были использованы для изучения роста оксидного слоя при многопроходном воздействии одновременно двух лазерных лучей. Как и в предыдущих исследованиях, образование устойчивого к травлению слоя оксида толщиной 1,5 нм было засвидетельствовано к четвертому проходу при облучении двумя идентичными источниками излучения суммарной мощностью 5 мВт (рис. 2, а), сканирующими образец одновременно параллельно друг другу на расстоянии 3,2 мкм между их центрами.

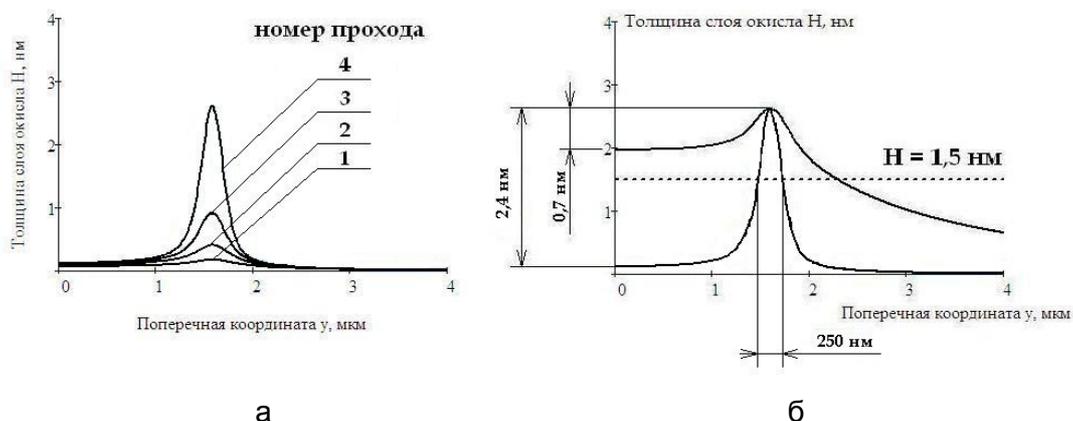


Рис. 2. Пространственное распределение толщины слоя оксида и его рост в зависимости от количества проходов (а); сравнение толщин возникающего оксида хрома при однопроходовом (верхний график, $V = 0,128$ м/с) и многопроходном (нижний график, четыре прохода, $V = 0,5$ м/с) двулучевом воздействии (б). $P = 2,5$ мВт, $r_0 = 0,2$ мкм, $h_{Cr} = 30$ нм

Кроме того, как было показано, многопроходное облучение в данном случае не влияет на производительность технологии (скорость записи образцов 0,128 м/с и 0,125 м/с при одном и при четырех проходах соответственно). Однако необходимость получения при одном проходе слоя оксида такой же толщины (2,6 нм) вынуждает, как уже отмечалось выше при моделировании многопроходного однолучевого воздействия, уменьшить скорость сканирования, в данном случае до указанного выше значения 0,128 м/с, что, в свою очередь, приводит к резкому усилению тепловой диффузии. Результирующее температурное поле продуцирует оксидное распределение, которое не может считаться контрастным, поскольку в центре между треками толщина слоя достигает 2 нм, превышая ключевую отметку в 1,5 нм (рис. 2, б). В отличие от однопроходового режима, многопроходный – демонстрирует впечатляющий контраст, усугубляемый от прохода к проходу.

Заключение

Проведенное исследование показало перспективность многопроходового режима лазерной обработки для повышения точности технологии термохимического формирования топологии тонкопленочных образцов. Были продемонстрированы повышение производительности и контрастности технологии создания планарных элементов субмикронного размера. Необходимо упомянуть, что успешными могут также оказаться эксперименты по облучению пленок хрома в несколько проходов с поэтапно уменьшающейся мощностью излучения, а теоретическое моделирование в данной области может быть в перспективе изучено на базе настоящей работы.

Литература

1. Вейко В.П., Корольков В.И., Полещук А.Г., Саметов А.Р., Шахно Е.А., Ярчук М.В. Исследование пространственного разрешения лазерной термохимической технологии записи дифракционных микроструктур // Квантовая электроника. – 2011. – Т. 41. – № 7. – С. 631–636.
2. Коронкевич В.П., Полещук А.Г., Седухин А.Г., Ленкова Г.А. // Лазерные интерферометрические и дифракционные системы. – Компьютерная оптика. – 2010. – Т. 34. – № 1. – С. 4–23.
3. Veiko V.P., Shakhno E.A., Poleshchuk A.G., Korolkov V.P., Matyzhonok V.N. Local laser oxidation of thin metal films: ultra-resolution in theory and in practice // Journal of Laser Micro/Nanoengineering. – 2008. – V. 3. – № 3. – P. 201–205.
4. Вейко В.П., Синев Д.А., Шахно Е.А., Полещук А.Г., Саметов А.Р., Седухин А.Г. Исследование особенностей многопучковой лазерной термохимической записи дифракционных микроструктур // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36. – № 4. – С. 562–571.

УДК 535

НЕЛИНЕЙНЫЕ СПИРАЛЬНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ

А.П. Слобожанюк

Научный руководитель – д.ф.-м.н., гл.н.с. П.А. Белов

В работе продемонстрирован новый элемент для метаматериалов, который сочетает электромагнитный, механический и тепловой отклик благодаря своей структуре. Посредством конформационных изменений таких элементов обеспечивается двойной механизм нелинейности, а также нелинейная хиральность. Наше предложение открывает широкие перспективы дальнейшего развития нелинейных метаматериалов и фотонных структур и способствует разнообразию в их конструировании и управлении.

Ключевые слова: метаматериалы, нелинейность.

Введение

Метаматериалы – структурированные искусственные материалы, разработанные для получения необычных электромагнитных свойств – представляют популярную область исследований в теоретической и экспериментальной физике [1, 2] и находят применение для разнообразных приложений: от субволнового разрешения [3] и трансформационной оптики [4] до перестраиваемых и активных материалов [5], фотоники [6] и плазмоники [7]. В тоже время, соответствующие идеи были восприняты в акустике для создания материалов с нетипичным механическим поведением [8, 9]. Очевидно, что одновременный контроль над электромагнитными, механическими и тепловыми свойствами предоставляет любопытные возможности, о чем свидетельствует, например, механически перестраиваемые [10] и термически реконфигурируемые [11, 12] метаматериалы.

До последнего времени, возможность управления электромагнитными свойствами достигалась разработкой такой структуры метаматериала, чтобы обеспечивать их изменение внешним воздействием. Этот подход полезен для управляемых и перестраиваемых материалов, но не дает возможности динамического взаимодействия.

Спиральный элемент

В настоящей работе использовался простой структурный элемент, в котором проявления различной физической природы взаимосвязаны в силу его внутреннего

устройства. Такой элемент легко получить, скрутив тонкий провод в спираль (рис. 1) [13].

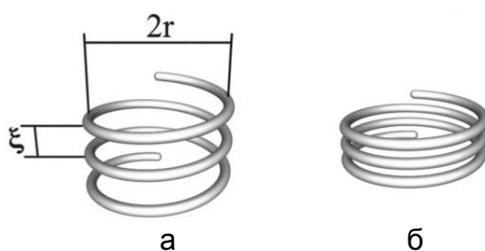


Рис. 1. Структура спиральных резонаторов до (а) и во время (б) сжатия

С электромагнитной точки зрения, получается резонатор с хиральными свойствами, а с механической – пружина. Кроме того, все его характеристики существенно зависят от температуры. Это естественное «совпадение» открывает широкие возможности, коль скоро параметры спирали допускают тепло-магнито-механическое взаимодействие, приводящее к значительным изменениям ее конформации самосогласованных конформационных изменений. Падающая электромагнитная волна индуцирует ток вдоль спирального проводника, а ток вызывает силы притяжения между витками. По этой причине спираль сжимается до такого состояния, пока силы Ампера не уравниваются силой упругости пружины. Однако соответствующее изменение в геометрических параметрах спирали приведет к сдвигу частоты электромагнитного резонанса и, следовательно, изменит амплитуду тока, обуславливая обратную связь в самосогласованном режиме. Помимо этого, тепловое расширение спирали (вследствие ее нагревания при увеличении мощности падающего излучения) вносит дополнительный вклад в смещение резонанса, причем в том же самом направлении. Такой двойной конформационный эффект приводит к экзотическому нелинейному поведению.

На рис. 2 показано, что зависимость межвиткового расстояния (рис. 2, а), температуры (рис. 2, б) и намагниченности (рис. 2, в) от интенсивности внешнего поля является существенно нелинейной, отражая непрерывный переход через «конформационные состояния» в «мета-молекулах».

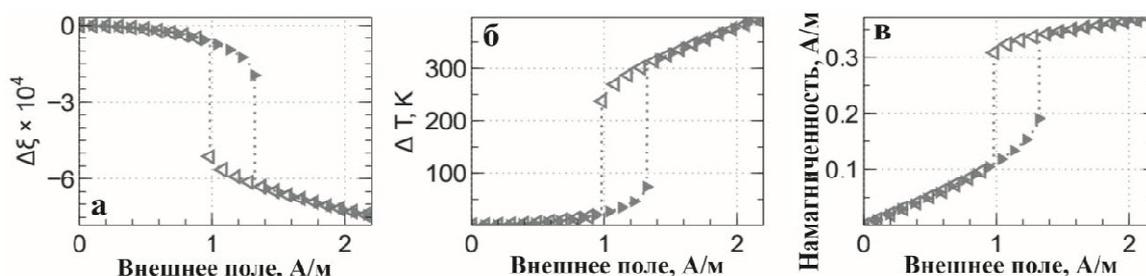


Рис. 2. Зависимость характеристик метаматериала от амплитуды внешнего поля: межвиткового расстояния (а); температуры (б); намагниченности (в)

Для экспериментов в микроволновом частотном диапазоне была сконструирована спираль с несколькими витками (рис. 3). Спираль располагалась в центре магнитной антенны (внутренний радиус антенны 7 мм). Антенна возбуждалась векторным анализатором цепей (Agilent E8362C PNA). Геометрические параметры были подобраны так, чтобы механический отклик спирали преобладал над ее тепловым расширением. По приведенным на рис. 4 экспериментальным спектрам можно судить о заметном сдвиге резонанса в сторону низких частот при увеличении мощности сигнала.

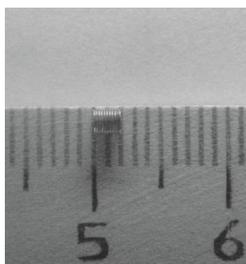


Рис. 3. Экспериментальный образец структурного элемента («мета-атома»), спираль имеет $N = 9$ витков, с параметрами: радиус спирали $r = 1,16$ мм, межвитковое расстояние $\xi = 194$ мкм, радиус проволоки $r_w = 90$ мкм

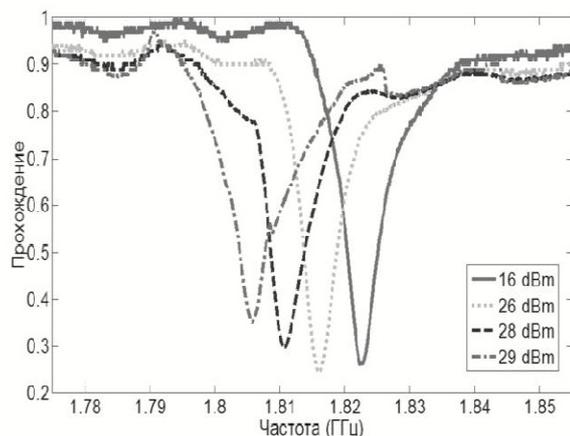


Рис. 4. Результаты измерений: спектры, полученные при приложении различной мощности

Заключение

Представленные результаты являются стартовой ступенью для дальнейшего анализа нелинейных явлений в спиральных метаматериалах. В то время как множество интересных эффектов будет проявляться при взаимодействии спиралей в массиве, суть нелинейного отклика определится свойствами отдельных спиралей, изученными в данной работе. Таким образом, данный анализ образует основу как для дальнейших исследований, так и для разработки полезных приложений.

Литература

1. Solymar L., Shamonina E. Waves in Metamaterials. – Oxford University Press. – 2009. – 368 p.
2. Marques R., Martin F., Sorolla M. Metamaterials with negative parameters. Theory, Design, and Microwave Applications. Hoboken. – New Jersey: John Wiley & Sons Inc., 2008. – 264 p.
3. Pendry J.B. Negative refraction makes a perfect lens // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85. – P. 3966–3969.
4. Pendry J.B, Schurig D., Smith D. Controlling electromagnetic fields // Science. – 2000. – V. 312. – № 5781. – P. 1780–1782.
5. Boardman A. et al. Active and tunable metamaterials // Lasers Photonics Rev. – 2011. – V. 5. – P. 287–307.
6. Shalaev V.M. Optical negative-index metamaterials // Nature Photonics. – 2007. – V. 1. – P. 41–48.
7. Schuller J.A., Barnard E.S., Cai W., Jun Y., White J.S., Brongersma M.L. Plasmonics for extreme light concentration and manipulation // Nature Materials. – 2010. – V. 9. – P. 193–204.

8. Li J., Chan C.T. Double-negative acoustic metamaterial // *Phys. Rev. E.* – 2004. – V. 70. – P. 055602.
9. Norris A.N. Acoustic cloaking theory // *Proc. Royal Soc. A.* – 2008. – V. 464. – P. 2411–2434.
10. Lapine M. et al. Structural tunability in metamaterials // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – V. 95. – P. 084105.
11. Tao H. et al. Reconfigurable terahertz metamaterials // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 103. – P. 147401.
12. Chen H.T. et al. Tuning the Resonance in High-Temperature Superconducting Terahertz Metamaterials // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – V. 105. – P. 247402.
13. Lapine M., Shadrivov I.V., Powell D.A., Kivshar Y.S. Metamaterials with conformational nonlinearity // *Scientific Reports.* – 2011. – V. 1. – P. 138.

УДК 004.02

МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА ЭКСПЕРТНЫХ ОЦЕНОК ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

Е.Н. Созинова

Научный руководитель – к.т.н., доцент Г.П. Жигулин

В данной работе рассматривается модификация метода экспертных оценок для прогнозирования в области информационных угроз. Данный метод прогнозирования позволяет решать задачи, неподдающиеся решению обычным способом. В работе описываются действия на каждом этапе экспертного оценивания, приводятся примеры проведения экспертизы, производится статистический анализ результатов.

Ключевые слова: прогнозирование, модификация, информационная безопасность, метод исследования, экспертная оценка.

Введение

Вопросы информационной безопасности занимают особое место в жизни общества и требуют к себе все большего внимания. Успех практически любой деятельности, в немалой степени, зависит от умения распоряжаться такой ценностью, как информация. Информационная безопасность – достаточно сложная и многогранная проблема, решение которой под силу хорошо организованным структурам. Успех в данной области может принести только систематический, комплексный подход. При обеспечении комплексности немаловажную роль играет прогнозирование: чем хуже работает механизм прогнозирования, тем более развитыми должны быть способы защиты, и наоборот [1].

Согласно Г. Тейлу, прогноз – это некоторое суждение относительно неизвестных, особенно будущих событий [2]. При прогнозировании развития событий, процессов и проблемных ситуаций в области информационной безопасности, широкое применение находит метод экспертных оценок [3]. Наиболее известные методы экспертных оценок: метод Дельфи, мозговой штурм и метод анализа иерархий [4].

Используя метод экспертных оценок, можно выбрать лучший вариант решения среди имеющихся; спрогнозировать развитие процессов; найти возможное решение сложных задач; решать различные задачи, неподдающиеся решению обычным аналитическим способом [4].

Основное преимущество метода экспертных оценок заключается в возможности разностороннего анализа различных проблем, также этот метод помогает предопределить развитие проблемных ситуаций, носящих долгосрочный характер.

Недостатком является сложность процедуры получения информации и сложность формирования группового мнения по индивидуальным суждениям экспертов [4, 5].

При прогнозировании развития процессов в области информационной безопасности, выявленные недостатки метода экспертных оценок являются существенными. По этой причине актуальным вопросом является модификация метода экспертных оценок для прогнозирования в области информационной безопасности, что позволит решить поставленные задачи, не поддающиеся решению обычным способом.

Модификация метода заключается в том, что:

- используется метод коллективной экспертной оценки;
- мнения экспертов сочетаются с качественными и количественными методами оценки и обработки получаемых результатов;
- используется «нестандартная» процедура получения информации;
- разработан способ формирования группового мнения по индивидуальным суждениям экспертов;
- разработан новый алгоритм проведения процедуры прогнозирования.

Цель представленной работы заключалась в модификации метода экспертных оценок для того, чтобы упростить процедуру прогнозирования и повысить качество прогноза развития событий и процессов в области информационной безопасности.

Постановка задачи

В настоящее время, экспертные методы прогнозирования применяют в ситуациях, когда выбор, обоснование и оценка последствий решений не могут быть выполнены на основе точных расчетов. Такие ситуации нередко возникают при прогнозировании и долгосрочном планировании в области информационной безопасности. Объектом экспертного оценивания обычно является альтернатива в целом (проект, товар, фирма, информационный ресурс и т.п.) или критерии оценивания альтернативы. Экспертов привлекают в тех случаях, когда точно измерить объект невозможно, но можно дать ему качественную оценку. Ответы экспертов часто носят нечисловой характер. Эксперт может сравнить два объекта, сказать, какой из двух лучше, дать им оценки, но обычно не может ответить, во сколько раз или на сколько один объект лучше другого [5].

Существует масса методов получения экспертных оценок, не меньше существует и методов обработки ответов экспертов [4]. Наиболее достоверным считается метод коллективной экспертной оценки – это метод прогнозирования, основанный на выявлении обобщенной оценки экспертной группы путем обработки индивидуальных, независимых оценок, вынесенных экспертами, входящими в группу. Метод коллективной экспертной оценки является более универсальным и может быть применен для нахождения оценки риска в системе защите информации и при прогнозировании событий в области информационной безопасности; его недостатки могут быть разрешены при помощи модификации метода, в зависимости от целей и задач прогнозирования. Обобщенное мнение экспертов, полученное в результате обработки, принимается как решение проблемы.

Основная идея данной работы заключается в сочетании мнения экспертов с количественными методами оценки и обработки получаемых результатов. В основу прогноза закладывается мнение коллектива специалистов, основанное на профессиональном, научном и практическом опыте [4]. На основе экспертных оценок производится процедура интуитивно-логического мышления человека в сочетании с качественными методами оценки, количественными методами оценки и обработки получаемых результатов. Для обработки результатов и для оценки степени согласованности мнений экспертов по решению исследуемой проблемы используется математико-статистический инструментарий. Также необходимо рассчитать дисперсию

оценок, среднеквадратическое отклонение оценок и коэффициент вариации оценок. Такой комплексный подход позволяет получить эффективное решение, точный результат и позволяет предопределить развитие проблемных ситуаций, носящих долгосрочный характер [6].

Основные этапы модифицированного метода экспертной оценки:

1. постановка цели исследования;
2. выбор формы исследования;
3. подбор экспертов;
4. проведение экспертизы;
5. статистический анализ результатов;
6. подготовка отчета с результатами экспертного оценивания.

Основной результат

1. Постановка цели исследования.

Цель исследования – это прогнозирование развития событий или процессов в области информационной безопасности. Перед началом экспертного исследования необходимо четко определить его цель (проблему), и сформулировать соответствующие вопросы для экспертов. Например:

– Есть ли реальная угроза кибервойн между государствами?

Или

– Будет ли основное количество информационных атак носить направленный характер?

2. Выбор формы исследования.

Процедура получения информации достаточно сложная, поэтому необходимо выбрать форму исследования.

– По форме участия экспертов: очное, заочное. (Очный метод позволяет сосредоточить внимание экспертов на решаемой проблеме, что повышает качество результата, однако заочный метод может быть дешевле).

– По количеству итераций (повторов процедуры для повышения точности) – одношаговые и итерациями.

– По решаемым задачам: генерирующие решения и оценивающие варианты.

– По типу ответа: идейные, ранжирующие, оценивающие объект в относительной или абсолютной (численной) шкале.

– По способу обработки мнений экспертов: непосредственные и аналитические.

– По количеству привлекаемых экспертов: без ограничения, ограниченные. Обычно используется 5–12 человек экспертов.

3. Подбор экспертов.

Эксперты должны обладать опытом в областях, соответствующих решаемым задачам. При подборе экспертов следует учитывать момент личной заинтересованности. Учитывая тот факт, что процедура получения информации достаточно сложная и дорогостоящая, исследование можно проводить заочным способом, а именно – путем сбора и анализа информации. Эксперты для исследования должны быть подобраны особым образом [7–9]:

– специалисты в области информационной безопасности;

– мнения и прогнозы данных специалистов должны быть опубликованы в открытой печати;

– в публикациях можно найти ответы на интересующие нас вопросы.

4. Проведение экспертизы.

Рациональное использование информации, получаемой от экспертов (табл. 1), возможно при условии преобразования ее в форму, удобную для дальнейшего анализа.

Таблица 1. Ответы экспертов

№ эксперта	№ вопроса	
	1	2
1	5	7,5
2	10	5
3	7,5	5
4	7,5	10
5	5	10

Одна из главных трудностей при оценивании состоит в том, что помимо явлений, объектов, факторов, состояние которых может быть выражено количественно (в руб., \$, кг, км, % и т.п.), приходится оценивать качественные факторы, уровень которых нельзя точно определить. Часть информации, не поддающуюся количественному измерению, необходимо представить в виде косвенных оценок. Для этого необходимо сравнить и оценить какие-либо объекты, явления, факторы, варианты действий, приписав каждому из них какое-либо число – ввести систему предпочтений.

В зависимости от того, по какой шкале заданы эти предпочтения, экспертные оценки содержат больший или меньший объем информации и обладают различной способностью к математической формализации. При прогнозировании информационной безопасности наиболее удобно использовать интервальную шкалу. Оценка по данной шкале позволяет не только определить, что один объект (явление) предпочтительнее другого, но также определить: на сколько предпочтительнее. Нулевая точка и единица измерения выбираются при этом произвольно – вводится система балльных оценок (табл. 2). Оценки важности выражаются в баллах и могут принимать значения от 0 до 1, от 0 до 10, от 0 до 100 и т.д. Традиционно используются шкалы от 1 до 10 баллов; шкалы с меньшим интервалом не позволяют выявить различия между рисками, шкалы с большим интервалом затрудняют выполнение оценки.

Таблица 2. Определение вероятности

Определение вероятности	
Уровень вероятности	Оценка
наступление события невозможно	0
наступление события маловероятно	2,5
событие имеет равные шансы наступления или ненаступления	5
наступление события достаточно вероятно	7,5
событие наступит обязательно	10

Ответы, полученные от экспертов, обрабатываются и заносятся в таблицу, таким образом формируется матрица оценок (табл. 3). Каждому ответу специалиста присваивается конкретная оценка, которая выражается в баллах.

Таблица 3. Матрица оценок

№ эксперта	№ вопроса	
	1	2
1	10	5
2	5	7,5
3	0	2,5
4	5	7,5
5	2,5	5

5. Статистический анализ результатов.

После получения ответов экспертов необходимо провести их оценку [4]. Это позволяет: оценить согласованность мнений экспертов. При отсутствии значимой согласованности экспертов необходимо выявить причины несогласованности (наличие групп) и признать отсутствие согласованного мнения (ничтожные результаты); оценить ошибку исследования; построить модель свойств объекта на основе ответов экспертов (для аналитической экспертизы).

- Вариационный размах (R). В случае участия в опросе нескольких экспертов расхождения в их оценках неизбежны, однако величина этого расхождения имеет важное значение. Групповая оценка может считаться достаточно надежной только при условии хорошей согласованности ответов отдельных специалистов. Для анализа разброса и согласованности оценок применяются статистические характеристики – меры разброса. Значение отклонения рассчитывается по формуле: $R = X_{\max} - X_{\min}$; $R \leq 7,5$; где R – вариационный размах; X_{\max} – максимальная оценка объекта; X_{\min} – минимальная оценка объекта.

Чем меньше значение этого коэффициента, тем выше согласованность мнений экспертов. Также необходимо учитывать вариационный размах, т.е. задать максимальное значение для R . Для предложенной шкалы от 0 до 10 – максимальная несогласованность может составлять не более 7,5; $R \leq 7,5$. Если $R > 7,5$, то в таком случае необходимо провести исследование заново или отбросить максимальную и минимальную оценки.

- Значение экспертной оценки ($X_{\text{ср}}$). Чтобы рассчитать вероятность наступления события, необходимо точечная оценка для группы экспертов, вычисляемая как среднее арифметическое. Среднее значение и есть значение экспертной оценки. В некоторых случаях применяются и другие методы определения экспертных оценок, такие как: **метод медианы** или **метод моды**. Найдем среднее значение характеристик по формуле: $X_{\text{ср}} = \sum(X_i) / N$; где: $X_{\text{ср}}$ – значение экспертной оценки; X_i – это значение характеристики i -го эксперта; N – количество экспертов ($i=1, \dots, N$).
- Степень согласованности мнений экспертов (L). Коэффициент согласования является величиной, показывающей степень близости мнений экспертов по данному вопросу. Рассчитаем уровень согласования экспертных мнений по формуле: $L = \delta / X_{\text{ср}}$; где L – степень согласованности мнений экспертов (коэффициент согласования); δ^2 – это среднеквадратическое отклонение значений ответов экспертов от среднего; $X_{\text{ср}}$ – значение экспертной оценки;

Для определения величины среднеквадратического отклонения необходимо воспользоваться следующей расчетной формулой дисперсии: $\delta^2 = \sum(X_i - X_{\text{ср}})^2 / N$.

Среднеквадратическое отклонение будет равно квадратному корню из дисперсии:

$$\delta = \sqrt{\sum(X_i - X_{\text{ср}})^2 / N}.$$

Также необходимо учитывать согласованность мнений экспертов, т.е. задать максимальное значение отклонения. В данном варианте максимальное значение отклонения: $L \geq 0,4$. Если $L < 0,4$ – оценка отвергается и проводится повторное исследование. При $L > 4$ исследование считается успешным. После статистического анализа результатов и всех расчетов составляем матрицу ответов (табл. 4).

Таблица 4. Матрица ответов

Показатель	№ вопроса	
	№4	№7
<i>R</i>	10	5
<i>N</i>	3	5
$\bar{X}_{ср}$	4,2	5,5
δ^2	1,4	3,5
δ	1,18	1,87
<i>L</i>	0,72	0,66

6. Подготовка отчета с результатами экспертного оценивания.

На данном этапе необходимо проанализировать информацию, полученные результаты и подготовить отчет. Отчет должен содержать поставленный вопрос, полученные результаты и выводы, сделанные на основе анализа и произведенных расчетов.

Вопрос 1. Есть ли реальная угроза кибервойн между государствами?

Ответ:

- уровень вероятности = 4,2 → событие имеет равные шансы наступления или ненаступления (скорее ненаступления);
- уровень согласования = 0,72 → уровень согласования экспертных мнений достаточно высокий. Результаты исследования являются приемлемыми, так как коэффициент согласованности мнений экспертов достаточно высок.

Вопрос 2. Будет ли основное количество информационных атак носить направленный характер?

Ответ:

- уровень вероятности = 5,5 → событие имеет равные шансы наступления или ненаступления;
- уровень согласования = 0,66 → экспертные мнения относительно схожи. Результаты исследования являются приемлемыми, так как коэффициент согласованности мнений экспертов достаточно высок.

Основные моменты модификации: способ получения информации; выбор формы исследования; подбор экспертов; этапы экспертного оценивания; метод проведения экспертизы; способ обработки результатов опроса экспертов; упрощена процедура получения информации; упрощено формирование группового мнения.

Заключение

Модификация метода экспертных оценок используется тогда, когда по каким-либо причинам не может быть использован стандартный алгоритм. Характерными особенностями данного метода, как научного инструмента решения сложных неформализуемых проблем, являются: научно обоснованная организация проведения всех этапов экспертизы, обеспечивающая наибольшую эффективность работы на каждом из этапов; применение сочетания качественных и количественных методов, как при организации экспертизы, так и при оценке суждений экспертов и формальной групповой обработке результатов. Такой комплексный подход позволяет получить эффективное решение проблемы.

В работе сделано: модифицирован метод экспертных оценок для прогнозирования развития событий и процессов в области информационной безопасности; проанализированы достоинства и недостатки метода экспертной оценки; разработаны критерии для модификации метода экспертных оценок; определены этапы экспертного

оценивания; поставлена цель исследования; выбрана форма исследования; подобраны эксперты; выбрана «нестандартная» процедура получения информации; разработан способ формирования группового мнения по индивидуальным суждениям экспертов; разработан новый алгоритм проведения процедуры прогнозирования, с помощью модификации метода экспертных оценок; разработан алгоритм сочетания качественных и количественных методов; составлена матрица оценок; произведен статистический анализ результатов; отмечены основные моменты модификации; приведен пример использования модификации метода экспертного оценивания для прогнозирования в области информационной безопасности.

Результаты исследования могут быть использованы для прогнозирования развития событий и процессов в области информационной безопасности, а также повышения эффективности оценки рисков и улучшения качества аудита информационной безопасности в организациях. Указанный алгоритм проведения экспертной оценки не требует больших затрат и может быть использован для упрощения процедуры прогнозирования в различных областях, когда невозможно решить поставленные задачи обычным способом.

Литература

1. Расторгуев С.П. Инфицирование как способ защиты жизни. – М.: Агентство «Яхтсмен», 1996. – 331 с.
2. Тейл Генри. Экономические прогнозы и принятие решений. – М.: Статистика, 1971. – 488 с.
3. Ивашкин С.В. Методы научно-технического прогнозирования процесса развития организации // Молодой ученый. – 2011. – № 5. – Т. 1. – С. 186–188.
4. Орлов А.И. Экспертные оценки: Учебное пособие. – М.: ИВСТЭ, 2002. – 296 с.
5. Войцеховский С.В., Хомоненко А.Д. Согласование экспертных оценок при нечетком выводе в системе обнаружения вторжений // Проблемы информационной безопасности. Компьютерные системы. – 2009. – № 4. – С. 42–50.
6. Шикин Е.В., Хартишвили А.Г. Математические методы и модели в управлении: Учебное пособие. – М.: Дело, 2004. – 460 с.
7. Издательский дом Коммерсантъ. Новости online [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.kommersant.ru, свободный. Яз. рус. (дата обращения 12.05.2012).
8. Информационный портал, посвященный Международной конференции по техническим аспектам информационной безопасности [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.zeronights.ru, свободный. Яз. рус. (дата обращения 17.02.2012).
9. Информационный портал, посвященный информационной безопасности [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.itsec.ru, свободный. Яз. рус. (дата обращения 21.04.2012).

СЕКРЕТНОСТЬ ПРОТОКОЛОВ КВАНТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ НА ОДИНОЧНЫХ ФОТОНАХ

А.А. Сотникова

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Г.П. Мирошниченко

Существенное влияние на уровень ошибок в просеянном ключе оказывает неидеальность волоконно-оптических линий связи, в работе рассматриваются два типа протоколов квантовой криптографии для генерации криптографического ключа – ЭПР-протокол и BB84, произведена оценка устойчивости протоколов для различных параметров оптического волокна. Рассмотрен случай присутствия в канале перехватчика (Ева), протокол «перехват-посылка», оценен уровень шумов, вносимый Евой с оптимальной позиции, когда вероятность ее обнаружения за счет ошибок минимальна.

Ключевые слова: устойчивость протоколов, информационные характеристики, оптическое волокно, ЭПР-протокол.

Введение

В протоколах квантовых коммуникаций (квантовая криптография, квантовая телепортация, плотное кодирование [1, 2]) по оптическому волокну (ОВ) передается квантовая информация, закодированная в состояниях фотонов – кубитах. Неидеальность ОВ является причиной ошибок в просеянном квантовом ключе, закодированном на поляризационных состояниях фотонов. В данной работе изучены особенности искажения квантовой информации, закодированной в поляризационных состояниях фотонов, при их распространении по ОВ в установке квантовой криптографии с учетом деполяризации квантовых состояний фотонов и поглощения фотонов. Рассмотрены оптимальные стратегии выбора отрезков ОВ для квантовых каналов Алисы и Боба, которые используются для распределения квантового ключа с помощью перепутанных поляризационных состояний бифотонов с учетом поглощения и деполяризации. С помощью матрицы плотности вычислены информационные характеристики распределяемого просеянного ключа [3, 4]. Проанализирован простейший протокол перехвата квантовой информации «перехват-посылка» в присутствии неидеального шумящего канала и оценена длительность канала, на которой перехватчик может быть обнаружен в результате статистического анализа.

Ошибки при распределении ключа по ЭПР-каналу с учетом поглощения и деполяризации. Изучим закон распространения фотонов в квантовом канале в представлении Шредингера. Гамильтониан взаимодействия мод в одном из каналов

$$\hat{V} = \sum_{\mathbf{k}, \mu, \mu' = H, V} \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\sigma})_{\mu, \mu'} \cdot \hat{b}_{\mathbf{k}\mu}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\mu'}. \quad (1)$$

Здесь $\boldsymbol{\xi} = \xi \mathbf{n}$ – вещественный вектор, характеризующий взаимодействие ортогонально поляризованных мод.

В качестве базисных состояний выберем три вектора $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$.

$$|1\rangle = |H\rangle = \hat{b}_{\mathbf{k}\mu=H}^\dagger |0\rangle, \quad |2\rangle = |V\rangle = \hat{b}_{\mathbf{k}\mu=V}^\dagger |0\rangle. \quad (2)$$

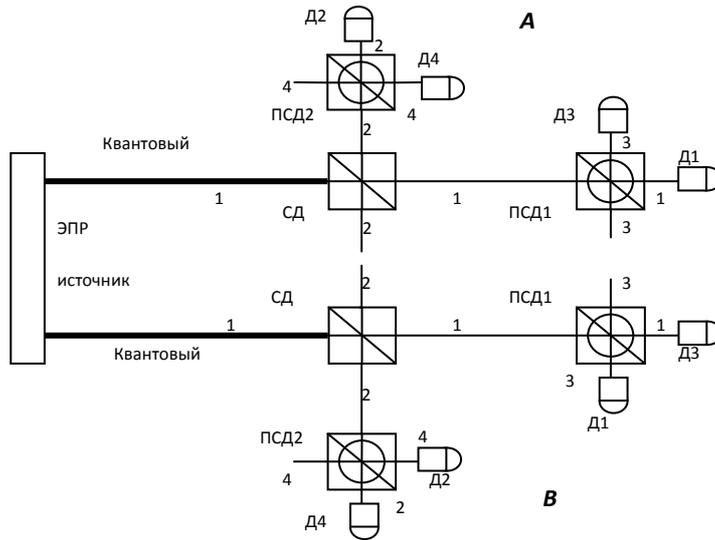


Рис. 1. Схема анализатора квантовых состояний фотона в установке распределения квантового ключа по протоколу BB84: СД – светоделитель; ПСД1,2 – поляризационные светоделители; Д1-Д4 – фотодетекторы в каналах А и В

Начальная матрица плотности фотонов (рис. 1), создаваемая ЭПР-генератором

$$\rho(0)_{AB} = |\alpha|^2 |0\rangle\langle 0| + (\rho_{01}(0) + \rho_{02}(0) + \{H.C.\}) + \frac{1}{4} |\beta|^2 \times \\ \times \left(I_A \cdot I_B - \sum_{\alpha=x,y,z} (\mathbf{e}_\alpha, \boldsymbol{\sigma}_A) \cdot (\mathbf{e}_\alpha, \boldsymbol{\sigma}_B) \right).$$

Решив уравнение Лиувилля, получим матрицу плотности фотона в момент времени t (на выходе квантового канала или на входе в анализатор):

$$\rho_{AB}(t) = \left(1 - |\beta|^2 \exp(-\delta t)(2 - \exp(-2\delta t))\right) |0\rangle\langle 0| + (\rho_{01}(t) + \rho_{02}(t) + \{H.C.\}) + \\ + \frac{|\beta|^2}{2} \exp(-\delta t) (1 - \exp(-\delta t)) (|0\rangle_A \langle 0| \cdot I_B + I_A \cdot |0\rangle_B \langle 0|) + \\ + \frac{|\beta|^2}{4} \exp(-2\delta t) (I_A \cdot I_B - \exp(-2\gamma t) \sum_{\alpha=x,y,z} (\overrightarrow{W}_A \mathbf{e}_\alpha, \boldsymbol{\sigma}_A) \cdot (\overrightarrow{W}_B \mathbf{e}_\alpha, \boldsymbol{\sigma}_B)), \quad (2)$$

где $\delta + \gamma$ – скорость деполаризации; δ – скорость поглощения фотонов.

Получим закон преобразования базисных векторов $|V\rangle, |H\rangle$ с входа анализатора на его выход

$$|H\rangle_1 = \hat{b}_{1,H}^\dagger |0\rangle \rightarrow \left(\frac{\hat{b}_2^\dagger - \hat{b}_4^\dagger}{2} + \frac{\hat{b}_1^\dagger}{\sqrt{2}} \right) |0\rangle, \quad |V\rangle_1 = \hat{b}_{1,V}^\dagger |0\rangle \rightarrow \left(\frac{\hat{b}_2^\dagger + \hat{b}_4^\dagger}{2} + \frac{\hat{b}_3^\dagger}{\sqrt{2}} \right) |0\rangle. \quad (3)$$

Из-за ошибок в квантовом канале возможны несовпадающие по номерам отсчеты в каналах А и В, имеющие одинаковые четности. Это

$$D_1^A \wedge D_3^B, D_3^A \wedge D_1^B, D_2^A \wedge D_4^B, D_4^A \wedge D_2^B. \quad (4)$$

С помощью формул (2) и (3) получим вероятность ошибки, определяемой событиями (4)

$$P_{err} = \frac{1}{4} |\beta|^2 \exp(-2\delta t) \left(1 - \exp(-2\gamma t) \frac{(W_A W_B^T)_{xx} + (W_A W_B^T)_{zz}}{2} \right). \quad (5)$$

Из (5) следует, что при условии $\xi_A = \xi_B$, т.е. в случае одинаковых искажений поляризации в каналах А и В, ошибка $P_{err} = 0$.

Квантовые каналы А и В естественно проектировать из отрезков ОВ, выполненных по одной технологии. Обозначим через $\sigma, \bar{\xi}$ соответственно среднее квадратическое отклонение и математическое ожидание параметра ОВ ξ , а через $\sigma_\theta, \bar{\theta}$ – среднее квадратическое отклонение и математическое ожидание для угла θ . Выбор отрезков ОВ для каналов А и В будем производить коррелированно, с коэффициентами корреляции r (выбор параметра ξ) и r_θ (выбор угла θ). Окончательно усреднение ошибки $P_{err}^{(BF)}$ (6) выполним по распределению

$$\rho(\xi_A, \xi_B, \theta_A, \theta_B) = \rho(\xi_A, \xi_B, \sigma, r, \bar{\xi}) \rho(\theta_A, \theta_B, \sigma_\theta, r_\theta, \bar{\theta}), \quad (7)$$

где двумерное нормальное независимое распределение

$$\rho(x, y, \sigma, r, \bar{x}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2\sqrt{1-r^2}} \exp\left\{-\frac{(x-\bar{x})^2 + (y-\bar{x})^2 - 2r(x-\bar{x})(y-\bar{x})}{2\sigma^2(1-r^2)}\right\}. \quad (8)$$

Соотношение для средней относительной ошибки (QBER) в переданном квантовом ключе (среднее число ошибок в просеянном ключе длиной $N/2$ по отношению к длине просеянного ключа):

$$\text{QBER} = 2\bar{P}_{err}. \quad (10)$$

В заключение отметим, что в работе рассмотрена оптимальная стратегия выбора отрезков ОВ для квантовых каналов А и В, используемых для распределения квантового ключа с помощью перепутанных поляризационных состояний бифотонов. Для минимизации QBER в случае использования ОВ, обладающего двулучепреломлением, пары отрезков А и В следует подбирать коррелированно.

Погрешности в «просеянном» квантовом ключе, распределенном по протоколу BB84, с учетом поглощения и деполяризации. Изучим закон распространения фотон в квантовом канале в представлении Шредингера. Зададим гамильтониан взаимодействия мод (1) и базисные вектора (2) (рис. 2).

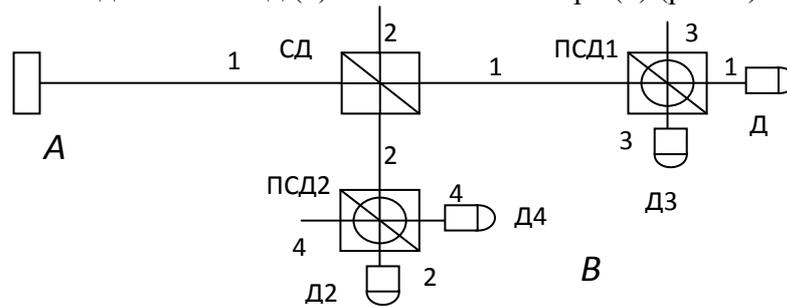


Рис. 2. Изучаемая схема анализатора квантовых состояний фотона в установке распределения квантового ключа по протоколу BB84: СД – светоделитель; ПСД1,2 – поляризационные светоделители; Д1-Д4 – фотодетекторы в каналах А и В

Матрица плотности в уравнении Лиувилля определяется четырьмя вещественными и двумя комплексными функциями $P(t), \rho_{01}(t), \rho_{02}(t), \mathbf{p}(t)$:

$$\begin{aligned} \rho(t) = & (1 - P(t))|0\rangle\langle 0| + (\rho_{01}(t) \cdot |0\rangle\langle 1| + \rho_{02}(t) \cdot |0\rangle\langle 2| + \{H.C.\}) + \\ & + \frac{1}{2}(P(t)(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) + (\mathbf{p}(t), \boldsymbol{\sigma})). \end{aligned} \quad (11)$$

Система уравнений для функций $P(t), \rho_{01}(t), \rho_{02}(t), \mathbf{p}(t)$ имеет вид

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} P(t) = -\delta \cdot P(t), \\ \frac{d}{dt} \rho_{01}(t) = -\left(\frac{i}{2} \xi_z + \gamma_{01}\right) \rho_{01}(t) + \frac{i}{2} (\xi_x + i \xi_y) \rho_{02}(t) \\ \frac{d}{dt} \rho_{02}(t) = -\left(\frac{i}{2} \xi_z + \gamma_{02}\right) \rho_{02}(t) + \frac{i}{2} (\xi_x - i \xi_y) \rho_{01}(t) \\ \frac{d}{dt} \mathbf{p}(t) = [\xi \times \mathbf{p}(t)] - \widehat{\gamma} \cdot \mathbf{p}(t), \end{cases}$$

где $\widehat{\gamma}_{\alpha,\beta} = (\delta + \gamma) \delta_{\alpha,\beta}$, $\delta + \gamma \geq \delta \geq 0$; $\delta + \gamma$ – скорость деполяризации; δ – скорость поглощения фотонов.

Будем считать, что Алиса с равной вероятностью $1/4$ генерирует одно из четырех состояний и посылает их Бобу на анализатор через шумящий канал (учитываем возможный вклад вакуумного состояния)

$$\begin{aligned} |\Psi^{(1)}\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, & |\Psi^{(2)}\rangle &= \alpha|0\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |1\rangle) \\ |\Psi^{(3)}\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|2\rangle, & |\Psi^{(4)}\rangle &= \alpha|0\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (12)$$

Для этих состояний начальные данные имеют вид

$$P(0) = |\beta|^2, \quad \mathbf{p}^{(1)}(0) = |\beta|^2 \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{p}^{(4)}(0) = -\mathbf{p}^{(2)}(0), \quad \mathbf{p}^{(2)}(0) = |\beta|^2 \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{p}^{(3)}(0) = -\mathbf{p}^{(1)}(0). \quad (13)$$

Расчет показывает, что полная вероятность ошибки при передаче одного (любого) кубита равна

$$P_{err} = \frac{1}{4} \left(P(t) - \frac{\mathbf{p}_z^{(1)}(t) + \mathbf{p}_x^{(2)}(t)}{2} \right) = \exp(-\delta t) \frac{|\beta|^2}{4} \left(1 - \frac{W_{x,x}(\xi, t) + W_{z,z}(\xi, t)}{2} \exp(-\gamma t) \right).$$

Средняя длина просеянного ключа N_{sift} , выраженная через N – полное число посылок.

$$N_{sift} = \frac{N}{2} P_{det} = \frac{N}{2} |\beta|^2 \exp(-\delta t).$$

Информационные характеристики неидеального квантового канала, подверженного атаке «перехват-посылка». Рассмотрим протокол BB84 (пункт 2) в присутствии Евы (рис. 3). Зададим гамильтониан взаимодействия мод (1) и базисные вектора (2).

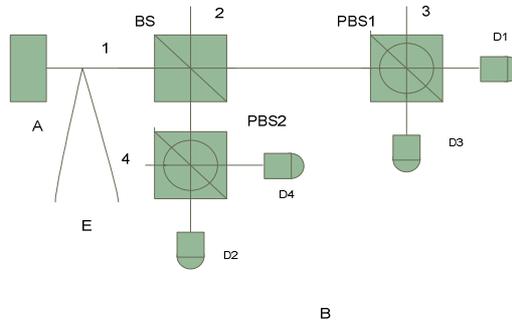


Рис. 3. Протокол BB84 в присутствии Евы: А – передатчик Алисы; В – анализатор Боба; BS – светоделитель; PBS1, PBS2 – поляризационные светоделители; D1-D4 – детекторы. Установка Евы полностью имитирует Алису и Боба

Решив уравнение Лиувилля, получим матрицу плотности фотона в момент времени t (11) Алиса с равной вероятностью генерирует одно из четырех состояний (12), для этих состояний зададим начальные данные (13).

Из-за ошибок в квантовом канале возможны несовпадающие по номерам отсчеты в каналах А и В, имеющие одинаковые четности. Это

$$D_1^A \wedge D_3^B, D_3^A \wedge D_1^B, D_2^A \wedge D_4^B, D_4^A \wedge D_2^B. \quad (14)$$

С помощью формулы (11) получим вероятность ошибки в переданном просеянном бите, определяемой событиями (14) без вмешательства Евы

$$P_{err} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2} e^{-\gamma T} (1 + e^{-\frac{\sigma^2 T^2}{2}}) \right). \quad (15)$$

Вероятность ошибки в переданном просеянном бите в случае канала с перехватом, при оптимальной позиции Евы

$$P_{errE} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{4} e^{-\gamma_2 T} (1 + e^{-\frac{\sigma_2^2 T^2}{4}}) \right). \quad (16)$$

Вероятность ошибки в просеянном ключе Евы

$$P_{errEkey} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{4} e^{-\gamma_2 \frac{T}{2}} (1 + e^{-\frac{\sigma_2^2 T^2}{8}}) \right).$$

Здесь $\bar{\xi} > \sigma$, мы предполагаем изотропный механизм деполяризации, $\delta + \gamma$ – скорость деполяризации; δ – скорость поглощения; σ – феноменологический параметр; $\delta_1, \gamma_1, \sigma_1$ – параметры канала Алиса–Ева; $\delta_2, \gamma_2, \sigma_2$ – параметры канала Ева–Боб

$$\gamma_1 = \gamma_2, \sigma_1 = \sigma_2.$$

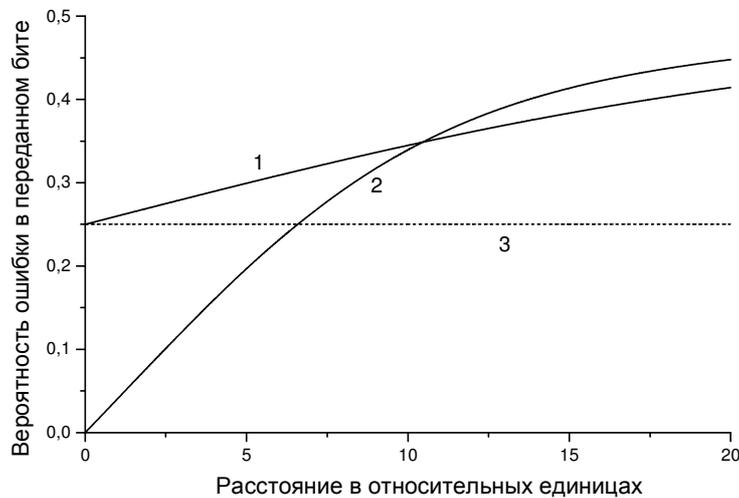


Рис. 4. Зависимость вероятности ошибки от расстояния, при условии «оптимальной» позиции Евы; вероятность ошибки в «просеянном» ключе в случае атаки «перехват-посылка» (кривая 1); вероятность ошибки в «просеянном» ключе (без Евы) (кривая 2); критический уровень 0,25 (кривая 3)

Заключение

В работе найдена средняя по разбросу параметров ОВ относительная ошибка в просеянном квантовом ключе, распределенном по протоколу ЭПР с учетом поглощения и деполяризации, по протоколу ВВ84 с поляризационным кодированием информации с

учетом поглощения и деполяризации. Сделан вывод о том, что правильный выбор технологии изготовления ОВ квантового канала позволит снизить QBER до критического уровня, равного 0,11, ниже которого распределенный ключ можно использовать для целей криптографии. Изучены информационные характеристики неидеального квантового оптоволоконного канала, подверженного атаке типа «перехват-посылка», оценена длительность канала, на которой перехватчик может быть обнаружен в результате статистического анализа. Рассмотрена оптимальная стратегия выбора отрезков ОВ для квантовых каналов А и В в случае вмешательства Евы. Так же рассмотрена оптимальная стратегия Евы выбора позиции в каналах А и В. Было показано, что вероятность верной интерпретации перехваченного бита выше, чем вероятность верной оценки у легитимных пользователей.

Литература

1. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. – Пер. с англ. – М.: Мир, 2006. – 824 с.
2. Бауместер Д., Эркет А., Цайлингер А. Физика квантовой информации. – М.: Постмаркет, 2002. – 376 с.
3. Castelletto S., Degiovanni I.P., Rastello M.L. Quantum and classical noise in practical quantum-cryptography systems based on polarization-entangled photons // Phys. Rev. A 67. – 2003. – V. 67. – P. 022305.
4. Valerio Scarani, Helle Bechmann-Pasquinucci, Nicolas J.Cerf, Miloslav Dušek, Norbert Lütkenhaus, Momtchil Peev. The security of practical quantum key distribution // Rev. Mod. Phys. – 2009. – V. 81. – № 3. – P. 1301–1350.

УДК 681.5.11

ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ СТРУКТУР И РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ УПРАВЛЕНИЯ РЕВЕРСИВНЫМ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИМ РАЗВЕРТЫВАЮЩИМ УСТРОЙСТВОМ НА ПРИМЕРЕ ЭЛЕКТРОПРИВОДА СКАНИРУЮЩЕЙ ОСИ ТЕЛЕСКОПА

Д.А. Субботин

Научный руководитель – к.т.н., доцент В.А. Толмачев

В настоящее время в системах с малыми требуемыми углами отклонения рабочего органа от нулевого положения начинают применять реверсивные электромеханические развертывающие устройства с ограниченным углом поворота. Подобные устройства обладают повышенной инерционностью и предъявляют дополнительные требования к качеству систем управления. В работе предлагается процедура аналитического конструирования регулятора для такого объекта, реализуемая средствами пакета вычислительной математики. Приводятся результаты моделирования спроектированной системы.

Ключевые слова: магнитоэлектрический преобразователь, система стабилизации скорости, методика синтеза, математическая модель, режимы сканирования, инфракрасный телескоп, электромеханическое реверсивное развертывающее устройство.

Введение

Наряду с широко распространенными нереверсивными развертывающими устройствами, в которых осуществляется непрерывное вращение развертывающего элемента [1], в современной технике часто используются реверсивные развертывающие

устройства, в которых развертывающий элемент может осуществлять достаточно сложные возвратно-поступательные линейные или вращательные движения. Подобного рода устройства используются, например, при 3D-печати зданий и сооружений [2], конструкционных деталей [3], в многокоординатных обрабатывающих центрах и сканирующих осях инфракрасных телескопов.

Приведенными примерами далеко не исчерпываются области применения реверсивных развертывающих устройств. Характерной особенностью этих устройств является большая инерционность элементов, осуществляющих возвратно-поступательные движения. Парирование данной инерционности и поддержание высоких точностей отработки сигнала задания являются основными задачами при работе с подобными устройствами. Во многих случаях необходимо обеспечивать движение оси в пределах малых углов в соответствии с временной диаграммой, представленной кривой 1 на рис. 1. Полный цикл сканирования $T_{ск}$ содержит 2 участка рабочего хода (t_1-t_2 и t_3-t_4) с длительностью t_p и 2 участка нерабочего хода (t_2-t_3 и t_4-t_5) с длительностью $t_{нр}$. На участках рабочего хода угол поворота оси должен меняться линейно в пределах от $-\alpha_{гр}$ до $+\alpha_{гр}$ с допустимой погрешностью поддержания скорости на рабочем участке $\Delta\%$. Закон изменения угла на участках нерабочего хода не лимитируется. Длительность нерабочего хода измеряется между окончанием одного рабочего хода и началом следующего.

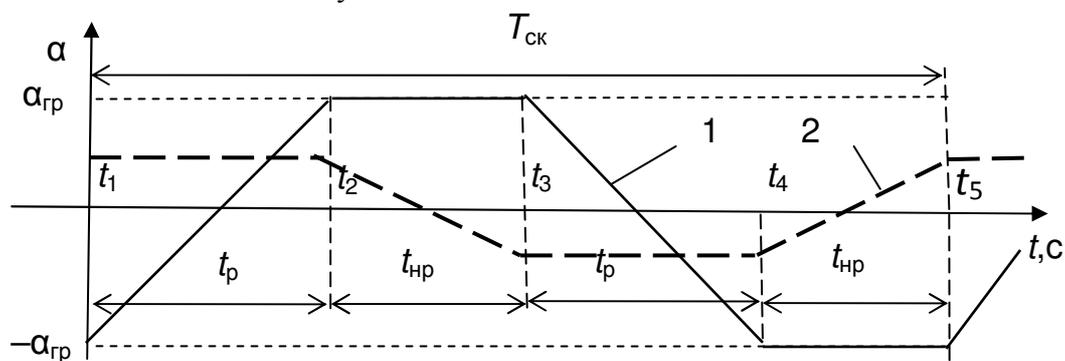


Рис. 1. Диаграмма сканирования электропривода

Постановка задачи

Ввиду достаточно малого диапазона изменения угла поворота оси сканирования, для реализации электропривода нет необходимости использовать традиционные электродвигатели с неограниченным углом поворота. Перспективно применение для этих целей бесконтактных магнитоэлектрических преобразователей (МЭП) входного электрического сигнала (напряжения) в пропорциональное угловое перемещение его ротора [4].

Для работы с нереверсивными развертывающими устройствами существуют строгие методики синтеза и описание подобных систем. Реверсивные же развертывающие устройства, в частности, электропривода осей сканирования на основе МЭП, изучены мало и нехватка материалов и статей по данному типу электропреобразователей порой негативно сказывается при проектировании систем управления и выборе двигателя.

Для данных систем практически не существует как обоснованных рекомендаций по выбору структуры системы управления, так и строгой методики синтеза подобных систем. Данная работа во многом заключается в поиске подобных рекомендаций и вывода методики синтеза регуляторов для управления электроприводом реверсивных развертывающих устройств.

Основной результат

В ходе исследований, проводимых на кафедре, был проведен анализ статических и динамических характеристик МЭП с ограниченным углом поворота для приводов сканирования с малыми индуктивностями обмоток управления [5].

На основе анализа обоснована целесообразность построения системы управления электропривода с внутренним контуром динамической коррекции для демпфирования слабо затухающих угловых колебаний вала с обратной связью по скорости вала. В работе [6] предложена векторно-матричная математическая модель и методика синтеза системы управления электропривода оси сканирования с внутренним контуром динамической коррекции и внешним контуром регулирования угла. Проведенное математическое моделирование процессов сканирования при заданных характеристиках МЭП, параметрах диаграммы сканирования, незначительных индуктивностях обмотки управления МЭП и малых статических моментах нагрузки на оси подтвердило правомерность предложенной методики синтеза и возможность реализации требуемого движения исполнительной оси в режиме слежения за трапецеидальным задающим воздействием в виде диаграммы 1 на рис. 1. Испытание приводов сканирования на реальных ОПУ показало необходимость учета при синтезе как значительных величин индуктивности обмоток управления МЭП, так и моментов нагрузки типа «сухое трение» в опорах оси. При подходах, описанных в работах [5, 6], быстроедействие системы управления становится соизмеримым с длительностью рабочих участков диаграммы сканирования, а увеличение моментов нагрузки на оси приводит к существенному ухудшению линейности. В этих условиях требуемое движение оси невозможно обеспечить ни в одном из режимов сканирования. Устранение влияния указанных факторов возможно в структурах, замкнутых по скорости вала электромеханического преобразователя, при отработке входных воздействий в виде диаграммы 2 на рис. 1. В работе [7] рассмотрен один из возможных вариантов структурного построения замкнутых по скорости систем управления: одноконтурная система с пропорционально-дифференциальным (ПД) регулятором и задающим воздействием U_3 , соответствующим диаграмме 2 на рис. 1. В работе была предложена векторно-матричная модель и методика синтеза одноконтурной системы регулирования скорости электропривода оси сканирования инфракрасного телескопа с компенсацией электрической постоянной времени с помощью ПД-регулятора. Полученные расчетные соотношения позволяют аналитически получить требуемые значения коэффициента пропорциональности ПД-регулятора при заданном значении погрешности поддержания скорости на рабочем участке диаграммы сканирования. В ходе моделирования режимов сканирования были установлены минимально реализуемые ошибки, при которых значение амплитуды всплеска напряжения на обмотке управления магнитоэлектрического преобразователя не превышает предельно допустимого значения. Дальнейшее повышение точности воспроизведения заданной диаграммы требует иных структурных решений системы управления и алгоритмов управления. Ниже рассматривается один из возможных вариантов решения.

Структурная схема

Структурная схема исследуемой системы представлена на рис. 2, где штриховыми линиями выделены элементы и связи, образующие структурную схему собственно МЭП, обоснованную в работе [5]. P_1 – ПД-регулятор, осуществляющий компенсацию электрической постоянной времени МЭП $T_3=L/R$, где R и L – соответственно активное сопротивление и индуктивность обмотки управления. Необходимость такой компенсации возникает при значительных величинах индуктивности. P_2 –

синтезируемый регулятор во внешнем контуре системы, призванный обеспечить повышение астатизма по задающему воздействию и моменту нагрузки на валу МЭП.

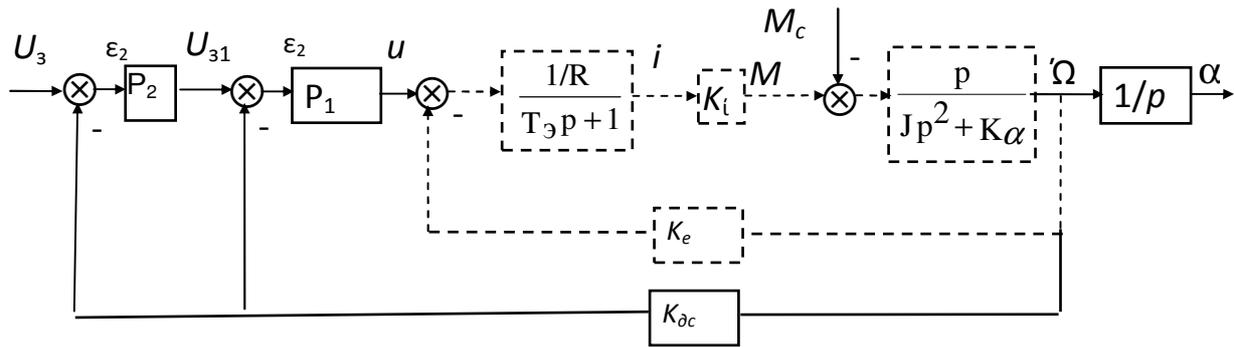


Рис. 2. Структурная схема системы управления

В приведенной схеме: u и i – соответственно напряжение на обмотке управления МЭП и ток в обмотке; α и Ω – соответственно угол поворота оси и ее угловая скорость; K_e – крутизна противо-э.д.с.; J – суммарный момент инерции по оси сканирования; $M_c = M_{c0} \cdot \text{sign} \Omega$ – момент типа «сухое трение» в опорах оси; $K_\alpha = dM/d\alpha$ – жесткость механической характеристики или жесткость «магнитной пружины»; $K_i = dM/di$ – жесткость моментной (тяговой) характеристики или чувствительность по току; f – коэффициент внутреннего демпфирования.

Одним из путей повышения точности при обеспечении предельно допустимого напряжения на обмотке управления МЭП является формирование траектории движения на нерабочем участке так, чтобы подход к рабочему участку и выход с него осуществлялся с нулевым ускорением. Более радикальный путь – введение второго (внешнего) контура регулирования скорости, с регулятором, обеспечивающим повышение порядка астатизма как по задающему, так и по возмущающему воздействию в виде момента нагрузки типа «сухое трение».

Передаточная функция регулятора P_2 внешнего контура имеет вид

$$W_{p2}(p) = \frac{K_{п2}(T_{п2}p + 1)}{T_{п2}p^2}.$$

Такой регулятор обеспечивает астатизм первого порядка контура по задающему воздействию и астатизм второго порядка по моменту нагрузки M_c и позволяет осуществить настройку контура на технический оптимум, при которой передаточную функцию замкнутого контура по задающему воздействию можно представить выражением:

$$W_3(p) = \frac{\Omega(p)}{U_3(p)} = \frac{1}{(2T_\mu^2 p^2 + 2T_\mu p + 1)K_{дс}},$$

где T_μ – некомпенсированная постоянная времени, определяющая расчетное время переходного процесса в системе при реакции на скачок напряжения задания как

$$t_{пр} = 4,7 T_\mu.$$

Учитывая малое влияние коэффициента K_e на динамические процессы в системе и исключая соответствующую обратную связь в структурной схеме на рис. 2, легко найти передаточную функцию системы по возмущению (моменту нагрузки) в виде выражения:

$$W_B(p) = \frac{\Omega(p)}{M_c(p)} = -\frac{1}{W_{p1}(p)W_{p2}(p)} \times \frac{R(T_3p + 1)}{K_i} \times W_3(p).$$

Для оптимизации внешнего контура используем структурную схему (рис. 3), где регулятор представлен детализированной структурной схемой, внутренний контур

системы – звеном с передаточной функцией, а $\varepsilon_2 = U_3 - K_{дс}\Omega$ – ошибка на входе регулятора внешнего контура.

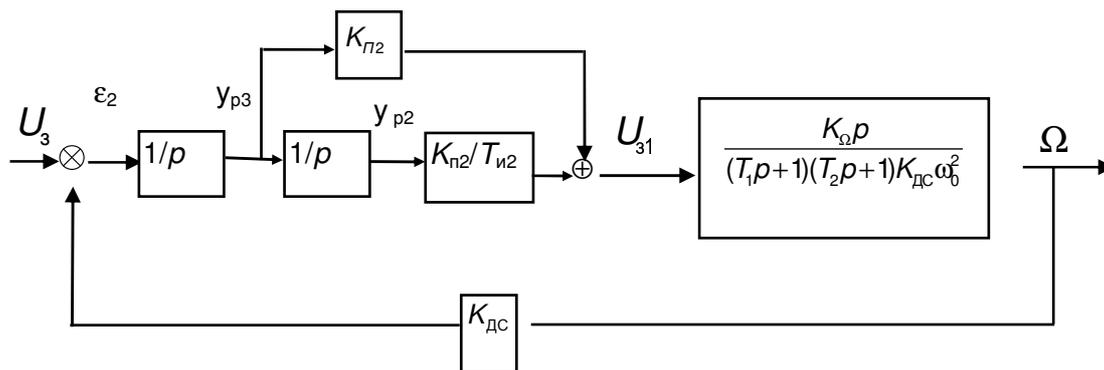


Рис. 3. Расчетная структурная схема внешнего контура регулирования скорости

Результаты моделирования

На рис. 4 представлены результаты моделирования процессов с использованием математической модели электропривода с двухконтурной системой управления, синтезированной по предложенной выше методике из условия обеспечения заданного времени переходного процесса.

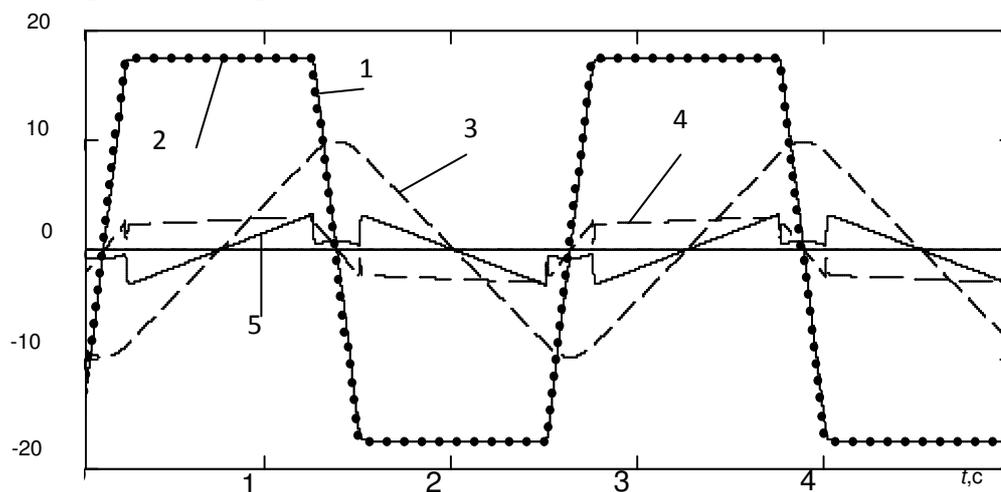


Рис. 4. Процессы сканирования в широком угловом поле в двухконтурной системе управления скоростью МЭП: кривая 1 – заданное значение скорости $\Omega_3 = U_3 / K_{дс}$ [1/с] в масштабе 1000:1, соответствующее диаграмме сканирования; кривая 2 – истинное значение скорости Ω [1/с] в масштабе 1000:1; кривая 3 – угол поворота вала α [рад] в масштабе 1000:1; кривая 4 – напряжение на обмотке управления МЭП u [В] в масштабе 1:10; кривая 5 – ток в обмотке управления i [А] в масштабе 10:1

Сравнение результатов моделирования процессов для одноконтурной системы (диаграмма 1), синтезированной по методике работы [6] (рис. 1) и для двухконтурной системы (диаграмма 2), синтезированной по методике, предложенной в данной работе (рис. 4), при одинаковых параметрах МЭП и нагрузки показывает, что в диаграмма 2 скорость на всем протяжении рабочего участка диаграммы сканирования поддерживается постоянной и равной заданной и при этом отсутствуют всплески напряжения на обмотке управления МЭП в моменты смены участков диаграммы сканирования.

Заключение

В ходе работы была предложена векторно-матричная модель и методика синтеза одноконтурной системы регулирования скорости электропривода оси сканирования инфракрасного телескопа с компенсацией электрической постоянной времени с помощью ПД-регулятора. Полученные расчетные соотношения позволяют аналитически получить требуемые значения коэффициента пропорциональности ПД-регулятора при заданном значении погрешности поддержания скорости на рабочем участке диаграммы сканирования. В ходе моделирования режимов сканирования были установлены минимально реализуемые ошибки, при которых значение амплитуды всплеска напряжения на обмотке управления МЭП не превышает предельно-допустимого значения.

Для повышения точности воспроизведения трапецеидальной диаграммы сканирования на ее рабочем участке предложена двухконтурная структура системы регулирования скорости с регулятором, обеспечивающим повышение порядка астатизма, как по задающему воздействию, так и по возмущению в виде статического момента нагрузки на оси привода. Предложена методика параметрического синтеза системы, правомерность которой подтверждена результатами математического моделирования.

Литература

1. Самарин Ю.Н. Научные основы и методы проектирования выводных устройств допечатных систем: Монография. – М.: МГУП, 2004. – 514 с.
2. Напечатать город: как 3D-технологии приведут к культурной революции [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://theoryandpractice.ru/posts/1754-napachatat-gorod-kak-3d-tekhnologii-privedut-k-kulturnoy-revolyuutsii>, свободный. (дата обращения 21.04.2012).
3. Напечатать город: как 3D-технологии приведут к культурной революции [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://theoryandpractice.ru/posts/1754-napachatat-gorod-kak-3d-tekhnologii-privedut-k-kulturnoy-revolyuutsii>, свободный. (дата обращения 21.04.2012).
4. Первое мероприятие по 3D-печати в Нидерландах [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.nanonewsnet.ru/articles/2011/pervoe-meropriyatie-po-3d-pechati-v-niderlandakh>, свободный. (дата обращения 21.04.2012).
5. Решетников Е.М., Саблин Ю.А. Электромеханические преобразователи гидравлических и газовых приводов. – М.: Машиностроение, 1982. – 144 с.
6. Толмачев В.А., Демидова Г.Л. Математические модели и динамические характеристики электромеханических преобразователей с ограниченным углом поворота // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 11. – С. 18–23.
7. Толмачев В.А., Субботин Д.А. Синтез системы управления электропривода сканирующей оси инфракрасного телескопа // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. – 2011. – № 5 (75). – С. 53–57.
8. Толмачев В.А., Субботин Д.А. Одноконтурная система управления оси сканирования инфракрасного телескопа с пропорционально-дифференциальным регулятором скорости // Научно-технический вестник ИТМО. – 2012. – № 3 (79). – С. 73–78.

ДИСКРЕТНАЯ МОДЕЛЬ ДЕТЕКТОРА КВАНТОВОЙ МОДЫ С УЧЕТОМ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ ФОТОНОВ В РЕЗОНАТОРЕ

А.И. Трифанов

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Г.П. Мирошниченко

Рассмотрен процесс фотодетектирования квантовой моды резонатора с использованием атома зонда. В модель включен процесс релаксации, связанный со спонтанным излучением возбужденного атомного уровня. Получена система дифференциальных уравнений, определяющая операторные меры неидеального детектора квантовых состояний полевой моды.

Ключевые слова: фотодетектирование, квантовая мода резонатора, спонтанное излучение.

Введение

Теоретическое описание процесса детектирования состояния квантово-механической системы имеет богатую историю, начинающуюся с проекционного постулата фон Неймана. В настоящее время существуют, по крайней мере, три эквивалентных формулировки, отражающие роль детектора в процессе измерения [1]: стандартная модель проекционного измерения, язык «эффектов» и «операций» [2], модель непрерывных измерений на основе интеграла Фейнмана [3, 4].

Развитие представлений об измерении в квантовой механике является вопросом как фундаментальным [5], напрямую связанным с проблемой соответствия квантового и классического миров, так и сугубо прикладным, ввиду быстрого развития квантовых информационных технологий [6]. В последних остро стоит вопрос об извлечении информации из квантовых состояний микро- и наносистем. Для передачи квантовой информации в настоящее время наиболее перспективным выглядит использование оптических информационных технологий [7]. В этой области для получения информации о состоянии канала передачи используется фотодетектирование, основы теории которого заложены в работах [8, 9]. В настоящее время широко исследуются модели фотодетектирования для дискретных [10] и непрерывных [11] процессов.

В дискретной модели развиваются методы исследования статистических характеристик электромагнитного (ЭМ) поля [12], а также приложения к некоторым протоколам квантовых измерений [13]. В данной модели состояние моды резонатора тестируется при помощи атомов-зондов, приготовленных в определенном состоянии. Эти атомы пролетают через резонатор, «собирая» информацию о квантовой моде. На выходе происходит детектирование их состояния в ионизационной камере, которое предоставляет косвенным образом информацию о состоянии ЭМ поля резонатора. Для этого в работах [14, 15] исследуются операторы квантовых скачков, связанных с поглощением фотона в результате взаимодействия, и учитывается влияние неидеальности детектирующего устройства («темновые» срабатывания) на статистику фотоотсчетов и информационные характеристики фотодетектора.

В настоящей работе в дискретную модель включены и исследованы процессы релаксации атома-зонда, взаимодействующего с квантовой модой резонатора. Тем самым рассматривается случай неидеальности микроскопической части фотодетектора и связанные с этим процессом его свойства. В исследовании использовался и получил развитие формализм «эффектов» и «операций», операторов и супероператоров, применяемых в модели фотодетектора. Получено выражение для супероператора Лиувилля, на основе которого, затем, в секулярном приближении выводится система уравнений для «операций», характеризующих взаимодействие микроскопической части

измерительного устройства с окружением. Для ее решения используется теория возмущений по параметру взаимодействия квантовой моды и атома до второго порядка.

Выражение оператора Лиувилля через образующие операторной алгебры $su(1,1)$

Уравнение движения для атомно-полевой матрицы плотности ρ_{AF} с учетом релаксации атома в процессе взаимодействия с модой резонатора имеет вид:

$$\dot{\rho}_{AF}(t) = -i[H_{AF}, \rho_{AF}(t)] + G_A \rho_{AF}(t), \quad \rho_{AF}(0) = |g\rangle\langle g| \otimes \rho_F(0). \quad (1)$$

Здесь H_{AF} – гамильтониан взаимодействия ЭМ поля с атомом:

$$H_{AF} = \Omega |e\rangle\langle g| a \exp(i\Delta t) + \Omega^* |g\rangle\langle e| a^\dagger \exp(-i\Delta t), \quad (2)$$

где $|g\rangle$ и $|e\rangle$ – основное и возбужденное состояния атома соответственно; Ω – параметр связи; a и a^\dagger – операторы уничтожения и рождения фотонов в выбранной моде; $\Delta = \omega - \nu$ – отстройка частоты поля от частоты атомного перехода. Далее G_A – атомный супероператор релаксации

$$(G_A \rho)_{j,k} = \begin{cases} -\rho_{jk} \Gamma_{jk}, \Gamma_{jk} = \Gamma_{kj}, j \neq k; \\ \sum_{q \in \{g,e\}} (\gamma_{qk} \rho_{qq} - \gamma_{kq} \rho_{kk}), j = k, \end{cases} \quad (3)$$

задаваемый посредством скоростей затухания диагональных γ_{jk} и недиагональных элементов Γ_{jk} атомной матрицы плотности.

Представим атомно-полевую матрицу плотности в следующем виде:

$$\rho_{AF}(t) = \rho_{gg}(t) \otimes |g\rangle\langle g| + \rho_{ge}(t) \otimes |g\rangle\langle e| + \rho_{eg}(t) \otimes |e\rangle\langle g| + \rho_{ee}(t) \otimes |e\rangle\langle e|, \quad (4)$$

и запишем систему уравнений для определения матриц ρ_{jk} , $j, k \in \{g, e\}$:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{gg} &= -i(\Omega^* a^\dagger \rho_{eg} e^{-i\Delta t} - \Omega \rho_{ge} a e^{i\Delta t}) + \gamma_{eg} \rho_{ee} - \gamma_{ge} \rho_{gg}, \\ \dot{\rho}_{ge} &= -i(\Omega^* a^\dagger \rho_{ee} e^{-i\Delta t} - \Omega^* \rho_{gg} a^\dagger e^{-i\Delta t}) - \Gamma_{ge} \rho_{ge}, \\ \dot{\rho}_{eg} &= -i(\Omega a \rho_{gg} e^{i\Delta t} - \Omega \rho_{ee} a e^{i\Delta t}) - \Gamma_{eg} \rho_{eg}, \\ \dot{\rho}_{ee} &= -i(\Omega a \rho_{ge} e^{i\Delta t} - \Omega^* \rho_{eg} a^\dagger e^{-i\Delta t}) + \gamma_{ge} \rho_{gg} - \gamma_{eg} \rho_{ee}. \end{aligned} \quad (5)$$

После замены переменных $\rho_{ge} = \tilde{\rho}_{ge} e^{-i\Delta t}$, $\rho_{eg} = \tilde{\rho}_{eg} e^{i\Delta t}$ (тильду договоримся далее снимать) используем секулярное приближение ($\dot{\rho}_{ge} = \dot{\rho}_{eg} = 0$). В результате получается система уравнений для диагональных элементов атомной матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{gg} &= \frac{|\Omega|^2 \Gamma}{\Gamma^2 + \Delta^2} (2a^\dagger \rho_{ee} a - \rho_{gg} a^\dagger a - a^\dagger a \rho_{gg}) - i \frac{|\Omega|^2 \Delta}{\Gamma^2 + \Delta^2} [\rho_{gg}, a^\dagger a] + \gamma_{eg} \rho_{ee} - \gamma_{ge} \rho_{gg}, \\ \dot{\rho}_{ee} &= \frac{|\Omega|^2 \Gamma}{\Gamma^2 + \Delta^2} (2a \rho_{ee} a^\dagger - \rho_{gg} a a^\dagger - a a^\dagger \rho_{gg}) - i \frac{|\Omega|^2 \Delta}{\Gamma^2 + \Delta^2} [\rho_{gg}, a^\dagger a] + \gamma_{ge} \rho_{gg} - \gamma_{eg} \rho_{ee}. \end{aligned} \quad (5)$$

Введем следующие полевые супероператоры:

$$K_0 \rho = \frac{1}{2} (a^\dagger a \rho + \rho a a^\dagger), \quad K_+ \rho = a^\dagger \rho a, \quad K_- \rho = a \rho a^\dagger, \quad N \rho = [a^\dagger a, \rho]. \quad (6)$$

Выпишем для удобства коммутационные соотношения между ними:

$$\begin{aligned} [K_-, K_+] &= 2K_0, \quad [K_0, K_+] = K_+, \quad [K_0, K_-] = -K_-, \\ [K_0, N] &= [K_+, N] = [K_-, N] = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Для удобства записи также можно ввести обозначение атомного проектора:

$$|a\rangle\rangle = |a\rangle\langle a|$$

и с его помощью атомного супероператора:

$$\theta_{jk} = |j\rangle\rangle\langle\langle k|. \quad (8)$$

В этих обозначениях записать уравнение эволюции для атомно-полевой матрицы плотности можно в следующем виде:

$$\dot{\rho}(t) = L\rho(t) = (L_0 + L_r)\rho(t), \quad (9)$$

где L – супероператор Лиувилля:

$$\begin{aligned} L_0 = & -\frac{|\Omega|^2 \Gamma}{\Gamma^2 + \Delta^2} \left[K_0 (\theta_{gg} + \theta_{ee}) + \frac{1}{2} (\theta_{ee} - \theta_{gg}) - K_+ \theta_{ge} - K_- \theta_{eg} \right] - \\ & -i \frac{|\Omega|^2 \Delta}{\Gamma^2 + \gamma^2} N (\theta_{gg} - \theta_{ee}), \\ L_r = & \sum_{j,k} \gamma_{jk} (\theta_{kj} - \theta_{kk}). \end{aligned} \quad (10)$$

Теория возмущений. Выражения для «операций»

Для того чтобы получить систему уравнений для операторов Крауса, будем искать решение уравнения (9) в следующем виде:

$$\rho(t) = \mathfrak{A}(t)\rho(0) = \sum_{j,k \in \{g,e\}} \mathfrak{M}_{jk} \otimes |j\rangle\rangle\langle\langle k| \rho. \quad (11)$$

Записывая вместо (9) уравнение для супероператора эволюции $\mathfrak{A}(t)$:

$$\dot{\mathfrak{A}}(t) = (L_0 + L_r)\mathfrak{A}(t)$$

и используя его разложение (11), получим две системы линейных дифференциальных уравнений, одна из которых определяет \mathfrak{M}_{gg} и \mathfrak{M}_{ge} , другая \mathfrak{M}_{eg} и \mathfrak{M}_{ee} . Ниже приводится одна из них:

$$\begin{cases} \dot{\mathfrak{M}}_{gg} = -\kappa (\Gamma K_0 + i\Delta N - \Gamma/2 + \gamma_{ge}/\kappa) \mathfrak{M}_{gg} + \kappa (\Gamma K_+ + \gamma_{eg}/\kappa) \mathfrak{M}_{eg}, \\ \dot{\mathfrak{M}}_{eg} = \kappa (\Gamma K_- + \gamma_{ge}/\kappa) \mathfrak{M}_{gg} - \kappa (\Gamma K_0 - i\Delta N + \Gamma/2 + \gamma_{eg}/\kappa) \mathfrak{M}_{eg}. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $\kappa = |\Omega|^2 / (\Gamma^2 + \Delta^2)$. Положим, что спонтанные переходы из нижнего атомного уровня $|g\rangle$ на верхний $|e\rangle$ отсутствует, т.е. $\gamma_{ge} = 0$. Будем решать данную систему уравнений, считая κ малым. Разложим супероператоры \mathfrak{M}_{gg} и \mathfrak{M}_{eg} в ряды по этому параметру. В нулевом порядке будем иметь систему

$$\begin{cases} \mathfrak{M}_{gg}^{(0)} = \gamma_{eg} \mathfrak{M}_{eg}^{(0)}, \\ \mathfrak{M}_{eg}^{(0)} = -\gamma_{eg} \mathfrak{M}_{eg}^{(0)}, \end{cases} \quad (13)$$

решение которой легко отыскивается:

$$\mathfrak{M}_{gg}^{(0)} = \mathfrak{I}, \quad \mathfrak{M}_{eg}^{(0)} = 0, \quad (14)$$

где \mathfrak{I} – тождественный супероператор. В следующем порядке будем иметь:

$$\begin{cases} \mathfrak{M}_{gg}^{(1)} = \gamma_{eg} \mathfrak{M}_{gg}^{(1)} + (\Gamma K_0 + i\Delta N - \Gamma/2) \mathfrak{M}_{gg}^{(0)}, \\ \mathfrak{M}_{eg}^{(1)} = -\gamma_{eg} \mathfrak{M}_{eg}^{(1)} + \Gamma K_- \mathfrak{M}_{gg}^{(0)}, \end{cases} \quad (15)$$

и решение

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{gg}^{(1)} &\approx (\Gamma K_- + \Gamma K_0 + i\Delta N - \Gamma/2)t + \Gamma K_- (e^{-\gamma_{eg}t} - 1) / \gamma_{eg}, \\ \mathfrak{M}_{eg}^{(1)} &= \frac{\Gamma K_-}{\gamma_{eg}} (1 - e^{-\gamma_{eg}t}). \end{aligned} \quad (16)$$

Заключение

В работе исследована модель дискретного фотодетектирования с учетом процессов релаксации атома, взаимодействующего с квантовой резонаторной модой. С использованием секулярного приближения была получена система уравнений для супероператоров («операций»), которые характеризуют измерительное устройство и редукцию, возникающую в результате детектирования состояния атома. Приводится решение данной системы операторных уравнений с использованием теории возмущений. Вид полученных супероператоров хорошо согласуется с теми, которые используются в так называемой SD-модели. Точное решение системы требует глубокого исследования супероператоров \mathfrak{M}_{gg} и \mathfrak{M}_{eg} , а также их свойств. Работа над этой задачей ведется авторами в настоящее время.

Литература

1. Caves C.M. Quantum mechanics of measurements distributed in time. II Connections among formulations // *Phys. Rev. D.* – 1987. – V. 35. – № 6. – P. 1815–1830.
2. Karl Kraus: States, Effects and Operations. Fundamental notions of quantum theory. – Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1983. – V. 190. – 2 p.
3. Feinman R.P., Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics // *Rev. Mod. Phys.* – 1948. – V. 20. – № 2. – P. 367–387.
4. Caves C.M. Quantum mechanics of measurements distributed in time. A path-integral formulation // *Phys. Rev. D.* – 1986. – V. 33. – № 6. – P. 1643–1665.
5. Zurek W.H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical // *Rev. Mod. Phys.* – 2003. – V. 75. – № 3. – P. 715–775.
6. Ladd T.D. et al. Quantum computers // *Nature.* – 2010. – V. 464. – P. 45–53.
7. O'Brien J.L., Furusawa A., Vuc'kovic' J. Photonic quantum technologies // *Nature Photonics.* – 2009. – № 3. – P. 687–695.
8. Mandel L. Fluctuations of Photon Beams and their Correlations // *Proc. Phys. Soc. Lond.* – 1958. – V. 72. – № 6. – P. 1037–1048.
9. Kelley P.L., Kleiner W.H. Theory of electromagnetic field measurement and photoelectron counting // *Phys. Rev. A.* – 1964. – V. 136. – № 2. – P. 316–334.
10. Zoller P., Marte M., Walls D.F. Quantum jumps in atomic systems // *Phys. Rev. A.* – 1987. – V. 35. – № 7. – P. 198–207.
11. Ueda M., Imoto N., Ogawa T. Microscopic theory of the continuous measurement of photon number // *Phys. Rev. A.* – 1990. – V. 41. – № 7. – P. 4127–4130.
12. Мирошниченко Г.П. Измерение статистических характеристик квантованной моды в различных режимах фотодетектирования // *ЖЭТФ.* – 2007. – Т. 131. – № 5. – С. 829–841.
13. Мирошниченко Г.П. Дискретное фотодетектирование для протоколов линейных оптических квантовых вычислений и коммуникаций // *ЖЭТФ.* – 2011. – Т. 139. – № 5. – С. 1–11.
14. Dodonov A.V., Mizrahi S.S., Dodonov V.V. Inclusion of nonidealities in the continuous photodetection model // *Phys. Rev. A.* – 2007. – V. 75. – № 1. – P. 013806–013814.

15. Мирошниченко Г.П., Трифанов А.И. Микроскопическая дискретная модель неидеального фотодетектора // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2012. – Т. 3. – № 1. – С. 93–100.

МОДЕЛЬ КВАНТОВЫХ ГРАФОВ ДЛЯ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Е.С. Трифанова

В работе дается подробное изложение методов решения спектральной и транспортной задачи для квантовых графов. Даются практические рецепты нахождения энергии π -электронов и вольт-амперных характеристик для ароматических соединений в рамках модели квантовых графов. Предлагаются приемы, увеличивающие точность численного решения перечисленных задач, а также описываются возможности для распараллеливания вычислений. Также предлагается основанный на генетических алгоритмах способ решения обратных задач, важных для нанотехнологий.

Введение

Первое обоснование квазиодномерности движения π -электронов в ароматических соединениях было дано в работе [1]. В рамках предложенного подхода каждая химическая связь заменяется на узкую трубку, в которой движется электрон, и из которой он не может уйти. Считая ширину трубки пренебрежимо малой, получаем, что электрон движется по сети из одномерных проводников. Математически данная процедура может быть обоснована предельным переходом, проделанным в работах [3]. Практическое применение этого подхода для моделирования систем на основе графена с помощью квантовых графов продемонстрировано в работах [4–6] и др.

В настоящем разделе мы упоминаем математические конструкции, необходимые для анализа на квантовых графах. Для наглядности изложения будем иллюстрировать изложение на примере молекулы нафталина.

Сначала граф представляется в виде объединения семейства ребер, которые необходимо некоторым произвольным образом занумеровать (рис. 1). Обозначим множество индексов через E . отождествим каждый отрезок $e \in E$ с интервалом $[0, l_e]$. Чтобы данная процедура была однозначной, укажем, какому концу соответствует 0. Для этого фиксируем ориентацию на графе и считаем, что начало каждого ребра соответствует нулю (рис. 1). Отметим, что ориентация выбирается произвольно и не влияет на физические свойства, однако не может изменяться в процессе вычислений.

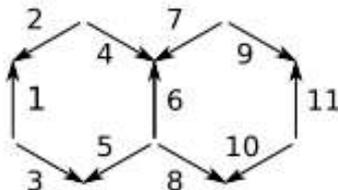


Рис. 1. Разбиение графа на ребра, выбор нумерации и ориентации ребер

Пусть φ – волновая функция всего графа, а φ_e – ее сужение на ребро e . Гамильтониан H_e действует на φ_e как оператор Шредингера: $H_e \varphi_e(x) = -\varphi_e''(x) + V_e(x)\varphi_e(x)$, формально определен на функциях из C_0^∞ , $x \in [0, l_e]$ и обозначает локальную координату в смысле указанного выше соответствия ребер и интервалов. Определение явного (точного) вида потенциала V_e составляет отдельную проблему, однако в большинстве работ, включая **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, потенциал на ребрах при отсутствии внешних полей полагается равным нулю.

Отметим, что мы определили наш оператор только на гладких функциях с компактным носителем, т.е. все рассмотренные выше функции обращались в нуль в некоторых окрестностях всех концов ребер. Формально такой оператор S определен как прямая сумма сужений H_e на функции из $C_0^\infty[0, l_e]$ по всем ребрам $e \in E$. Искомый гамильтониан H есть самосопряженный оператор, являющийся расширением оператора S [2]. Чтобы зафиксировать оператор H единственным образом, необходимо задать граничные условия, которым удовлетворяют волновые функции в узлах (вершинах) графа. Причем, согласно принципу локальности, граничные условия могут связывать только ребра, соединенные в вершине.

Согласно общей теории для задания граничных условий на одном ребре нужна пара операторов граничных значений Γ_e^0, Γ_e^1 , сопоставляющих функции на ребре e пару комплексных чисел. В случае гладкого потенциала V_e в качестве операторов граничных значений берут (3) $\Gamma_e^0 f_e = (f_e(0), f_e(l_e))^T$, $\Gamma_e^1 f_e = (f_e'(0), -f_e'(l_e))^T$.

Условия Кирхгофа запишем в виде:

$$f_{e_1}(v) = f_{e_2}(v) = \dots = f_{e_n}(v), \quad \sum_{k=1}^n \partial f_{e_k}(v) = 0,$$

где e_1, \dots, e_n – ребра, имеющие общую вершину v ; $f_e(v)$ – значение на ребре e в вершине v ; $\partial f_e(v)$ – внешняя производная f в вершине v . Обозначим через $\Gamma_e^j f(v)$ компоненту вектора $\Gamma_e^j f$, отвечающую значению в вершине v , т.е. для гладкого V_e

$$\Gamma_e^0 f_e(v) = \begin{cases} f_e(0), & \text{если } v - \text{начало } e; \\ f_e(l_e), & \text{если } v - \text{конец } e; \end{cases} \quad \Gamma_e^1 f_e(v) = \begin{cases} -f_e'(0), & \text{если } v - \text{начало } e; \\ f_e'(l_e), & \text{если } v - \text{конец } e. \end{cases}$$

Тогда условия Кирхгофа записываются так:

$$\Gamma_{e_1}^0 f(v) = \Gamma_{e_2}^0 f(v) = \dots = \Gamma_{e_n}^0 f(v); \quad \sum_{k=1}^n \Gamma_{e_k}^1 f(v) = 0.$$

В таком виде условия Кирхгофа можно распространить на случай потенциала V с особенностями. В наиболее общем виде условие в вершине v имеет вид

$$A_v \Gamma^0 f(v) = B_v \Gamma^1 f(v),$$

где $\Gamma^0 f(v) = (\Gamma_{e_1}^0 f(v), \dots, \Gamma_{e_n}^0 f(v))^T$, $\Gamma^1 f(v) = (\Gamma_{e_1}^1 f(v), \dots, \Gamma_{e_n}^1 f(v))^T$ – вектора граничных значений в вершине v . A_v и B_v – матрицы размером $n \times n$ такие, что ранг матрицы, полученной приписыванием A_v к B_v слева, равен n и $A_v B_v^* = B_v A_v^*$.

Для ручного счета система для модели молекулы нафталина получается довольно большой, хотя молекула простая. Однако в данном примере счет можно упростить, заметив, что в вершине кратности 2 граничные условия Кирхгофа равносильны условию непрерывности, поэтому вершины кратности 2 можно исключить, объединив несколько ребер в одно (возможно, при этом необходимо изменить ориентацию ребер). Так, для нафталина можно объединить ребра 5–3–1–2–4 и ребра 7–9–11–10–8, оставив тем самым только две вершины кратности 3.

Объединив все граничные значения в вектора

$$f = (f_1(0), f_1(1), f_2(0), f_2(1), \dots, f_{11}(0), f_{11}(1))^T,$$

$$f' = (-f_1'(0), f_1'(1), -f_2'(0), f_2'(1), \dots, -f_{11}'(0), f_{11}'(1))^T$$

граничные условия можно переписать в виде $Af = Bf'$. Можно заметить, что матрицы A и B имеют блочную структуру, блоки которой, однако, не обязательно находятся на диагонали.

Спектральный анализ

Рассмотрим спектральную задачу $Hf = \xi f$. Согласно определению оператора H задача равносильна системе

$$\begin{cases} H_e f_e = \xi f_e & \forall e \in E; \\ A\Gamma^0 f = B\Gamma^1 f \Leftrightarrow A_v \Gamma^0 f(v) = B_v \Gamma^1 f(v) & \forall v \in V. \end{cases} \quad (9)$$

Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений можно провести обычными методами дискретизации, однако этот подход имеет следующие недостатки: трудно подобрать базис, удовлетворяющий граничным условиям; размер базиса зависит от вида оператора на ребре, длины ребра и т.п.; для одинаковых частей системы расчет производится многократно.

Здесь предлагается альтернативный подход, основанный на функции Вейля. Рассмотрим ребро e и зафиксируем на нем граничные условия $F_e = \Gamma_e^0 f \in \mathbb{C}^2$. В силу единственности решения f дифференциального уравнения $H_e f_e = \xi f_e$ с граничными условиями $\Gamma_e^0 f = F_e$, можно корректно определить $Q_e(\xi)F_e = \Gamma_e^1 f$.

Отображение $Q_e(\xi): \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ – линейно и корректно определено для всех $\xi \in \mathbb{C}$, при которых решение краевой задачи существует и единственно. Всегда можно подобрать функции $D_e(\xi)$ и $N_e(\xi)$ такие, что $D_e(\xi)\Gamma_e^0 f_e = N_e(\xi)\Gamma_e^1 f_e$ для $\forall f_e: H_e f_e = \xi f_e$. Отметим, что в приложениях функции $D_e(\xi)$ и $N_e(\xi)$ можно выбрать аналитическими по ξ . Можно показать, что уравнение $H_e f_e = \xi f_e$ эквивалентно уравнению $D_e \Gamma_e^0 f_e = N_e \Gamma_e^1 f_e$ на вектора $\Gamma_e^0 f_e, \Gamma_e^1 f_e$. Таким образом систему дифференциальных уравнений (5) мы заменяем на системы

$$\begin{cases} D_e F_e^0 = N_e F_e^1 & \forall e \in E; \\ A_e F^0(v) = B_e F^1(v) & \forall v \in V, \end{cases} \quad (10)$$

где используются обозначения $F_e^j = \Gamma_e^j f, F^j(v) = \Gamma^j f(v), j = 0, 1$. В отличие от системы (5), система (6) имеет конечный размер, равный удвоенному числу ребер. Однако в отличие от (5) система (6) не является линейной, т.е. для нее не подходит обычный способ поиска собственных значений.

Далее рассматривается один из способов эффективного решения системы (6). Составим векторы F^j из всех значений $F_e^j, e \in E$ (или $F^j(v), v \in V$), занумерованных каким-либо подходящим образом, причем нумерации для $j = 0$ и $j = 1$ должны совпадать. Определим матрицы D, N и A, B таким образом, что

$$D_e F_e^0 = N_e F_e^1 \quad \forall e \Leftrightarrow DF^0 = NF^1 \text{ и } A_v F^0(v) = B_v F^1(v) \quad \forall v \Leftrightarrow AF^0 = BF^1.$$

Из альтернативы Фредгольма ясно, что матричное решение (6) существует, если и только если $d(\xi) = \det \begin{pmatrix} A & B \\ N & D \end{pmatrix} = 0$. Как известно, зависимость определителя d от ξ аналитическая, однако она слишком сложна, чтобы быстро находить нули. Перепишем систему (6) для случая существования N^{-1} :

$$\begin{cases} AF^0 = BF^1; \\ NF^1 = DF^0. \end{cases} \quad \begin{cases} AF^0 = BN^{-1}DF^0; \\ F^1 = N^{-1}DF^0. \end{cases} \Rightarrow (A - BN^{-1}D)F^0 = 0.$$

Значит, решение существует только при $\det(A - BN^{-1}D) = 0$. Функция $Q(\xi) = N^{-1}D$ называется функцией Вейля. Она обладает свойством $\partial Q / \partial \xi \geq 0$. Так как матрица $Q(\xi)$ самосопряженная для вещественных ξ , то для нее есть полный набор

вещественных собственных значений $\mu_k(\xi)$, причем функции $\mu_k(\xi)$ локально монотонно возрастают. Так как N и D аналитические функции переменной ξ , то $Q(\xi)$ также аналитична за исключением точек ξ , таких, что $\det N(\xi) = 0$, т.е. $\xi \in \sigma_D$. Таким образом Q имеет только изолированные особенности, которые согласно общей теории являются полюсами первого порядка. Следовательно, функции μ_k обладают теми же особенностями, что и Q . Получаем, что функции $\mu_k(\xi)$ – непрерывные монотонно возрастающие функции на каждом интервале, не содержащем точек из σ_D , которые либо имеют бесконечный предел в точке из σ_D , либо непрерывны и гладко продолжаются на следующий интервал. Это свойство позволяет численно находить решение ξ методами дихотомии, секущей, Ньютона и т.п.

Подграфы. Оптимизация

Как раньше было показано, граф для модели нафталина задается следующим набором условий:

$$\begin{cases} \text{Kirchhoff:} & 1_1 + 2_1, 2_0 + 4_0, 3_0 + 1_0, 3_1 + 5_1, 4_1 + 6_1 + 7_1, 5_0 + 6_0 + 8_0, \\ \text{Kirchhoff:} & 7_0 + 9_0, 8_1 + 10_1, 9_1 + 11_1, 11_0 + 10_0; \\ \text{Free:} & 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь мы обозначили e_0 – начало, e_1 – конец ребра. Такая запись означает следующее:

$$a_{0/l} + b_{0/l} + \dots + z_{0/l} \Leftrightarrow A \begin{pmatrix} \pm f'_a(0/l_a) \\ \dots \\ \pm f'_z(0/l_z) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} f_a(0/l_a) \\ \dots \\ f_z(0/l_z) \end{pmatrix},$$

где нижний индекс при ребре x принимает либо значение 0 (начало ребра), в этом случае в соответствующей позиции в векторе граничных значений стоит $f_x(0)$ и $-f'_x(0)$, или принимает значение 1, в этом случае в векторе граничных условий стоят $f_x(l_x)$ или $f'_x(l_x)$.

Условие «Free» в **Ошибка! Источник ссылки не найден.** означает, что на e задан свободный оператор Шредингера, который, как показано выше, можно заменить на энергозависящие граничные условия:

$$N \begin{pmatrix} -f'_e(0) \\ f_e(l_e) \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} f(0) \\ f(l_e) \end{pmatrix}.$$

Как мы видим, полная система оказывается довольно большой, размера 22×22 . Для нахождения спектра графа, вычисление которого имеет сложность $c_\alpha N^\alpha$, где N – число концов ребер системы, и константа $2 < \alpha \leq 3$ зависит от используемого алгоритма. Далее мы покажем, как можно уменьшить сложность вычислений, разбив граф на подграфы, и проводя вычисления для каждого подграфа в отдельности. Например, два последовательно соединенных ребра можно заменить на одно ребро с длиной, равной сумме длин исходных. Подграф можно заменить на условия, связывающие значения собственных функций только на внешних концах ребер подграфа.

Тогда операция исключения N внутренних вершин из графа с M внешними вершинами имеет сложность $c_\beta N^\beta + c_\gamma N^\gamma M$, где $2 < \beta \leq 3$, $1 < \gamma \leq 2$ в зависимости от алгоритма. Покажем, каким образом применение алгоритма «разделяй и властвуй»

позволяет уменьшить сложность вычислений. Рассмотрим для простоты граф из 2^{n-1} ребер (т.е. 2^n концов ребер), причем будем полагать, что для всех шаров в графе справедлива оценка $\#\partial B \leq c_\delta (\#B)^\delta$, $0 \leq \delta \leq 1$, где $\#B$ – число концов ребер, лежащих в шаре, а $\#\partial B$ – число концов ребер, входящих в вершины границы шара. В силу указанной оценки, число внешних концов ребер не превосходит $c_\delta 2^{n\delta}$, а число внутренних концов очевидно меньше 2^n , следовательно сложность исключения внутренних концов ребер можно оценить как $c_\beta 2^{n\beta} + c_\gamma 2^{n\gamma} c_\delta 2^{n\delta} \leq c_\varepsilon 2^{n\varepsilon}$, для $\varepsilon = \max(\beta, \gamma + \delta)$, $2 < \varepsilon \leq 3$.

Таким образом итоговая сложность исключения концов ребер через разбиение на два подграфа равна $2c_\varepsilon 2^{(n-1)\varepsilon} + c_\theta 2^{(n-1)\theta}$. Для алгоритма «разделяй и властвуй» получаем

$$\text{оценку сложности } O(N) + \begin{cases} O(N^\theta), & \theta > 1; \\ O(N \log N), & 0 \leq \theta \leq 1. \end{cases}$$

Как мы видим, сложность полученного алгоритма зависит от структуры графа. Рассмотрим предельные случаи. Если граф полный, то $\delta = 1$ и $\theta = \max(\beta, \gamma + 1)$, т.е. сложность алгоритма равна сложности более медленного из применяемых алгоритмов обращения матрицы и матричного произведения и мы не получаем никакого ускорения за счет разбиения на подграфы. Если же граф является двоичным деревом, то выбирая в качестве подграфов ветви, выходящие из одной вершины, мы получаем на каждом шаге постоянное число внешних концов ребер, т.е. $\delta = 0$. Тогда сложность алгоритма равна $O(N \log N)$, и мы получаем значительное ускорение.

Задача рассеяния

Пусть теперь граф содержит бесконечную компоненту. На этой компоненте существует решение в виде падающих волн. Задача рассеяния состоит в установлении связи между коэффициентами при состояниях рассеяния. В качестве примера рассмотрим рассеяние на молекуле нафталина (рис. 2). На лучах 1,11 заданы обычные операторы Шредингера с асимптотически свободным потенциалом $H_k f_k(x) = -f_k''(x) + v_k(x)f_k(x)$, $k = 1, 11$.

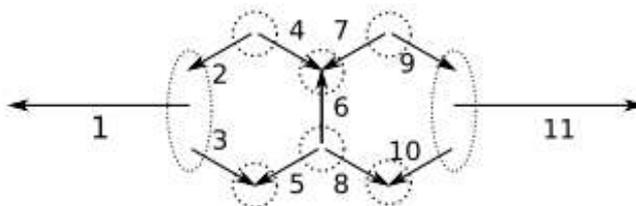


Рис. 2. Квантовый граф, моделирующий рассеяние на молекуле нафталина. Лучи 1 и 11 моделируют резервуары. Пунктирной линией обведены концы ребер, которые связываются общими граничными условиями

Способ присоединения резервуаров задается граничными условиями, в рассматриваемом примере это условия в точках $1+2+3$ и $9+10+11$. Если нет каких-либо особенных физических причин, условия соединения с резервуаром выбираются условиями Кирхгофа.

Обозначим через D_b и N_b матрицы, задающие отображение Дирихле-Неймана. Тогда систему на определение состояний рассеяния можно записать в виде:

$$\begin{cases} -f_k'(x) + V_k(x)f_k(x) = Ef_k(x), & k = 1, 11, \\ D_b(E) \begin{pmatrix} f_1(0) \\ f_{11}(0) \end{pmatrix} = N_b(E) \begin{pmatrix} -f_1'(0) \\ -f_{11}'(0) \end{pmatrix}. \end{cases}$$

Матрица рассеяния случая для $V_{1,11} = 0$ имеет вид $S(E) = (D_b - \sqrt{-E}N_b)^{-1} (D_b + \sqrt{-E}N_b)$. Если N_b обратима, то $S(E) = 1 + 2\sqrt{-E} (D_b - \sqrt{-E}N_b)^{-1} N_b = 1 + 2\sqrt{-E} (N_b^{-1}D_b - \sqrt{-E})^{-1}$, где $N_b^{-1}D_b$ – функции Вейля. Эта формула естественным образом продолжается на случай многообразий.

Литература

1. Platt J.R., Ruedenberg K. et al. Free-Electron Theory of Conjugated Molecules: a Source Book. Papers of the Chicago Group, 1949–1961. – Wiley, New York, 1964.
2. Kuchment P. Graph models of wave propagation in thin structures // Waves in Random Media. – 2002. – V. 12. – № 4. – P. R1–R24.
3. Exner P., Post O. Approximation of quantum graph vertex couplings by scaled Schroedinger operators on thin branched manifolds // Commun. Math. Phys., to appear.
4. Лобанов И.С., Попов И.Ю. Рассеяние на стыке нанотрубок «зигзаг» и «кресло» // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2012. – Т. 3. – № 2. – С. 4–26.
5. Golubok A.O., Popov I.U., Mukhin I.S., Lobanov I.S. Creation and study of 2D and 3D carbon nanographs // Physica E. – 2012. – V. 44. – P. 976–980.
6. Korotyaev E., Lobanov I. Schrödinger operators on zigzag graphs // Annales Henri Poincare. – 2007. – V. 8. – № 6. – P. 1151–1176.
7. Cantu-Paz E. A Survey of Parallel Genetic Algorithms // Calculateurs paralleles. – 1998. – V. 10. – P. 141–171.
8. Band R., Sawicki A., Smilansky U. Scattering from isospectral quantum graphs // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. – 2010. – V. 43. – Is. 41. – P. 415201.

УДК 334.021

ПРИМЕНЕНИЕ УГЛЕРОДНОЙ МАРКИРОВКИ В МЕЖДУНАРОДНЫХ ИНИЦИАТИВАХ ПО СНИЖЕНИЮ ВЫБРОСОВ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ

А.С. Трофимова

Научный руководитель – к.т.н., доцент О.И. Сергиенко

Рассмотрено применение новой экологической маркировки «углеродный след» для целей информирования потребителей и обеспечения прослеживаемости в продуктовой цепочке. Показано, что расширение применения углеродной маркировки в зарубежной практике, особенно в Европейском Союзе, является ответом на международные инициативы по ограничению выбросов парниковых газов.

Ключевые слова: международные инициативы, стандарты, углеродный след, выбросы парниковых газов, цепочка поставок, потребители.

Международные инициативы по ограничению выбросов парниковых газов

Применение углеродной маркировки является закономерным результатом развития нового экономического курса низкоуглеродной экономики, который разрабатывается и реализуется на основе международных, региональных,

национальных и местных инициатив по ограничению содержания парниковых газов (ПГ) в атмосфере Земли. Новые углеродные критерии могут применяться для экологизации сельскохозяйственного производства, снижения агроэкологических рисков, и способствовать решению задач обеспечения продовольственной безопасности в долгосрочной перспективе [1].

Среди важнейших инициатив по ограничению выбросов ПГ следует выделить создание многостороннего партнерства бизнес-структур, неправительственных и государственных организаций разных стран, возглавляемое Всемирным советом бизнеса по устойчивому развитию (World Business Council for Sustainable Development, WBCSD) и Всемирным ресурсным институтом (World Resources Institute, WRI), для разработки и продвижения международных стандартов и протоколов учета и отчетности по парниковым газам (Инициатива по созданию протокола парниковых газов – the Greenhouse Gas Protocol Initiative) (табл. 1) [2].

Впервые разработанные в 2001 г. стандарты корпоративного учета выбросов ПГ (Corporate Accounting and Reporting Standards) обобщают опыт 350 ведущих экспертов, представителей бизнеса, негосударственных организаций (НГО), государственных органов и ассоциаций. Данные стандарты были проверены на практике в более чем 30 компаниях в девяти странах мира.

Стандарт учета и отчетности в жизненном цикле (Product Life Cycle Accounting and Reporting Standard) представляет собой первый шаг на пути к более устойчивому производству продукции. Его применение позволяет компаниям оценить выбросы ПГ в полном жизненном цикле продукции, включая получение сырья, производство, транспортировку, хранение, использование продукции и утилизацию отходов. Результаты оценки выбросов ПГ создают конкурентные преимущества, позволяя улучшить дизайн продукции, повысить эффективность использования материальных и энергетических ресурсов, снизить себестоимость, а также устранить экологические риски.

Таблица 1. Международные стандарты в области учета и отчетности по выбросам парниковых газов

№	Название, год принятия	Перевод названия	Краткое содержание
1	Corporate Accounting and Reporting Standards (Corporate Standard), 2004	Стандарты корпоративного учета и отчетности (Корпоративный стандарт)	Содержит указания по определению, расчету и подготовке отчетности по выбросам ПГ в корпорациях и компаниях
2	Project Accounting Protocol and Guidelines, 2004	Протокол и руководство по проектному учету ПГ (Проектный стандарт)	Содержит общее руководство по учету и отчетности для отдельных проектов по сокращению выбросов ПГ, использованию земельных ресурсов, изменению в землепользовании и лесном хозяйстве
3	Corporate Value Chain (Scope 3) Accounting and Reporting Standard, 2011	Стандарт учета и отчетности в корпоративной цепочке создания ценности (область 3)	Содержит указания компаниям по оценке выбросов ПГ во всей цепочке создания ценности и определению наиболее эффективных способов снижения выбросов ПГ

№	Название, год принятия	Перевод названия	Краткое содержание
4	Product Life Cycle Accounting and Reporting Standard, 2011	Стандарт учета и отчетности в жизненном цикле продукции	Позволяет оценить выбросы ПГ в полном жизненном цикле продукции и сосредоточить усилия на наибольших из возможных сокращениях выбросов ПГ

Британская организация по стандартизации (BSI British Standards Institute – член Международной организации по стандартизации (ИСО) от Великобритании) разработала «Технические требования по оценке эмиссии парниковых газов на протяжении жизненного цикла товаров и услуг» (Publicly Available Specification, PAS 2050) [3]. Эта работа выполнялась при поддержке Министерства по вопросам окружающей среды, продовольствия и сельского хозяйства Великобритании (Department for Environment, Food and Rural Affairs, Defra) компанией Carbon Trust. В большей степени PAS 2050 относится к пищевым продуктам, поскольку, как было упомянуто выше, во-первых, именно в их производстве происходят значительные выбросы ПГ, отличных от CO₂, и, во-вторых, они вызывают особый интерес потребителей и представителей розничной торговли.

Начиная с 1998 г. Международная организация по стандартизации изучает потенциальную роль добровольных стандартов в содействии осуществлению Рамочной конвенции по изменению климата Организации Объединенных Наций (РКИК ООН) и Киотского протокола к ней. Разработанные стандарты ИСО помогают решить проблему изменения климата, устанавливают методы оценки выбросов газов ПГ, контроля и торговли квотами на выбросы, а также измерения углеродного следа продукции (табл. 2) [4].

Таблица 2. Группа стандартов ИСО для оценки выбросов парниковых газов

Обозначение	Название документа	Перевод названия	Статус в России
ISO 14064-1:2006	Greenhouse gases – Part 1: Specification with guidance at the organization level for quantification and reporting of greenhouse gas emissions and removals	Парниковые газы – Часть 1: Спецификация с руководством на уровне организации по количественному определению и отчетности об эмиссии и удалении парниковых газов	ГОСТ Р ИСО 14064-1-2007
ISO 14064-2:2006	Greenhouse gases – Part 2: Specification with guidance at the project level for quantification, monitoring and reporting of greenhouse gas emission reductions or removal enhancements	Парниковые газы – Часть 2: Спецификация с руководством на уровне проекта по количественному определению, мониторингу и отчетности об эмиссии парниковых газов или увеличения их удаления	ГОСТ Р ИСО 14064-2-2007
ISO 14064-3:2006	Greenhouse gases – Part 3: Specification with guidance for the validation and verification of greenhouse gas assertions	Парниковые газы – Часть 3: Спецификация с руководством для валидации и верификации заявлений по парниковым газам	ГОСТ Р ИСО 14064-3-2007

Обозначение	Название документа	Перевод названия	Статус в России
ISO 14065:2007	Greenhouse gases – Requirements for greenhouse gas validation and verification bodies for use in accreditation or other forms of recognition	Парниковые газы – Требования к органам, выполняющим валидацию и верификацию парниковых газов, для использования при аккредитации или для других форм подтверждения соответствия	ГОСТ Р ИСО 14065-2010
ISO/WD 14066	Greenhouse gases – Competency requirements for GHG validators/verifiers	Требования к компетентности валидаторов/верификаторов парниковых газов	—
ISO/CD 14067	Carbon footprint of products – Requirements and guidelines for quantification and communication	Углеродный след продуктов – Требования и рекомендации по количественному анализу и взаимодействию	—
ISO/DTR 14069	Greenhouse gases (GHG) – Quantification and reporting of GHG emissions for organizations (Carbon footprint of organization) – Guidance for the application of ISO 14064-1	Парниковые газы (ПГ) – Количественный анализ и отчетность по выбросам ПГ организаций (Углеродный след организации) – Руководство по применению ISO 14064-1	—

PAS 2050, также как и стандарты ИСО, использует уже существующие методики оценки жизненного цикла, которые дают возможность подробно и точно количественно определить влияние на изменение климата ПГ и другие воздействия в течение жизненного цикла продукции или услуг, включая их производство и потребление. Британская компания Carbon Trust выполнила исследование выбросов парниковых газов для 75 типов продуктов, выпускаемых такими известными компаниями как PepsiCo, Boots, Innocent, Marshalls, Tesco, Cadbury, Halifax, Coca Cola, Kimberly Clark, The Co-operative Group, Scottish & Newcastle, Coors Brewers, Muller, British Sugar, ABAgri, Sainsbury's, Danone, Continental Clothing Company, Colors Fruit, Morphy Richards, Mey Selections and Aggregate Industries [3].

Углеродная маркировка как инструмент снижения выбросов ПГ

Применение углеродной маркировки в числе экологических критериев уже получило достаточно широкое распространение в мировой практике. В Японии, Новой Зеландии и Франции на основе группы стандартов ИСО 14060 разработаны национальные системы «углеродного» маркирования. Новые критерии по выбросам парниковых газов добавлены в существующую систему экологической маркировки «Голубой Ангел» в Германии; в Европейском Союзе (ЕС) в системе «Европейский цветок» приводятся удельные выбросы CO₂ на единицу продукции [5].

Маркирование продукции с указанием углеродного следа способствует повышению осведомленности общества о негативных последствиях глобального потепления, постепенно приводит к росту спроса на более устойчивые (экологически безопасные) продукты. Как показывает зарубежный опыт, потребители ищут более

подробную информацию о влиянии продукции на окружающую среду для выбора таких продуктов. Для информирования потребителей производители используют знаки экомаркировки, свидетельствующие о снижении загрязнения окружающей среды при производстве продукции, в том числе и об уменьшении эмиссии ПГ, что и подтверждает возможность перехода в перспективе к более устойчивому производству.

По данным ряда исследований, проведенных в ЕС, работа по формированию экологического сознания потребителей дает положительные результаты. Как показывают опросы, проведенные в 2009 г. в 27 странах ЕС, европейцы осознают необходимость устойчивого потребления и производства. Около 80% городских жителей рассматривают экологические воздействия продукции в качестве важного элемента, влияющего на их покупательские предпочтения. Европейские потребители правильно оценивают экологические воздействия приобретаемой продукции на окружающую среду, 55% респондентов уверенно называют наиболее важные экологические аспекты производства продовольствия, такие как энергопотребление, образование отходов, нерациональное водопользование и образование сточных вод [6].

Знаки экомаркировки, как знаки соответствия экологически безопасной продукции установленным экологическим критериям, хорошо распознаются европейцами. Экологические характеристики продукции становятся более важными, чем такие факторы, воздействующие на покупательский выбор, как качество продукции, бренд и цена. Несмотря на то, что в 2009 г. только 7% опрошенных горожан ЕС при принятии решения о покупке расценили экологические воздействия продукции, как более значимые по сравнению с его качеством, почти пятая часть респондентов (19%) рассматривали их важнее цены и 59% – важнее бренда [7].

В последние годы наряду с традиционной экологической маркировкой начинает распространяться и новый экосигнал «углеродный след» (carbon footprint). Углеродный след представляет собой суммарную массу выбросов ПГ, поступающих в окружающую среду в жизненном цикле продукции.

Особенно широкое применение углеродная маркировка получила в секторе производства продуктов питания, поскольку производство продовольственного сырья в сельском хозяйстве связано с выбросами ПГ и вносит значительный вклад в глобальное потепление климата. Согласно данным Межправительственной группы экспертов по изменению климата (МГЭИК) сельское хозяйство входит в пятерку основных отраслей, воздействующих на окружающую среду выбросами ПГ, и в 2004 г. вклад сельского хозяйства в глобальное потепление климата составил 13,5% [2, 8].

Акцент на устойчивое развитие в рамках цепочки поставок продовольствия и других потребительских товаров становится мощным фактором, влияющим на конкурентоспособность производителей. Об этом свидетельствует опыт таких компаний, как Wal-Mart, Nike и др. Около 77,3% из числа 750 опрошенных руководителей и топ-менеджеров крупных транснациональных корпораций в 2011 г. подтвердили большое значение измерения «углеродного следа» в рамках своих производств и 27,8% – в пределах расширенных цепочек поставок. В то же время 76,1% респондентов также указали и на высокую значимость такого показателя, как безопасность труда в международной продуктовой цепочке [2, 7]. Согласно исследованиям компании Wal-Mart благодаря применению концепции устойчивого развития в рамках компании могут быть получены существенные экологические сбережения и прибыль, однако расширение сферы приложения усилий на экологизацию всей цепочки поставок позволяет получить существенно более высокие результаты [9, 10].

Однако показатель «углеродный след» в целом следует считать индикативным, поскольку в отношении выбросов ряда ПГ существуют значительные неопределенности. По оценкам специалистов при определении выбросов CH_4 и N_2O в

сельском хозяйстве погрешность может достигать 30–50%, а углекислого газа в лесном хозяйстве – может быть еще выше [8].

Результаты исследований в области менеджмента цепочки поставок в крупнейших розничных сетях мира показывают, что в настоящее время большинство операторов рассматривает углеродную маркировку в качестве одного из наилучших критериев, позволяющих оценить как экологичность продуктовой цепочки в целом, так и прослеживаемость и эффективность использования материальных и энергетических потоков внутри нее. Ее применение повышает спрос на продукты питания местных производителей, так как транспортировка на дальние расстояния приводит к значительной эмиссии углекислого газа.

Среди основных препятствий для распространения углеродной маркировки в России можно выделить недостаточную заинтересованность руководителей предприятий и отсутствие понимания потребителями важности учета экологического воздействия продукции.

Немногочисленные исследования, посвященные изучению отношения россиян к экологически безопасной продукции, показывают, что для жителей больших городов, таких как Москва и Санкт-Петербург, характерна забота о своем здоровье. Этот фактор являлся определяющим при выборе продукции покупателями в 2006–2008 гг. Результаты опроса москвичей, проведенного в 2011 г., показали, что среди них нет доминирующего мнения о том, что такое экологически безопасная продукция. Мнения респондентов примерно поровну распределились между тремя основными характеристиками: экологически безопасная продукция безопасна для здоровья (32% опрошенных), оказывает минимальное воздействие на окружающую среду (33% ответов) и содержит только натуральные компоненты (35% респондентов). Около 70% москвичей готовы платить за экологичные продукты питания больше, чем за обычные продукты [11].

Представляется целесообразным изучение и применение зарубежного опыта оценки эмиссии ПГ и углеродной маркировки для развития устойчивого производства и потребления в России. Для этого уже созданы необходимые предпосылки. Во-первых, одобрены и приняты в Российской Федерации (РФ) основные стандарты ИСО в области инвентаризации и учета ПГ. Во-вторых, принята «Энергетическая стратегия РФ на период до 2030 г.» и проводится реформа в области энергосбережения и повышения энергоэффективности, экономии всех топлив. В рамках принятого закона № 261-ФЗ «Об энергосбережении и о повышении энергетической эффективности» проводятся энергетические обследования предприятий и инвентаризация источников энергопотребления, составление энергетических паспортов, развивается маркирование энергетической эффективности продукции.

Литература

1. Сергиенко О.И. Управление продовольственной безопасностью в контексте перехода к низкоуглеродной экономике // Экономика и экологический менеджмент. – ЭНЖ. – 2012. – № 1 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.economics.open-mechanics.com/journals>, свободный.
2. Сергиенко О.И., Трофимова А.С. Экологические критерии в продуктовой цепочке: международный опыт // Экономика и экологический менеджмент. – ЭНЖ. – 2012. – № 3 – [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.economics.open-mechanics.com/journals>, свободный.
3. Проект BSI – по оценке углеродного следа продукции [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.carbontrust.co.uk/Publications/pages/publicationdetail.aspx?id=>, свободный.

4. Стандартизация в области экологии. Серия: Все о качестве. Отечественные разработки. – М.: НТК «Трек», 2010. – № 6 (69). – 80 с.
5. Маркировка «Голубой ангел» – [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.blauer-engel.de>, свободный.
6. Europeans's attitudes towards issue of sustainable consumption and production». The Flash Eurobarometer. – Analytical Report. – Flash № 256, 2009.
7. The Chief Supply Chain Officer Report 2011 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.scmworld.com>, свободный.
8. Изменение климата. Обобщающий доклад: МГЭИК, 2007. – Женева, МГЭИК, 2007. – 104 с.
9. Heying A., Sanzero W. A Case Study of Wal-Mart's «Green» Supply Chain Management. – 2009 – [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.apicsterragrande.org/Wal-Mart%20Sustainability.pdf>, свободный.
10. Walmart [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://corporate.walmart.com>, свободный.
11. Смирнова Е.В. Экологическая маркировка. Руководство для бизнесменов и вдумчивых покупателей. – М.: Зеленая книга, 2012. – 128 с.

УДК 004.4'242

МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ УПРАВЛЯЮЩИХ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ ПО СЦЕНАРИЯМ РАБОТЫ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ УДОВЛЕТВОРЕНИЯ ОГРАНИЧЕНИЙ

В.И. Ульяновцев

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.А. Шалыто

В настоящей работе предложен метод построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы. Метод основан на сведении указанной задачи к задаче удовлетворения ограничений.

Ключевые слова: управляющий конечный автомат, задача удовлетворения ограничений, сценарии работы.

Введение

В последнее время все в более широком кругу задач начинает применяться автоматное программирование, в рамках которого поведение программ описывается с помощью детерминированных конечных автоматов [1].

Для многих задач автоматы удается строить эвристически, однако существуют задачи, для которых такое построение автоматов затруднительно. К задачам этого класса относятся, в частности, задачи об «Умном муравье» [2–4], об управлении моделью беспилотного летательного аппарата [5].

Для построения автоматов в задачах такого типа успешно применяются генетические алгоритмы [6], в том числе на основе обучающих примеров [7]. Недостатком генетических алгоритмов является то, что время их работы весьма велико и его достаточно трудно оценить аналитически.

Целью настоящей работы являлась разработка метода построения управляющего конечного автомата, лишённого указанных недостатков.

Постановка задачи

Управляющим конечным автоматом будем называть детерминированный конечный автомат, каждый переход которого помечен *событием*, последовательностью

выходных воздействий и охранным условием, представляющим собой логическую формулу от входных переменных.

Автомат получает события от так называемых *поставщиков событий* (в их роли могут выступать внешняя среда, интерфейс пользователя и т.д.) и генерирует выходные воздействия для *объекта управления*. При поступлении события автомат выполняет переход в соответствии с охранными условиями и значениями входных переменных. При выполнении перехода генерируются выходные воздействия, которыми он помечен, и автомат переходит в соответствующее состояние. Отметим, что состояния такого автомата не делятся на допускающие и не допускающие.

Формальное определение управляющего автомата дано в [1]. Пример управляющего автомата приведен на рис. 1.

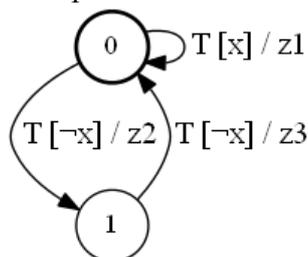


Рис. 1. Пример управляющего автомата

Для данного автомата множество входных событий равно $\{A, B\}$, охранные условия зависят от единственной логической входной переменной x , множество выходных воздействий равно $\{z1, z2\}$. Далее, состояние автомата с номером 0 будем считать начальным.

В настоящей работе в качестве исходных данных для построения управляющего конечного автомата используется множество *сценариев работы*. Сценарием работы будем называть последовательность $T_1 \dots T_n$ троек $T_i = \langle e_i, f_i, A_i \rangle$, где e_i – входное событие; f_i – булева формула от входных переменных, задающая охранный условие; A_i – последовательность выходных воздействий. В дальнейшем тройки T_i будем называть *элементами сценария*.

Будем говорить, что автомат, находясь в состоянии *state*, *удовлетворяет элементу сценария* T_i , если из *state* исходит переход, помеченный событием e_i , последовательностью выходных воздействий A_i и охранным условием, тождественно равным f_i как булева формула. Автомат *удовлетворяет сценарию работы* $T_1 \dots T_n$, если он удовлетворяет каждому элементу данного сценария, находясь при этом в состояниях пути, образованного соответствующими переходами.

В работе [8] разработан метод построения управляющего автомата по сценариям работы. В ней решается задача построения управляющего конечного автомата с заданным числом состояний S по заданному множеству сценариев работы S_c , которым автомат должен удовлетворять. Метод решения основан на сведении поставленной задачи к задаче о выполнимости булевой формулы (boolean satisfiability problem, SAT). Настоящая работа является продолжением исследований – для решения задачи используется сведение к задаче удовлетворения ограничений (constraint satisfaction problem, CSP). В дальнейшем такой подход позволит задавать такие ограничения на искомую модель, которые затруднительно или невозможно задать с помощью булевой формулы.

Этапы предлагаемого метода

Предлагаемый алгоритм включает в себя пять основных этапов.

1. Построение дерева сценариев.
2. Построение графа совместимости вершин дерева сценариев.

3. Построение набора ограничений на целочисленные переменные, задающего требования к «раскраске» построенного графа и выражающей непротиворечивость и полноту системы переходов искомого автомата.
4. Запуск сторонней программы, решающей задачу удовлетворения построенным ограничениям, или вызов соответствующего метода сторонней библиотеки.
5. Построение автомата по найденной выполняющей подстановке.

Первый, второй и пятый этапы предлагаемого метода совпадают с соответствующими этапами предыдущего метода и подробно изложены в [8]. На рис. 2 приведено дерево сценариев (его ребра обозначены штриховыми линиями) и построенный по нему граф совместимости (его ребра обозначены сплошными линиями).

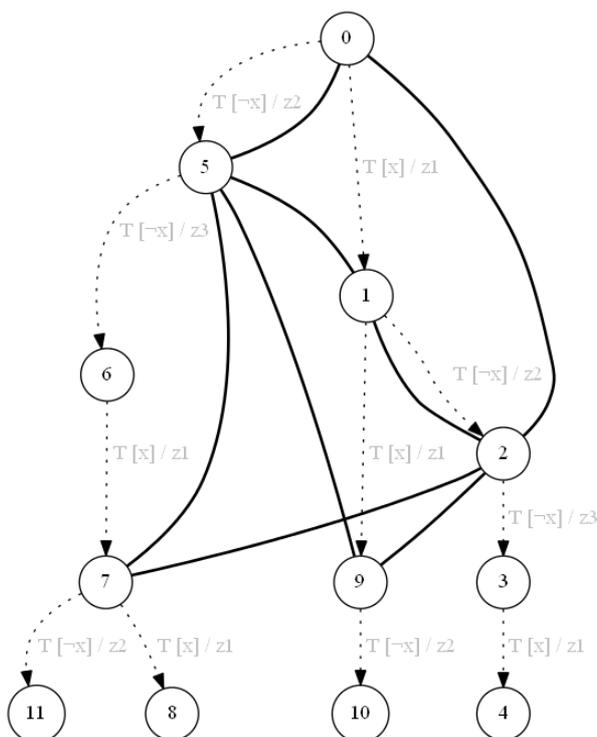


Рис. 2. Пример графа совместимости дерева сценариев

Опишем третий и четвертый этапы предлагаемого алгоритма.

Построение набора ограничений на целочисленные переменные

Третьим этапом работы алгоритма построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы программы является построение набора ограничений на целочисленные переменные, задающего требования к «раскраске» графа совместимости и выражающего непротиворечивость и полноту системы переходов искомого автомата. Напомним, что на вход алгоритму подается число C состояний результирующего автомата.

Для построения набора ограничений создадим и будем использовать следующие целочисленные переменные.

1. Переменные x_v соответствуют цвету каждой вершины дерева сценариев v и принимают значения от 0 до $C - 1$. Напомним, что вершины одного цвета будут объединены в одно состояние результирующего автомата.
2. Переменные $y_{i,e,f}$ являются вспомогательными для построения ограничений, задающих непротиворечивость (детерминированность) искомого управляющего автомата, и хранят в себе информацию о его переходах. Вспомогательными данные

переменные являются, так как наличие в результирующем автомате переходов не определяется исходя из их значений. Используются переменные для каждого состояния i результирующего автомата (значение от 0 до $C - 1$), каждого события e , каждого условия перехода f из множества F_e , встречающегося в сценариях. Каждая переменная принимает значение от 0 до $C - 1$ и соответствует номеру состояния, в которое ведет переход искомого автомата из состояния i по событию e и условию перехода f .

Составим набор ограничений на указанные переменные, задающий требования удовлетворения заданным сценариям работы и непротиворечивости искомого автомата.

1. $x_0 = 0$ – ограничение, задающее соответствие корня дерева сценариев начальному состоянию искомого автомата. В настоящем методе начальным состоянием автомата считается состояние с номером 0.
2. $x_v \neq x_u$ (для каждой несовместимой пары вершин дерева сценариев u и v , т.е. соединенных ребром в графе совместимости) – ограничения, задающие непротиворечивость искомого автомата. Они гарантируют отсутствие различающих последовательностей, ведущих из одного состояния автомата. Число ограничений данного вида равно числу ребер графа совместимости, т.е. в худшем случае таких ограничений может быть $O(n^2)$, где n – число вершин дерева сценариев.
3. $(x_v = i) \Rightarrow (x_u = y_{i,e,f})$ (для каждого цвета i и каждого ребра дерева сценариев vi , помеченного событием e и условием перехода f) – ограничения, задающие детерминированность искомого автомата. А именно, если вершине v присвоен цвет i , то цвет вершины u совпадает со значением переменной $y_{i,e,f}$, хранящей номер состояния автомата, в которое ведет переход из состояния i , помеченный событием e и условием перехода f . Число данных ограничений равно $C(n - 1)$.

Приведенные ограничения трех типов составляют набор, выражающий необходимые и достаточные условия удовлетворения поставленной задачи управляющим автоматом.

Использование пакета Choco для решения задачи удовлетворения ограничений и построение искомого автомата

Для нахождения выполняющего набора построенного набора ограничений используется язык программирования Java и библиотека Choco [9]. Данная библиотека не имеет аналогов и удобна в использовании. Кроме того, производительность методов решения задачи удовлетворения ограничений данной библиотеки достаточно высока.

Если библиотека не обнаружила выполняющий набор значений переменных, то будем считать, что по данному набору сценариев невозможно построить управляющий автомат с заданным числом состояний. Если же библиотека обнаружила выполняющий набор, то построим искомый автомат. Для этого на основании полученных значений переменных x_v определим цвет каждой вершины дерева сценариев.

После этого объединим все вершины одного цвета в одно состояние автомата, а начальным состоянием положим состояние, соответствующее цвету корня дерева сценариев. Множество исходящих из состояния переходов построим из объединения множеств ребер, исходящих из вершин заданного цвета. Отметим, что не исключено существование нескольких автоматов, удовлетворяющих сценариям множества Sc . На рис. 1 приведен построенный предложенным алгоритмом управляющий автомат. Данный автомат удовлетворяет сценариям работы, задающим дерево сценариев, приведенное на рис. 2.

Экспериментальное исследование

Экспериментальное исследование проводилось на задаче построения автомата управления часами с будильником [1]. Было задано 38 сценариев, аналогичных тестам, приведенным в работе [7]. На основе этих сценариев был построен автомат, изоморфный автомату, построенному вручную в работе [1]. Его построение заняло менее секунды на персональном компьютере с процессором Intel Core 2 Quad Q9400, что позволяет говорить о достаточно высокой производительности разработанного метода.

Заключение

В настоящей работе предложен метод построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы. Этот метод основан на сведении указанной задачи к задаче о выполнимости булевой формулы. Работоспособность метода проверена на задаче построения автомата управления часами с будильником. На этой задаче соответствующий управляющий автомат был построен корректно, а время работы алгоритма составляло меньше секунды на персональном компьютере с процессором Intel Core 2 Quad Q9400.

Исследование выполнено в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы».

Литература

1. Поликарпова Н.И., Шалыто А.А., Автоматное программирование. – СПб: Питер, 2011. – 176 с.
2. Angeline P.J., Pollack J. Evolutionary Module Acquisition //Proceedings of the Second Annual Conference on Evolutionary Programming. – 1993. – P. 154–163.
3. Jefferson D., Collins R., Cooper C., Dyer M., Flowers M., Korf R., Taylor C., Wang A. The Genesys System. 1992 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.cs.ucla.edu/~dyer/Papers/AlifeTracker/Alife91Jefferson.html>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 25.11.2011).
4. Chambers L. Practical Handbook of Genetic Algorithms. Complex Coding Systems. Volume III. – Boca Raton, FL: CRC Press, 1999. – 592 p.
5. Царев Ф.Н., Шалыто А.А. Гибридное управление беспилотными летательными объектами на основе автоматного программирования // 1-я Российская мультikonференция по проблемам управления. Сборник докладов четвертой научной конференции «Управление и информационные технологии». – СПб, ГЭТИ «ЛЭТИ», 2006. – С. 138–144.
6. Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М. Генетические алгоритмы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 368 с.
7. Царев Ф.Н. Метод построения управляющих конечных автоматов на основе тестовых примеров с помощью генетического программирования // Информационно-управляющие системы. – 2010. – № 5. – С. 31–36.
8. Ульяновцев В.И., Царев Ф.Н. Применение методов решения задачи о выполнимости булевой формулы для построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2012. – №1 (77). – С. 96–100.
9. CHOCO java library for constraint satisfaction problems (CSP) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.emn.fr/z-info/choco-solver/> свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.12.2012).

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ЛЕКСИКО-СЕМАНТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ОБУЧЕНИЯ ПОНЯТИЯМ

И.В. Филатов

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.С. Потапов

Работа посвящена созданию автоматизированной лексико-семантической системы обучения понятиям. Создание такой системы способствует автоматическому лексико-семантическому обучению компьютерной системы классам объектов и их автоматическому распознаванию и состоит из 4 этапов. Работа является новым взглядом на решение проблемы автоматической классификации данных на основе подхода обучения системы с помощью информации, воспринимаемой из внешнего мира. Рассматривается поэтапный алгоритм системы с описанием промежуточных стадий, описаны результаты экспериментальной разработки первого и второго этапов.

Ключевые слова: обучение, классификация, распознавание образов.

Вводная часть

Главным вопросом, поднятым в данной работе, являлся способ создания автоматизированной компьютерной системы искусственного интеллекта. Данная разработка состояла из нескольких этапов и рассматривалась как дипломная выпускная работа; содержимое ее охватывало рассмотрение каждого из этапов и экспериментальные данные первого и второго этапов. Идея разработки данной системы была получена на анализе большого количества разнообразных статей конференций ICCV, CVPR, ECCV по компьютерному зрению. Одним из стимулов по созданию системы автоматизированного лексико-семантического строения является система CELL (Cross-Channel Early Lexical Learning), разработанная группой Массачусетского технологического института под началом Деба Роя [1].

Система CELL использовалась для изучения процесса обучения ребенком, начиная с рождения, информации о внешнем мире, способности накопления знаний. Как маленький ребенок, не обладающий априори никакой информацией об образе предметов, об их параметрах, начинает различать их, как он обучается тому, что изначально не знает, без какой-либо базы изначальных знаний?

Этот вопрос и стал причиной появления у автора данной работы идеи о применении подхода, аналогичного обучению ребенка, к созданию компьютерной автоматизированной системы понятий. Обучение ребенка, в первом приближении, можно охарактеризовать как запоминание им части информации аудиального потока (речь) и автоматическом выделении в нем наиболее значимой (для ребенка – это последовательность слов с наибольшей частотой встречаемости), математически можно охарактеризовать данную способность как поиск максимума взаимной информации (рис. 1).

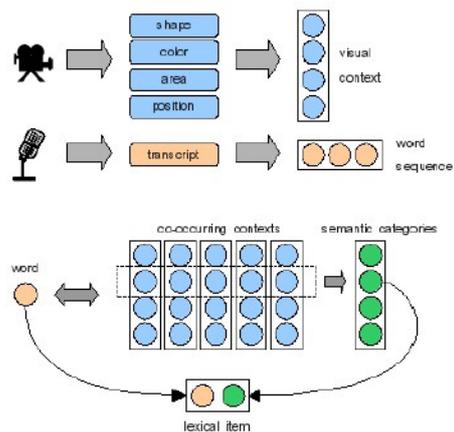


Рис. 1. Схема формирования семантических конструкций в системе CELL

Обладая такими выводами можно прийти к идее применения автоматизированного обучения в работе автономных роботов. Зная данные о двух информационных канала – аудиальных и визуальных – возможно создать лексико-семантический язык понимания изображений.

Основная идея проекта

Если данные двух информационных каналов сделать взаимосвязанными, то имея информацию о визуальном представлении объекта, становится возможным получить данные о текстовом представлении и наоборот (например: добившись взаимосвязанности каналов, представив изображение машины и имея в текстовом представлении лексему «машина», компьютерная система получает возможность построения множества взаимоднозначных соответствий). Задачи проекта сводятся к следующим этапам.

1. Получение набора значимых лексем из аудиального потока (в данной работе используется упрощение в виде замены аудиального канала (микрофонная речь) текстовым (консольный ввод текста без символов разделителей и знаков препинания)).
2. Формирование вектора признаков из изображения (визуальный канал сводится к последовательности видеокадров).
3. Создание взаимосвязанности двух потоков информации.

Описание способа реализации лексико-семантической системы

Каждый из представленных выше этапов является отдельной большой задачей, зависящей от множества критериев. Рассмотрим более подробно каждый из них.

Получение набора значимых лексем из аудиального (текстового потока). Так как наиболее значимые в тексте слова обычно обладают наибольшей частотой встречаемости, а текстовый поток представляется в виде текстовой последовательности без символов разделителей и знаков пунктуации, задача сводится к поиску последовательностей максимальной длины с наибольшей частотой встречаемости.

Анализ визуального потока. Задача анализа визуального потока является более сложной из-за сильной природной изменчивости изображений и их параметров. Первым этапом ставится сегментация изображений видеопоследовательности (разделение переднего (движущиеся объекты) и заднего плана, выделение формы объектов и их сегментация). В дальнейшем производится интерпретация

сегментированного изображения с получением вектора признаков, получение ключевых точек сегментированного изображения, а затем и их дескрипторов на основе детекторов особых точек (SIFT, SURF). Также возможно использование других характеристик изображения (построение гистограмм яркости второго порядка, анализ освещения сцены, гомография точек сцены) для более точной оценки. Следующим этапом осуществляется кластеризация изображения по полученному вектору параметров и отнесение к одному из классов.

Построение взаимосвязанности лексем аудиального (текстового) потока с вектором признаков изображения. Как было указано выше, по построенному вектору параметров изображения осуществляется кластеризация в виде разделения изображений на классы. Однако при построении только вектора признаков изображения и последующей его кластеризации два изображения объекта одного и того же класса или просто два изображения одного и того же объекта могут обладать сильно различающимися векторами параметров. Но, так как, помимо информации, содержащейся в визуальном канале, существует информация в аудиальном (текстовом) канале, то при использовании в качестве критерия проверки данных из текстового канала возможность ошибочной кластеризации пропадает.

Общее описание построения автоматизированной системы лексико-семантического обучения понятиям. На первом этапе осуществляется анализ текстового потока с извлечением значимой информации. Далее визуальный канал (видеокамера) обрабатывается: получение видеокadra, создание вектора признаков, кластеризация изображения. Этап кластеризации основывается на следующем принципе: создание нового класса происходит в случае несовпадения вектора признаков полученного изображения ни с одним из существующих классов (в качестве оценки расстояний между классами в пространстве признаков может быть использована евклидова метрика среднеквадратичных расстояний). Следующим этапом осуществляется взаимосвязь данных, полученных из текстового и аудиального каналов, и проверка значимых лексем, существующих и нового классов. В случае их совпадения (как мера могут быть использованы максимум взаимной информации, корреляция) происходит объединение совпадающих классов в один.

Пример работы системы: получено изображение какого-либо предмета, например, шариковая ручка и существует текстовое описание: «посмотритеручкакакаякрасиваяшариковаяручка». Изображение ручки сегментируется, для него рассчитывается вектор признаков. Создается новый класс. На видеоизображении появляется другой предмет или та же самая ручка, в случае другого ракурса того же самого предмета будет создан новый класс, но при оценке текстового потока, два класса будут объединены в один – ручка.

В ходе создания системы предполагается использование следующих подходов и методов.

- Алгоритмы поиска максимума наибольшей встречающейся последовательности.
- Выделение объектов переднего плана на основе методов оптического потока, истории кадров.
- Построение вектора признаков изображения на основе одного из детекторов ключевых точек: SIFT, SURF, GIST, детектор Харриса.
- Кластеризация изображения: метод k -средних, мера расстояния на основе евклидовой метрики.
- Поиск максимума взаимной информации для взаимосвязи текстового и визуального каналов.

Результаты экспериментальных данных первого этапа. Идея получения лексем для формирования впоследствии пар «изображение-лексема» основана на

частотной характеристике повторяемости важных слов в предложениях. Маленький ребенок не в состоянии воспринимать и понимать большое количество слов, но он понимает смысл предложений за счет запоминания или понимания части текста, набора слов. Таким образом, если рассмотреть максимально повторяющиеся слова в предложениях и сопоставить их с представленным в данный момент изображением, то на большой базе лексем можно построить семантический язык интерпретации изображений.

Выделение лексем сводится к поиску максимальных повторяющихся последовательностей из текстового потока.

Рассмотрим работу программы. Вначале создаются два вектора строк, назовем их $s1$ и $s2$. Вектор строк $s1$ – лексемы с наибольшим значением ключа (с наибольшей частотой встречаемости), $s2$ – вектор лексем максимальных повторяющихся фрагментов текста. Произведем формирование векторов на произвольной текстовой последовательности, например: «abcaabatarabatasabatar». Для упрощения расчетов будем формировать лексемы размерности от 2 до 8, частота встречаемости которых больше или равна 2 (порог по количеству повторений).

По последовательности строк получен ассоциативный массив пар ключ-значение: map{(«ab», 4), («aba», 3), («abat», 2), («abata», 2), («ar», 2), («arab», 2), («at», 3), («ata», 3), («atar», 2), («ba», 3), («bat», 2), («bata», 2), («ca», 2), («ta», 3), («tar», 2)}.

Среднее значение равно 2,46. Проверка включений выполнена в виде функции сравнение двух строк (с перебором включений из различных положений в строке). Ниже представлен результат выполнения проверки включений:

```
ab aba 0
aba abata 0
abata at 1
abata ata 1
abata ba 1
abata bat 1
abata bata 1
abata ta 1
ar arab 0
atar tar 1
```

Если значение равно 1, то первая последовательность включает в себя вторую, если 0 – наоборот. После проверки включений и пороговой обработки, получены векторы строк $s1$ и $s2$.

$s1\{\text{«ab», «aba», «at», «ata», «ba», «ta»}\}; s2\{\text{«abata», «arab», «atar», «ca»}\}.$

При использовании исходных строк большей длины (100–1000 символов) изменение параметров функции (длины перебираемых последовательностей, пороги) могут быть заменены большим количеством ограничивающих правил, например: использование процента слов с максимальным по значению ключом для формирования $s1$.

Результаты экспериментальных данных второго этапа. Первым и наиболее важным этапом реализации системы сегментирования видеопотока является определение условий и критериев в ходе ее работы (например, динамичность или статичность камеры, важность изменения освещенности, доля устойчивости к шуму и т.д.). Важным на пути создания лексико-семантической системы искусственного интеллекта является сегментация объекта на изображении или на извлеченной последовательности кадров. Выбор правильного (наиболее подходящего) алгоритма для решения такой задачи является существенным. Для правильной оценки, какой из алгоритмов сегментации будет являться удовлетворительным для нужд программы,

становится важным определить все необходимые для работы критерии и условия: наличие изменчивости освещения, стационарность или динамичность камеры, допустимая сложность алгоритма для решения вышестоящей задачи, шумовые и световые помехи (блики, размытия).

В данной работе алгоритмом должны учитываться: динамичность камеры, нелокальность изменения яркости пикселей, сложность алгоритма не должна быть высокой, так как система должна работать в режиме реального времени.

Таким образом, все алгоритмы, основанные на статичности сцены, для нашей задачи не подходят в полной мере: различные модели обучения фона, среднее значение яркости изображений на основе анализа последовательности кадров. Использование статичных сцен не позволяет динамически менять модель фона, и предсказать ее модель на основе динамики становится сложным, так как в данном случае модель фона нельзя описать детерминировано.

В первом приближении, задача оценки оптического потока сводится к задаче оценки пикселей двух последующих кадров видеопоследовательности. Основными критериями при оценке являются близость пикселей в пространстве координат и пространстве цветов (т.е. близко расположенные пиксели одного и того же, или похожих цветов являются предметом оценки значений изменяющегося векторного поля). Первое из предположений можно обозначить как малое движение, а второе – константностью цвета.

Рассмотрим две функции двух параметров $K(x,y)$ и $L(x,y)$, где $K(x,y)$ – функция значений яркости координат пикселей изображения предыдущего кадра, а $L(x,y)$ – для последующего. Тогда малое смещение координат можно описать в виде добавочных значений u и v . В окрестности точки такое поле можно разложить в ряд Тейлора:

$$L(x + u, y + v) = L(x, y) + \frac{\partial L}{\partial x} u + \frac{\partial L}{\partial y} v + \xi,$$

где ξ – частные производные более высоких порядков.

При использовании критерия малого движения можно приравнять ξ к нулю. Второй критерий константности значения яркости можно изобразить в виде:

$$L(x + u, y + v) - K(x, y) = 0$$

$$L_t + \nabla L \cdot [uv] = 0$$

$$L_t + \nabla L \cdot \left[\frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial y}{\partial t} \right] = 0,$$

где L_t – частная производная по времени; $\nabla L \left[\frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial y}{\partial t} \right]$ – значение градиента яркости пикселей.

Так как алгоритмы, основанные на оптическом потоке [2], являются в большей степени алгоритмически трудными, то было выдвинуто предположение о реализации нескольких алгоритмов на основе различных методов: с использованием оптического потока, с использованием разностных изображений (рис. 2–5).

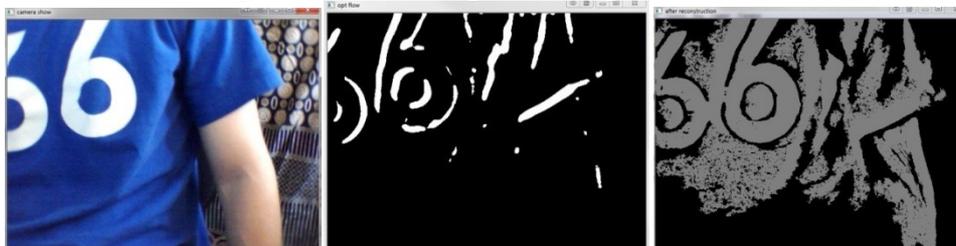


Рис. 2. Результат оценки оптического потока с ручным порогом

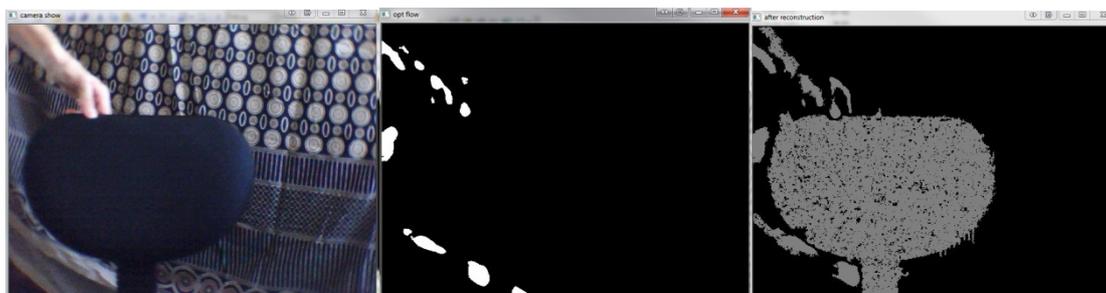


Рис. 3. Результат оценки оптического потока с автоматическим порогом

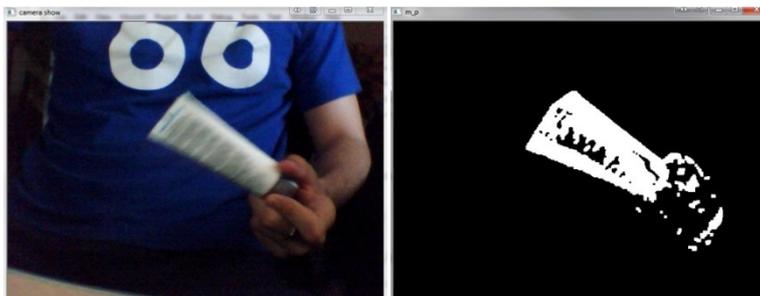


Рис. 4. Результат метода истории кадров

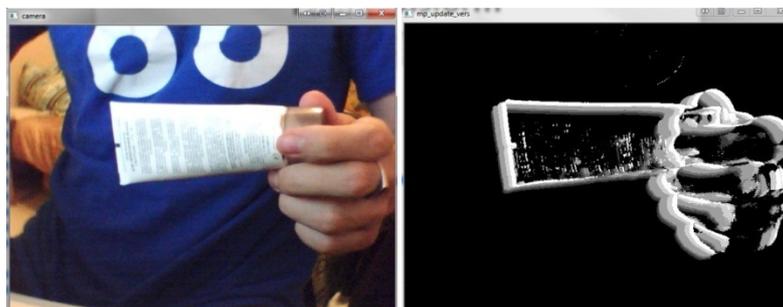


Рис. 5. Улучшенная модель алгоритма истории кадров

Основные планируемые результаты

Каждый из установленных этапов разработки является отдельной задачей и качества решения каждого из этапов взаимосвязаны. В ходе разработки основной упор сделан на поиск способа сегментации изображений [3], значимой информации текстового потока и кластеризации на основе ключевых точек, являющийся в наибольшей степени устойчивым к изменению освещения, изменению параметров сцены, шуму. На конечном этапе планируется автоматическая способность робота, обладающего видеокамерой, обучаться классам движущихся объектов.

Заключение

Важными аспектами данной разработки явились новизна предложенного решения и автоматическое обучение системы без заложенной априори базы данных (знаний). Области применения данной разработки обширны: любые автоматизированные системы (роботы), различные системы контроля, большая часть систем, в которых присутствует обмен информации с пользователем; идея создания компьютерной системы, которая может автоматически обучаться (например, по видеороликам фильмов) или по информации, поступающей с видеокамеры, являющейся многообещающей и актуальной в широком спектре повседневных задач.

Литература

1. Roy D., Petland A. Learning words from sights and sounds: a computational model // Cognitive Science. – 2002. – V. 26. – P. 113–146.
2. Lucas B.D., Kanade T. An iterative image registration technique with an application to stereo vision // Proceedings of Imaging Understanding Workshop. – 1981. – P. 121–130.
3. Лукьяница А.А., Шишкин А.Г.. Цифровая обработка видеоизображений. – М.: Ай-Эс-Эс-Пресс, 2009. – 518 с.

УДК 53.084.852

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА КОНЦЕПЦИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ НАНОАНТЕННЫ

Д.С. Филонов, А.Е. Краснок, А.П. Слобожанюк, П.В. Капитанова, Ю.С. Кившарь
Научный руководитель – д.ф.-м.н., гл.н.с. П.А. Белов

Представлены результаты экспериментальной верификации диэлектрической Яги–Уда наноантенны в микроволновой области частот и сравнение полученных результатов с численным моделированием. Показано хорошее соответствие между экспериментальными данными и данными, полученными численным путем. Продемонстрирована возможность получения узкой диаграммы направленности антенны Яги–Уда, изготовленной из диэлектрических частиц в микроволновом диапазоне длин волн. В силу обратной пропорциональной зависимости между частотами Ми-резонансов и радиусом диэлектрической частицы, авторы считают, что узкая диаграмма направленности может быть получена так же и в оптической области частот.

Оптические антенны (наноантенны) – это новое и быстро развивающееся направление в области современной оптики. Важность этого направления продиктована, в основном, проблемами нанофотоники. Характерные размеры элементов нанофотоники меньше или порядка длины волны рабочего излучения, поэтому встает вопрос о связи их с оптическими линиями передачи информации и между собой. В настоящее время предлагается решить эти проблемы, используя бесконтактный метод связи при помощи наноантенн.

Наноантенны, в широком смысле, это устройства, которые преобразуют свободно распространяющееся оптическое излучение в поле, сильно локализованное в некоторой области, и наоборот [1–20]. При этом задачи нанофотоники предъявляют к наноантеннам требования узости диаграммы направленности и малости диссипативных потерь. Первое требование обусловлено желанием добиться плотной компоновки элементов нанофотоники на едином кристалле. Второе требование определяет срок службы нанофотонного устройства и узость допустимого интервала изменения его рабочего режима в течение времени. Этим предъявляемым требованиям удовлетворяет, например, наноантенна типа Яги–Уда [5, 6, 9, 11, 12, 14, 16, 18, 20].

На данный момент в мировой литературе представлены два типа наноантенн Яги–Уда, а именно плазмонные и диэлектрические. Первый, плазмонный, тип наноантенн Яги–Уда [5, 6, 9, 11, 12, 14, 16, 18] выполняется в виде системы металлических наночастиц. Однако у таких наноантенн имеются недостатки. А именно, большой уровень диссипации энергии, который существенно растет с уменьшением расстояния между металлическими наночастицами. К недостаткам таких антенн можно отнести также невозможность создания металлической наноантенны на частотах выше плазмонного резонанса и чисто технологические ограничения, вызванные малым набором материалов, которые можно использовать в качестве металлических сфер. По сути, к таким материалам относятся благородные металлы (золото и серебро), а также, в некоторых случаях, алюминий.

В то же время, в литературе практически отсутствуют работы по диэлектрическим наноантеннам. Это направление, которое только начинает развиваться и набирать силу, представлено в работах [15, 20–22]. В частности, недавно, группой авторов был предложен совершенно новый класс наноантенн – диэлектрическая Яги–Уда наноантенна [20]. Работа таких наноантенн основана на электрическом и магнитном резонансах Ми-диэлектрических наночастиц с большой диэлектрической проницаемостью. Как показано в работе [23], существует область длин волн, в которой такие частицы обладают электрическим и магнитным откликом одновременно. В частности, для частиц сферической формы, выражения для электрической и магнитной поляризуемостей в дипольном приближении, имеют вид:

$$\alpha^e = \frac{6\pi i}{k^3} a_1, \quad \alpha^m = \frac{6\pi i}{k^3} b_1, \quad (1)$$

где k – волновое число в свободном пространстве; i – мнимая единица; a_1, b_1 – соответственно электрическая и магнитная амплитуда теории рассеяния Ми.

В наших работах материалом диэлектрических наночастиц является кремний (Si), который обладает реальной частью диэлектрической проницаемости, равной $\epsilon = 16$, в широком диапазоне оптических длин волн. Это дает возможность реализации на одной частице элемента Гюйгенса, т.е. рассеивателя, диаграммой направленности которого является кардиоида. Благодаря таким свойствам диэлектрических наночастиц появляется возможность конструирования наноантенн, например, наноантенн Яги–Уда. При этом свойства элемента Гюйгенса обеспечивает достаточно узкую диаграмму направленности всей наноантенны. Преимуществом таких наноантенн перед плазмонными наноантеннами также является существенно более широкий спектр материалов и более низкие диссипативные потери. Стоит отметить возможность близкого расположения наночастицы и квантового источника без сильного увеличения диссипативных потерь.

Пример геометрии такой диэлектрической наноантенны Яги–Уда приведен на рис. 1. Конструкцию наноантенны составляют четыре диэлектрические наночастицы и источник излучения (диполь). В оптической области частот таким источником может быть квантовая точка, молекула и пр. Частица большого размера (sp.1) выполняет роль рефлектора. Эта частица обеспечивает деструктивную интерференцию, необходимую для погашения задних лепестков диаграммы направленности. Частицы меньшего размера (sp. 2–4) выполняют роль директоров. От количества директоров зависят величины коэффициента направленности и угловой плотности мощности, которая излучается в пределах главного лепестка диаграммы направленности. Чем больше количество директоров, тем больший коэффициент направленности антенны можно получить соответствующей ее настройкой.

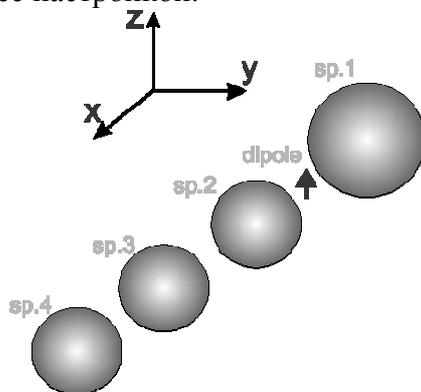


Рис. 1. Геометрия диэлектрической наноантенны Яги–Уда

Однако встает вопрос экспериментальной верификации численного моделирования и теоретических выводов. Отвлекаясь от вопросов, связанных с чисто

квантовыми свойствами источника, такую верификацию можно осуществить, масштабируя диэлектрическую наноантенну Яги–Уда в область микроволн. Существенным моментом здесь является обратно пропорциональная зависимость между частотами Ми-резонансов и радиусом диэлектрической частицы, при условии постоянства диэлектрической проницаемости.

В этой работе представлены результаты экспериментальной верификации диэлектрической Яги–Уда наноантенны в микроволновой области излучения, и сравнение полученных результатов с численным моделированием. В качестве геометрии диэлектрической наноантенны, которая была подвергнута масштабированию, и выбрана геометрия, соответствующая рис. 1. При этом в качестве источника был использован полуволновой вибратор. В качестве изучаемых характеристик диэлектрической антенны были выбраны двумерные коэффициенты направленности и диаграммы направленности (рис. 2).

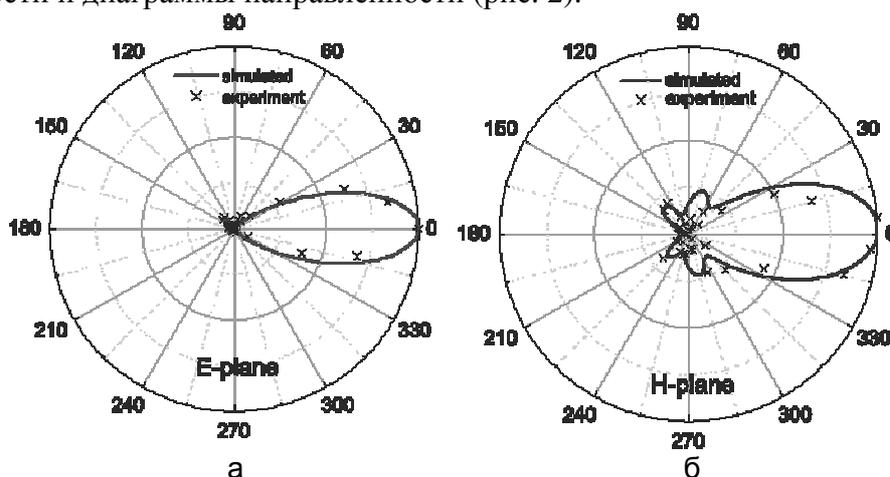


Рис. 2. Двумерная направленность излучения в E (а) и H (б) плоскостях, для частоты 10,7 ГГц. Сплошная линия соответствует численному расчету, а кресты соответствуют экспериментальным данным

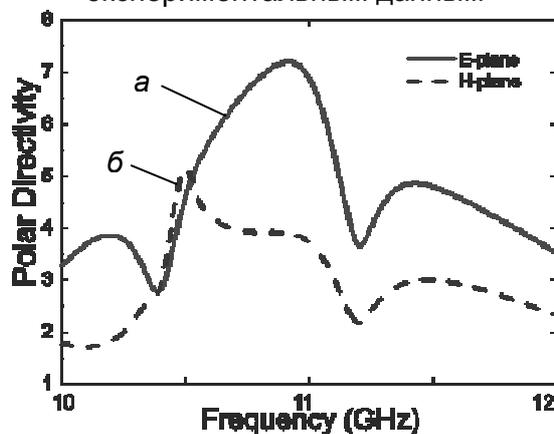


Рис. 3. Коэффициент направленности в плоскости соответственно для E и H плоскостей, полученные численно (а) и экспериментально (б). Точки на (б) соответствуют экспериментальным данным, сплошные линии на этом графике являются их плавной огибающей

Стандартное определение коэффициента направленности дается выражением:

$$D = \frac{4\pi \text{Max}[p(\theta, \varphi)]}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi p(\theta, \varphi) d\Omega}, \quad (2)$$

где двойной интеграл в знаменателе этого отношения является полной мощностью P_{rad} , которую излучает система в дальнюю зону; $\text{Max}[p(\theta, \varphi)]$ – мощность в направлении главного лепестка; (θ, φ) – стандартные координаты в сферической системе координат;

$d\Omega$ – элемент телесного угла. Это выражение нормировано на 4π , так чтобы коэффициент направленности изотропного источника равнялся единице, а диполя малого, по сравнению с длиной волны, – 1,5. Однако непосредственное измерение этой величины на опыте затруднительно, в виду того, что не всегда удастся экспериментально определить полную излученную мощность P_{rad} . В связи с этим в качестве величины, отображающей направленность антенны на различных частотах, воспользуемся полярным коэффициентом направленности. Эта величина, в отличие от обычного коэффициента направленности зависит от выбора плоскости, в которой ведется измерение излучаемой мощности. Это, например, могут быть плоскости, в которых лежат вектора **E** или **H**, т.е. соответственно плоскости *E* и *H*. Для выбранной нами ориентации осей координат, показанной на рис. 3, выражения коэффициента направленности в плоскости соответственно для *E* и *H* плоскостей можно записать в следующем виде:

$$D_E = \frac{2\pi \text{Max}[p(\theta)]}{\int_0^{2\pi} p(\theta) d\theta} \Big|_{\varphi=0}, D_H = \frac{2\pi \text{Max}[p(\varphi)]}{\int_0^{2\pi} p(\varphi) d\varphi} \Big|_{\theta=\pi/2}. \quad (3)$$

Здесь интегрирование в знаменателе идет только по одной из координат, при фиксированной второй. Поэтому оба выражения помножены на коэффициент равный 2π .

Для численного моделирования эксперимента использовался коммерческий программный продукт CST Microwave Studio. В качестве материала диэлектрических сфер выбран MgO-TiO_2 . Это вещество является СВЧ керамикой, диэлектрическая проницаемость которой, в исследуемой нами области частот, равна 16, т.е. как у кремния в оптической области. Было выбрано оптимальное, с точки зрения 2D-диаграммы направленности и коэффициента направленности, расположение элементов антенны между собой и относительно вибратора. Радиус рефлектора выбран равным $R_r = 5$ мм. Частоты электрического и магнитного Ми-резонансов у частицы такого размера, изготовленной из материала с $\epsilon = 16$ (MgO-TiO_2), находятся соответственно на частотах 10,2 и 7 ГГц. Все директоры были выбраны одинакового радиуса $R_r = 4$ мм. Частоты электрического и магнитного резонансов у частицы такого размера находятся соответственно на частотах 12,5 и 9 ГГц. Расстояния между поверхностями директоров, а также между первым директором и центром вибратора одинаковые, равные 1,5 мм. Расстояние между поверхностью рефлектора и центром вибратора равно 1,1 мм. Вибратор представляет собой два медных цилиндра, разделенных небольшим зазором. Полная длина вибратора – $L_v = 19,8$ мм, а его диаметр $D_v = 19,8$ мм.

Диаграммы направленности, полученные численно, приведены на рис. 2, а, б, (сплошная линия), для частоты 10,7 ГГц. Для выяснения зависимости направленных характеристик диэлектрической антенны Яги–Уда для различных частот излучения вибратора численно исследован полярный коэффициент направленности. Результаты приведены на рис. 3. Из этих данных следует, что для диэлектрической антенны Яги–Уда, выбранной нами геометрии, можно получить хорошую диаграмму направленности.

На рис. 4, а, представлена фотография изучаемой нами экспериментально диэлектрической Яги–Уда наноантенны. Для фиксации системы изготовлено два тонких (толщиной намного меньше радиуса сферы), но достаточно жестких трафарета, между которыми зажимались диэлектрические частицы и питающий антенну вибратор. Для крепежа трафаретов между собой, а также всей конструкции в азимутально-поворотном устройстве (рис. 4, б) был использован материал – пенопласт, который имеет диэлектрическую проницаемость близкую к единице в микроволновой области частот. Описанная конструкция вибратора обеспечила уровень S_{11} на рабочих частотах, не хуже – 20 dB. Вся конструкция помещалась в безэховой камере. Измерения

диаграммы направленности и полярного коэффициента направленности велись в дальней зоне (≈ 3 м) антенны.

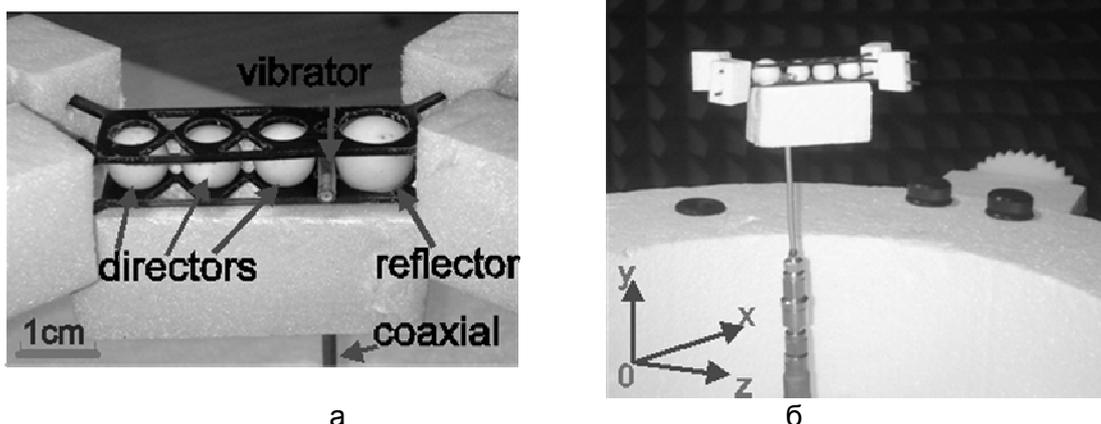


Рис. 4. Фото диэлектрической антенны Яги–Уда. На рисунке изображена антенна вместе со своими крепежными элементами (а) и расположение всей конструкции в поворотном столе (б). Большая частица является рефлектором (а) малого – директором. Вставкой на (б) изображена система координат. Ось z этой системы направлена вдоль оси вибратора, ось y – вдоль оси антенны

На рис. 2, а, б, приведены диаграммы направленности антенны в E и H плоскостях соответственно полученные экспериментально для частоты 10,7 ГГц. Из этих рисунков видно, что экспериментальные данные хорошо (в пределах 10%) согласуются с численным расчетом. Особенно ярко видно это на диаграмме направленности в E плоскости. Некоторые отличия экспериментальных данных от численных обусловлены присутствием необходимых крепежных элементов.

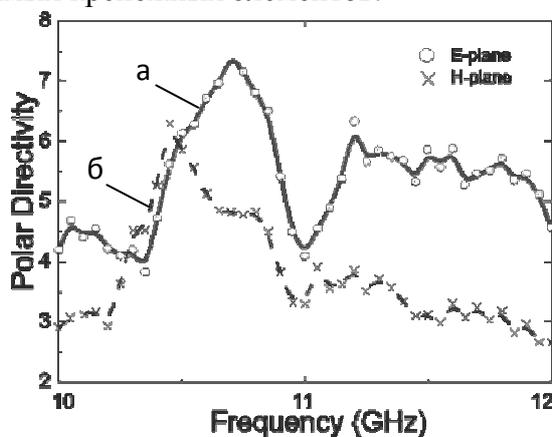


Рис. 5. Полярный коэффициент направленности соответственно для E и H плоскостей полученный численно (а) и экспериментально (б). Точки на (б) соответствуют экспериментальным данным, сплошные линии на этом графике являются их плавной огибающей

Для экспериментального исследования полярного коэффициента направленности в диапазоне от 10 до 12 ГГц, на разных частотах измеряли мощности, излучаемые системой в E и H плоскостях. Затем значения полярного коэффициента направленности для каждой из выбранных частот определялись по формулам (3). Результаты этих измерений приведены на рис. 5. Сравнивая результаты, полученные численно (рис. 3) и экспериментально (рис. 5) можно убедиться в их хорошем соответствии. Небольшая трансляция (примерно 2%) экспериментальных данных, как целого, в область меньших частот объясняется наличием крепежных элементов, которые отсутствовали при численном моделировании.

Итак, в этой работе проведено численное исследование и экспериментальная верификация диэлектрической Яги–Уда nanoантенны в микроволновой области излучения. Результаты эксперимента находятся в хорошем согласии с численным моделированием. Продемонстрирована возможность получения узкой диаграммы направленности диэлектрической Яги–Уда nanoантенны в микроволновом диапазоне длин волн. В силу обратно пропорциональной зависимости между частотами Ми-резонансов и радиусом диэлектрической частицы, авторы считают, что узкая диаграмма направленности может быть получена также и в оптической области частот.

Авторы выражают благодарность К.Р. Симовскому, А.Е. Мирошниченко и А.Н.Поддубному за конструктивное обсуждение. Эта работа была поддержана Министерством образования и науки (Россия), Австралийским исследовательским советом (Австралия), фондом «Династия» (Россия), а EPSRC (Великобритания).

Литература

1. Li J., Salandrino A., Engheta N. Shaping light beams in the nanometer scale: A Yagi–Uda nanoantenna in the optical domain // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 245403.
2. Novotny L. Nano-optics: optical antennas tuned to pitch // *Nature.* – 2008. – V. 455. – № 7215. – P. 887.
3. Taminiau T.H., Stefani F.D., van Hulst N.F. Enhanced directional excitation and emission of single emitters by a nano-optical yagi-uda antenna // *Opt. Express.* – 2008. – V. 16. – P. 10858–10866.
4. Bharadwaj P., Deutsch B., Novotny L. Optical antennas // *Adv. Opt. Photon.* – 2009. – V. 1. – № 3. – P. 438–483.
5. Pellegrini G., Mattei G., Mazzoldi P. Light Extraction with Dielectric Nanoantenna Arrays // *ACS Nano.* – 2009. – V. 3. – P. 2715–2721.
6. Pakizeh T., Kall M. Unidirectional Ultracompact Optical Nanoantennas // *Nano Lett.* – 2009. – V. 9. – P. 2343–2349.
7. Koenderink A.F. Plasmon nanoparticle array waveguides for single photon and single plasmon sources // *Nano Lett.* – 2009. – V. 9. – P. 4228–4233.
8. Li J., Salandrino A., Engheta N. Optical Spectrometer at the nanoscale using optical Yagi–Uda nanoantennas // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 79. – P. 195104.
9. Novotny L., Hulst Van N.F. Antennas for light // *Nat. Photonics.* – 2011. – V. 5. – P. 83–90.
10. Devilez A., Stout B., Bonod N. Strong Electromagnetic Connement near Dielectric Microspheres to Enhance // *ACS Nano.* – 2010. – V. 4. – P. 3390–3396.
11. Curto A.G., Volpe G., Taminiau T.H., Kreuzer M.P., Quidant R., Hulst Van N.F. Unidirectional emission of a quantum dot coupled to a nanoantenna // *Science.* – 2010. – V. 329. – № 5994. – P. 930–933.
12. Bonod N., Devilez A., Rolly B., Bidault S., Stout B. Ultracompact and unidirectional metallic antennas // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82. – № 115429. – P. 115429–115435.
13. Dregely D., Taubert R., Dorfmler J., Vogelgesang R., Kern K., Giessen H. 3D optical Yagi–Uda nanoantenna array // *Nat. Commun.* – 2011. – V. 2. – № 1. – P. 267.
14. Shegai T., Chen S., Miljkovic V.D., Zengin G., Johansson P., Kall M. A bimetallic nanoantenna for directional colour routing // *Nat. Commun.* – 2011. – V. 2. – P. 481–486.
15. Miroshnichenko A.E., Maksymov I.S., Davoyan A.R., Simovski C., Belov P., Kivshar Y.S. // *Status Solidi RRL.* – 2011. – V. 5. – № 11. – P. 347–349.
16. Coenen T., Vesseur E. J.R., Polman A., Koenderink A.F. Directional emission from plasmonic Yagi–Uda antennas probed by angle-resolved cathodoluminescence // *Nano Lett.* – 2011. – V. 11. – P. 3779–3784.

17. Dorfmuller J., Dregely D., Esslinger M., Khunsin W., Vogelgesang R., Kern K., H. Giessen. Near-field dynamics of optical Yagi-Uda nanoantennas // *Nano Lett.* – 2011. – V. 11. – № 7. – P. 2819–2824.
18. Blanchard R., Boriskina S.V., Genevet P., Kats M.A., Tetienne J.-P., Yu N., Scully M.O., Negro L.D., Capasso F. Multi-wavelength mid-infrared plasmonic antennas with nanoscale single focal point // *Opt. Express.* – 2011. – V. 19. – P. 22113.
19. Krasnok A.E., Miroshnichenko A.E., Belov P.A., Kivshar Yu.S. // *JETP Lett.* – 2011. – V. 94. – P. 593–598.
20. Stratton J. *Electromagnetic Theory.* – McGraw-Hill, NY, 1941.
21. Evlyukhin A.B., Reinhardt C., Seidel A., Lukyanchuk B.S., Chichkov B.N. Optical response features of Si-nanoparticle arrays // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82. – № 4. – P. 045404.
22. Palik E. *Handbook of Optical Constant of Solids.* – Academic, San Diego, 1985. – 439 p.
23. Kanareykin A., Gai W., Power J.G., Nenasheva E., Altmark A., in *Proceedings Kanareykin A.D., Gai W., Power J., Sheinman E., Altmark A.* // *AIP Conf. Proc. (AAC-2002).* New York, 2002. Vol. 647. P. 565{576. St. Petersburg, 1998. P. 57–58.

УДК 004.4'242

ПОСТРОЕНИЕ УПРАВЛЯЮЩИХ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ ПО ТЕСТАМ НА ОСНОВЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Ф.Н. Царев

В настоящей работе предлагается метод построения автоматов управления системами со сложным поведением на основе тестов с помощью генетического программирования. Приводится описание структуры особи алгоритма генетического программирования, описание операций мутации и скрещивания, а также описание генетического алгоритма. Описывается пример применения предлагаемого метода для построения автомата управления часами с будильником.

Ключевые слова: автоматное программирование, генетическое программирование, машинное обучение.

Введение

В последнее время для программирования систем со сложным поведением все шире применяется автоматное программирование, в рамках которого поведение программ описывается с помощью конечных детерминированных автоматов [1]. Для многих задач автоматы удается строить эвристически, однако существуют задачи, для которых такое построение затруднительно. К задачам этого класса относятся, например, задача «Умный муравей» [2–4], задача «Умный муравей–3» [5] и задача об управлении моделью беспилотного летательного аппарата [6]. Для построения автоматов в таких задачах можно применять генетические алгоритмы [7–9].

Традиционный метод построения автоматов с помощью генетических алгоритмов использует вычисление функции приспособленности на основе моделирования работы системы со сложным поведением в некоторой внешней среде. Главным недостатком этого метода является то, что при его применении функцию приспособленности необходимо «с нуля» реализовывать для каждой задачи. Кроме того, такой подход к вычислению функции приспособленности связан с большими затратами вычислительных ресурсов.

В настоящей работе предложен метод построения автоматов управления системами со сложным поведением на основе тестов с помощью генетического программирования. Этот метод не имеет указанных недостатков.

Постановка задачи

При применении парадигмы автоматного программирования для реализации сущности со сложным поведением выделяются система управления и объект управления. На начальном этапе проектирования программы выделяются события (e_1, e_2, \dots), входные переменные (x_1, x_2, \dots) и выходные воздействия (z_1, z_2, \dots). После этого проектирование программы может идти разными путями. Один из них состоит в написании сценария работы программы, по которому далее эвристически строится автомат. Пример построения автомата таким способом приведен в работе [10].

Другой подход, который практически не применяется для построения автоматных программ, но достаточно широко распространен при разработке традиционных программ, состоит в разработке на основе тестов (*test-driven development*) [11]. При применении этого метода процесс написания кода на языке программирования идет параллельно с написанием тестов для программы. При этом добавление функциональности в программу осуществляется только после того, как создан тест для проверки этой функциональности. Таким образом, функциональность программы описывается набором тестов для нее.

При применении автоматного программирования в качестве тестов для управляющего конечного автоматов естественно рассматривать пары последовательностей, одна из которых описывает события и входные переменные, поступающие на вход автомату, а вторая – выходные воздействия, которые должен вырабатывать автомат при обработке этих событий. Таким образом, задача построения управляющего конечного автомата становится похожей на задачу построения конечного преобразователя, для решения которой успешно применяются генетические алгоритмы.

Описание предлагаемого метода

Исходными данными для построения конечного автомата управления системой со сложным поведением являются:

- список событий;
- список входных переменных;
- список выходных воздействий;
- набор тестов *Tests*, каждый из которых содержит последовательность *Input[i]* событий, поступающих на вход конечному автомату, и соответствующую ей эталонную последовательность *Answer[i]* выходных воздействий.

Хромосома в алгоритме генетического программирования. Конечный автомат в алгоритме генетического программирования представляется в виде объекта, который содержит описания переходов для каждого из состояний и номер начального состояния. Для каждого из состояний хранится список переходов. Каждый переход описывается событием, при поступлении которого этот переход выполняется, и числом выходных воздействий, которые должны быть сгенерированы при выборе этого перехода.

Таким образом, в особи кодируется только «скелет» управляющего конечного автомата, а конкретные выходные воздействия, вырабатываемые на переходах,

определяются с помощью алгоритма расстановки пометок, который аналогичен предложенному в работе [12].

Алгоритм расстановки пометок. Опишем алгоритм расстановки пометок на переходах, применяемый в настоящей работе. Как было сказано выше, для каждого из перехода в особи генетического алгоритма записано, сколько выходных воздействий должно вырабатываться при его выборе. Подадим на вход конечному автомату последовательность событий, соответствующую одному из тестов, и будем наблюдать за тем, какие переходы выполняет автомат. Зная эти переходы и информацию о том, сколько выходных воздействий должно быть сгенерировано на каждом из переходов, можно определить, какие выходные воздействия должны вырабатываться на переходах, использовавшихся при обработке входной последовательности.

Для каждого перехода T и каждой последовательности выходных воздействий zs вычисляется величина $C[T][zs]$ – число раз, когда при обработке входной последовательности, соответствующей одному из тестов, на переходе T должны быть выработаны выходные воздействия, образующие последовательность zs . Далее каждый переход помечается той последовательностью zs_0 , для которой величина $C[T][zs_0]$ максимальна.

Операция мутации. При выполнении операции мутации с заданной вероятностью (по умолчанию, она равна 0,05) выполняется каждое из действий:

- изменение начального состояния;
- изменение описания каждого из переходов;
- удаление или добавление перехода для каждого из состояний.

После выполнения операции мутации в автомате может возникнуть ситуация, когда в автомате из одного состояния присутствуют два перехода по одному и тому же событию. Для устранения таких переходов применяется операция удаления дублирующихся переходов, описанная в следующем разделе.

Операция удаления дублирующихся переходов. Для удаления дублирующихся переходов для каждого состояния прорабатываются следующие операции: последовательно просматривается список переходов из этого состояния, и при этом запоминаются события, переходы по которым определены для этого состояния. Если очередной переход T происходит по событию, для которого в списке уже есть переход, то переход T удаляется из списка.

Операция скрещивания. Скрещивание описаний автоматов производится следующим образом. Обозначим как $P1$ и $P2$ «родительские» особи, а как $S1$ и $S2$ – особи-«потомки». Для начальных состояний $S1.is$ и $S2.is$ автоматов $S1$ и $S2$ будет верно одно из двух соотношений:

- $S1.is = P1.is$ и $S2.is = P2.is$;
- $S1.is = P2.is$ и $S2.is = P1.is$.

Опишем, как устроены переходы автоматов $S1$ и $S2$. Скрещивание описаний автоматов производится отдельно для каждого состояния. Обозначим список переходов из состояния номер i автомата $P1$ как $P1.T[i]$, а список переходов из состояния номер i автомата $P2$ как $P2.T[i]$. Для выполнения «скрещивания переходов» с равной вероятностью может быть выбран один из двух методов.

При использовании *традиционного метода скрещивания* списков переходов $S1.T[i]$ и $S2.T[i]$ производится аналогичные операции, но переходы, которые используются автоматами $P1$ и $P2$ для обработки тестов, лучше всего «проходят» в $S1$ и $S2$ напрямую.

В обоих случаях к получившимся в результате скрещивания автоматам $S1$ и $S2$ применяется операция удаления дублирующихся переходов.

Функция приспособленности. Функция приспособленности основана на редакционном расстоянии. Для ее вычисления выполняются следующие действия: на вход автомату подается каждая из последовательностей $Input[i]$. Обозначим последовательность выходных воздействий, которую сгенерировал автомат на входе $Input[i]$ как $Output[i]$. После этого вычисляется величина

$$FF_1 = \frac{\sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{ED(Output[i], Answer[i])}{\max(|Output[i]|, |Answer[i]|)} \right)}{n},$$

где как $ED(A, B)$ обозначено редакционное

расстояние между строками A и B . Отметим, что значения этой функции лежат в пределах от 0 до 1, при этом, чем «лучше» автомат соответствует тестам, тем больше значение функции приспособленности.

Функция приспособленности зависит не только от того, насколько «хорошо» автомат работает на тестах, но и от числа переходов, которые он содержит. Она

вычисляется по формуле: $FF_2 = \begin{cases} 10 \cdot FF_1 + 0,01 \cdot (100 - cnt), & FF_1 < 1 \\ 20 + 0,01 \cdot (100 - cnt), & FF_1 = 1 \end{cases}$, где как cnt обозначено

число переходов в автомате. Эта функция приспособленности устроена таким образом, что при одинаковом значении функции FF_1 , отражающей «прохождение» тестов автоматом, преимущество имеет автомат, содержащий меньше переходов. Кроме этого, автомат, который «идеально» проходит все тесты, оценивается выше, чем автомат, проходящий тесты не идеально.

Построение системы управления часами с будильником. Применение предлагаемого метода иллюстрируется на примере построения автомата управления часами с будильником [1]. Эти часы имеют три кнопки, которые служат для изменения режима их работы и для настройки текущего времени или времени срабатывания будильника. Рассматриваемые часы с будильником являются системой со сложным поведением, так как в ответ на одни и те же входные события (нажатия кнопок) в зависимости от режима работы генерируются различные выходные воздействия.

Поведение этих часов может быть описано с помощью конечного автомата, который содержит три состояния [1].

Для построения автомата управления часами с будильником было составлено 38 тестов, описывающих работу часов с будильником в различных режимах. Построение конечного автомата управления часами с будильником проводилось при следующих параметрах алгоритма генетического программирования:

- размер поколения – 2000 особей;
- доля «элиты» – наиболее приспособленных особей, напрямую переходящих в следующее поколение – 10%;
- число поколений до малой «мутации поколения» – 100 поколений;
- число поколений до большой «мутации поколения» – 150 поколений;
- размер автоматов в начальном поколении – четыре состояния.

Цель состояла в том, чтобы построить автомат, содержащий 14 переходов и соответствующий всем тестам (значение функции приспособленности, соответствующее такому автомату – 20,86). В результате работы алгоритма генетического программирования был построен автомат (рисунок), в котором из начального (отмечено «жирной» рамкой) достижимы только три состояния из четырех.

Если удалить недостижимое состояние, то этот граф переходов будет изоморфен построенному вручную [1].

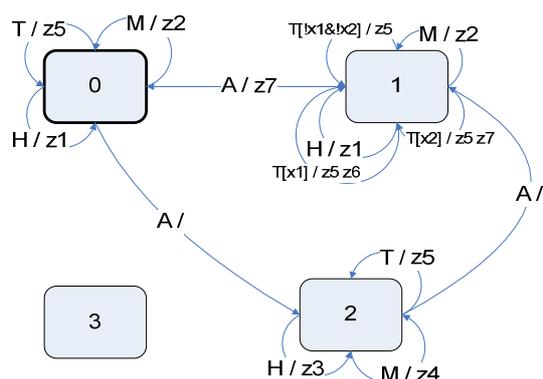


Рисунок. Граф переходов автомата, построенного с помощью алгоритма генетического программирования

Заключение

В работе предложен метод построения автоматов управления системами со сложным поведением на основе тестов с помощью генетического программирования. Эффективность предложенного метода показан на примере построения автомата управления часами с будильником.

Литература

1. Поликарпова Н.И., Шалыто А.А. Автоматное программирование. – СПб: Питер, 2010. – 176 с.
2. Angeline P., Pollack J. Evolutionary Module Acquisition // Proceedings of the Second Annual Conference on Evolutionary Programming. Cambridge: MIT Press, 1993. – P. 154–163.
3. Jefferson D., Collins R., Cooper C., Dyer M., Flowers M., Korf R., Taylor C., Wang A. The Genesys System: Evolution as a Theme in Artificial Life // Proceedings of Second Conference on Artificial Life. – MA: Addison-Wesley, 1992. – P. 549–578.
4. Царев Ф.Н., Шалыто А.А. Применение генетического программирования для генерации автомата в задаче об «Умном муравье» // Сборник трудов IV-ой Международной научно-практической конференции. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – Т. 2. – С. 590–597.
5. Бедный Ю.Д., Шалыто А.А. Применение генетических алгоритмов для построения автоматов в задаче «Умный муравей». – СПбГУ ИТМО, 2007 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://is.ifmo.ru/works/ant>, свободный. Яз. рус.
6. Парашенко Д.А., Царев Ф.Н., Шалыто А.А. Технология моделирования одного класса мультиагентных систем на основе автоматного программирования на примере игры «Соревнование летающих тарелок». Проектная документация. СПбГУ ИТМО, 2006 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://is.ifmo.ru/unimod-projects/plates/>, свободный.
7. Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М. Генетические алгоритмы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 320 с.
8. Рассел С., Норвиг П. Искусственный интеллект: современный подход: Пер. с англ. – 2-е изд. – М.: Вильямс. 2006. – 1408 с.
9. Koza J.R. Genetic programming: On the programming of computers by means of natural selection. – MIT Press, 1992. – 835 p.

10. Мазин М.А. Парфенов В.Г., Шалыто А.А. Разработка интерактивных приложений Macromedia Flash на базе автоматной технологии. Проектная документация. СПбГУ ИТМО, 2003 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://is.ifmo.ru/projects/flash/>, свободный.
11. Бек К. Экстремальное программирование: разработка через тестирование. – СПб: Питер, 2003. – 224 с.
12. Lucas S., Reynolds T. Learning Deterministic Finite Automata with a Smart State Labelling Evolutionary Algorithm // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – June 2005. – V. 27. – Is. 7. – P. 1063–1074.

УДК 681.5.11

СИНТЕЗ СЛЕДЯЩЕГО ЭЛЕКТРОПРИВОДА ОСИ ТЕЛЕСКОПА С ЭТАЛОННОЙ МОДЕЛЬЮ В КОНТУРЕ УГЛА

М.Х. Цветкова

Научный руководитель – д.т.н., профессор И.Е. Овчинников

Предлагается структура алгоритма управления следящим электроприводом с эталонной моделью в контуре положения. Проведена структурно-параметрическая оптимизация, направленная на устранение «шагающего» режима.

Ключевые слова: система управления, регулятор, эталонная модель, шагающий режим, сухое трение.

Введение

К числу актуальных проблем современной электромеханики и преобразовательной техники относится проблема управления прецизионными следящими электроприводами для оптико-механических систем и, в частности, для комплексов позиционирования и слежения. При управлении прецизионными следящими электроприводами такими, как, например, электромеханическая система телескопа, на инфранизких скоростях (скорости, сравнимые со скоростью вращения Земли) в условиях нежесткости оси точность слежения за сигналом задания уменьшается [1–3].

Наличие сухого трения тоже отрицательно влияет на точность реализации заданных программных траекторий систем управления. Это связано с тем, что момент, создаваемый сухим трением, описывается функцией, разрывной относительно обобщенной скорости (сила трения изменяется скачкообразно при изменении направления движения) [4]. Как правило, при движении с инфранизкой скоростью этот факт приводит к «шагающему» режиму, колебаниям системы, вызванным реакцией на частые скачки возмущающего воздействия. Условие отсутствия «шагающего» режима – движение электропривода со скоростью, средняя величина которой превышает амплитуду ее колебаний. Таким образом, для повышения точности таких систем вводится нижняя граница скоростей.

В настоящей работе разработан алгоритм управления, позволяющий расширить нижнюю границу скоростей.

Постановка задачи

Наличие «шагающего» режима свойственно электроприводам, движущимся на инфранизких скоростях, вплоть до нулевых скоростей (режим позиционирования). Стандартные методы повышения точности путем увеличения порядка астатизма не могут бороться с нелинейными возмущениями типа сухого трения. Кроме того, именно

наличие астатизма по возмущающему воздействию способствует возникновению «шагающего» режима, а в статических системах он отсутствует.

Одно из наиболее простых решений – создание таблицы моментов трения. Значения моментов трения записываются в таблицу в зависимости от угла поворота и затем используются в качестве добавки к управлению с соответствующим знаком. Однако это требует огромных вычислительных затрат (необходимо где-то хранить эту таблицу). Кроме того, возможно изменение трения при изменении температуры с течением времени из-за механических воздействий и из-за изменения свойств смазки.

Метод адаптивной компенсации сухого и вязкого трения [4] позволяет эффективно решить проблему только в случае отсутствия активного трения на валу.

Метод, рассматриваемый в данной работе, ориентирован на структурно-параметрическую оптимизацию системы управления по возмущающему воздействию. Кроме стандартных контуров подчиненной системы регулирования [1] в систему управления вводится дополнительный контур положения с эталонной моделью (рис. 1).

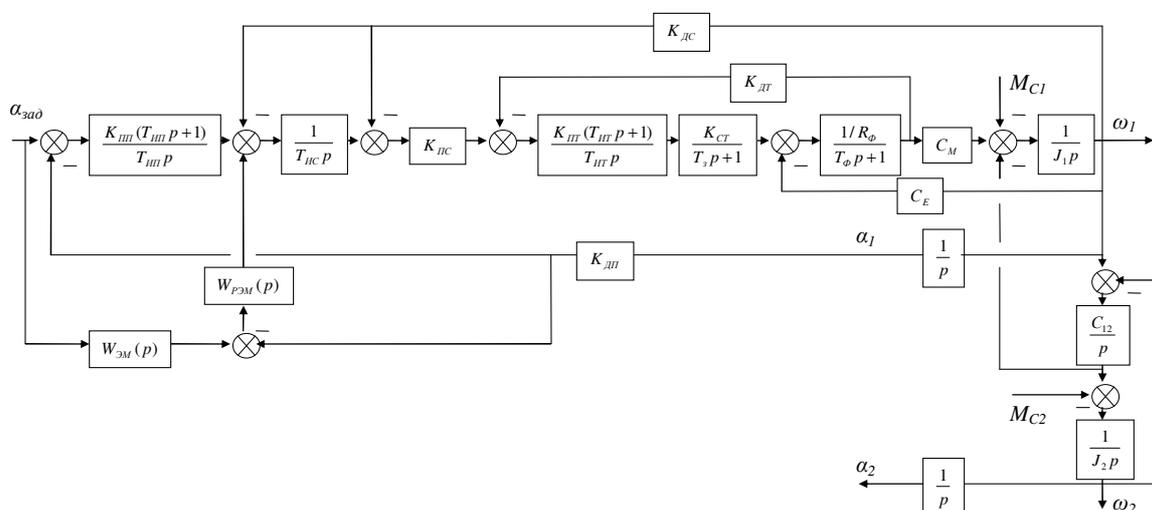


Рис. 1. Структурная схема системы с эталонной моделью в контуре положения

Система управления с эталонной моделью в контуре положения обладает одним привлекательным свойством: введение дополнительного контура никак не влияет на передаточную функцию системы по задающему воздействию при условии того, что эталонная модель будет соответствовать передаточной функции контура положения. Действительно, при отсутствии возмущающего воздействия на входе регулятора контура с эталонной моделью (РЭМ) $W_{рэм}(p)$ будет всегда ноль (рис. 1). Таким образом, можно добиться различных передаточных функций контура положения по возмущению при одинаковых передаточных функциях по заданию. На рис. 1 $\alpha_{зад}$ – сигнал задания; α_1 и α_2 – углы первой и второй масс; ω_1 и ω_2 – скорости первой и второй масс; C_M – коэффициент по моменту.

Итак, задача состоит в том, чтобы найти такую настройку контура с эталонной моделью, что влияние сухого трения будет минимальным.

Настройка основных контуров

Отсутствие датчиков на второй массе в прецизионных следящих электроприводах для оптико-механических систем с нежесткими осями не позволяет применять

традиционные методы настройки в связи с возможностью возникновения механического резонанса [1]. В связи с этим оптимизация системы осуществляется настройкой контура положения на «симметричный оптимум» на основании выражений, представленных в [1].

Таблица 1. Параметры регуляторов основных контуров

ПИ-регулятор контура тока	Коэффициент передачи П-регулятора	$K_{\text{ПТ}} = \frac{R_{\text{Ф}} T_{\text{Ф}}}{2T_3 K_{\text{СТ}} K_{\text{ДТ}} \cdot 1,5}$
	Время изодрома И-регулятора	$T_{\text{ИТ}} = T_{\text{Ф}}$
Контур скорости	Коэффициент передачи П-регулятора внутреннего контура	$K_{\text{ПС}} = \frac{K_{\text{ДТ}} \omega_0 (J_1 + J_2)}{K_{\text{ДС}} C_E}$
	Время изодрома И-регулятора внешнего контура	$T_{\text{ИС}} = \frac{2}{\omega_0}$
ПИ-регулятор контура положения	Коэффициент передачи П-регулятора	$K_{\text{ПП}} = \frac{K_{\text{ДС}} \omega_0}{4K_{\text{ДП}}}$
	Время изодрома И-регулятора	$T_{\text{ИП}} = \frac{8}{\omega_0}$

В качестве примера объекта управления был выбран вентиляльный двигатель (ВД) ДБМ 1200-1200 с двухмассовой нагрузкой с моментами инерции первой массы $J_1 = 35,28 \text{ кг} \cdot \text{м}^2$, второй массы $J_2 = 94,34 \text{ кг} \cdot \text{м}^2$, жесткостью $C_{12} = 1,874 \cdot 10^6 \text{ Н} \cdot \text{м/рад}$. На двигатель действует момент сопротивления на первой массе $M_{c1} = 40 \text{ Н} \cdot \text{м}$ и момент сопротивления на второй массе $M_{c2} = 40 \text{ Н} \cdot \text{м}$. В табл. 1 $R_{\text{Ф}}$ – сопротивление фазной обмотки ВД; $T_{\text{Ф}}$ – электрическая постоянная времени фазной обмотки ВД; C_E – коэффициент по противо-ЭДС; $K_{\text{СТ}}$ – статический коэффициент передачи широтно-импульсного преобразователя (ШИП); T_3 – некомпенсируемая постоянная времени запаздывания ШИП; $K_{\text{ДТ}}$, $K_{\text{ДС}}$, $K_{\text{ДП}}$ – коэффициенты передачи датчиков тока, скорости и положения соответственно; ω_0 – полоса пропускания частот в скоростной подсистеме вычисляемая по следующей формуле:

$$\omega_0 = \frac{\sqrt{\frac{C_{12} (J_1 + J_2)}{J_1 J_2}}}{\sqrt[4]{\gamma^3}}.$$

На основании выбранной настройки эталонная модель будет иметь следующую передаточную функцию:

$$W_S(p) = \frac{4T_{\text{шп}} p + 1}{8T_{\text{шп}}^3 p^3 + 8T_{\text{шп}}^2 p^2 + 4T_{\text{шп}} p + 1},$$

где $T_{\text{шп}} = 2T_{\text{мс}} = \frac{2}{\omega_0}$.

Синтез и настройка регулятора контура с эталонной моделью

Синтез передаточной функции по возмущению. Согласно рис. 1 передаточная функция контура положения по возмущающему воздействию в общем случае будет иметь следующий вид:

$$W_{\text{возм.}\alpha}(p) = \frac{\frac{T_{\text{ИС}} K_{\text{ДП}}}{K_{\text{ПС}} K_{\text{ДС}}} p (T_{\text{ИТ}} p + 1)}{(2T_{\mu\text{с}}^2 p + 2T_{\mu\text{с}} p + 1)p + (W_{\text{РЭМ}} + \frac{K_{\text{ПП}} (T_{\text{ИП}} p + 1)}{T_{\text{ИП}} p}) \frac{K_{\text{ДП}}}{K_{\text{ДС}}}} \quad (1)$$

Тогда при подстановке значений из табл. 1 в (1) получим:

$$W_{\text{возм.}\alpha}(p) = \frac{\frac{64C_E}{\omega_0^4 J_\Sigma} p^2 (T_\Phi p + 1)}{\frac{64}{\omega_0^4} p^4 + \frac{64}{\omega_0^3} p^3 + \frac{32}{\omega_0^2} p^2 + \frac{8}{\omega_0} p + 1 + W_{\text{РЭМ}} \frac{4K_{\text{ДП}}}{\omega_0 K_{\text{ДС}}} p},$$

где $J_\Sigma = J_1 + J_2$.

Реакцию скорости на возмущение можем узнать, добавив дифференциальное звено в (1):

$$W_{\text{возм.}\omega}(p) = \frac{\frac{64C_E}{\omega_0^4 J_\Sigma} p^3 (T_\Phi p + 1)}{\frac{64}{\omega_0^4} p^4 + \frac{64}{\omega_0^3} p^3 + \frac{32}{\omega_0^2} p^2 + \frac{8}{\omega_0} p + 1 + W_{\text{РЭМ}} \frac{4K_{\text{ДП}}}{\omega_0 K_{\text{ДС}}} p}. \quad (2)$$

Рассмотрим возможные варианты передаточной функции (2) в зависимости от $W_{\text{РЭМ}}$. Анализировать их свойства будем по реакции на скачок возмущающего воздействия при наличии момента сухого трения. Результаты приведены на рис. 2, в качестве выхода был выбран угол, а не скорость, так как именно он является конечной настраиваемой величиной.

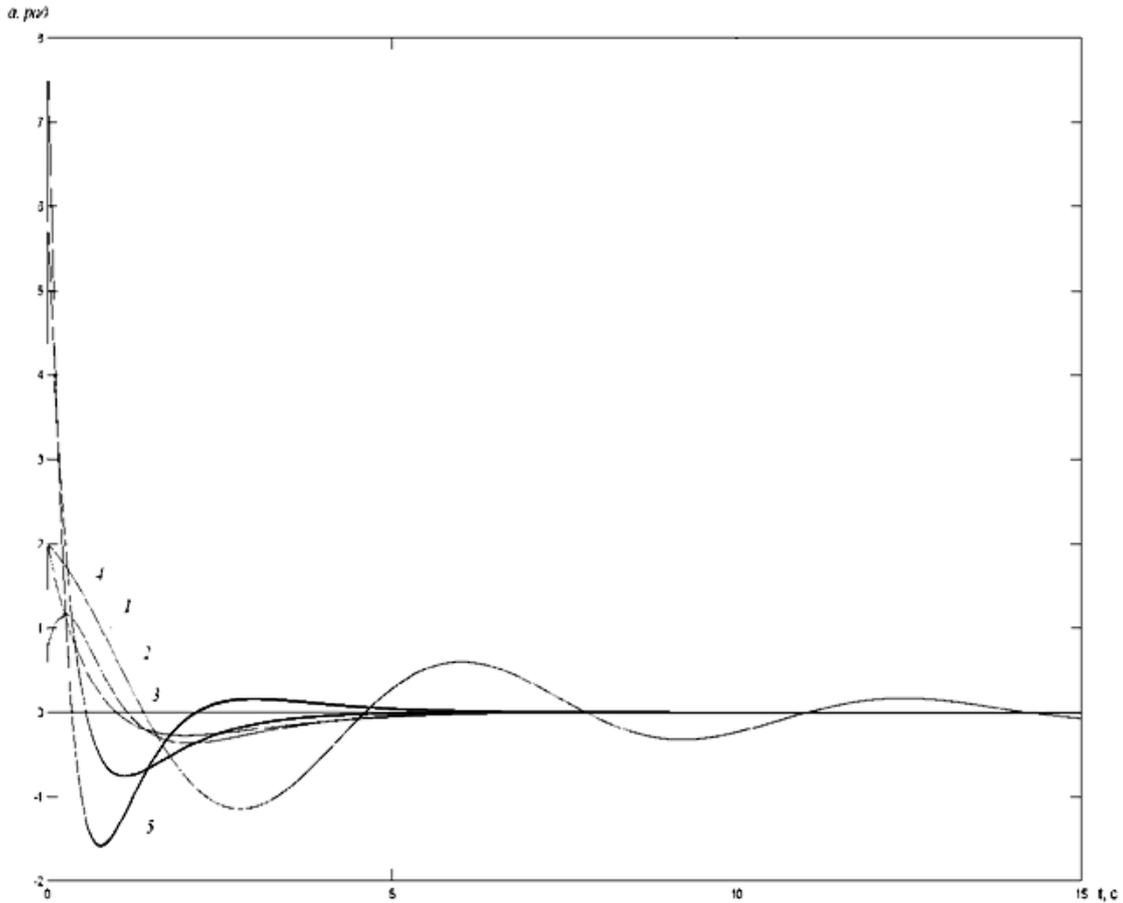


Рис. 2. Результаты моделирования системы с различными передаточными функциями по возмущению при наличии сухого трения

Первым четырем графикам соответствует следующая передаточная функция контура положения с эталонной моделью:

$$W_{\text{возм.}\alpha}(p) = \frac{K_M p^2 (T_\Phi p + 1)}{(T_1^2 p^2 + 2\xi T_1 p + 1)(T_2 p + 1)(T_3 p + 1)}.$$

Графику 1 соответствует $\xi = 1$, $T_2 = T_\Phi$; графику 2 – $\xi < 1$, $T_2 = T_\Phi$; графику 3 – $\xi = 1$, $T_2 > T_\Phi$, $T_1 > T_\Phi$; графику 4 – $\xi = 1$, $T_2 > T_\Phi$, $T_1 > T_\Phi$. Графику 5 соответствует передаточная функция:

$$W_{\text{возм.}\alpha}(p) = \frac{K_M p^3 (T_\Phi p + 1)}{(T_1 p + 1)^3 (T_2 p + 1)}.$$

Очевидно, что наиболее приемлемыми вариантами являются передаточные функции, соответствующие графикам 1 и 4, т.е. передаточная функция (2) должна обладать следующими свойствами – отсутствие комплексных корней в характеристическом уравнении и минимальный порядок астатизма:

$$W_{\text{возм.}\alpha}(p) = \frac{K_M p^2 (T_\Phi p + 1)}{(T_1 p + 1)(T_2 p + 1)(T_3 p + 1)(T_4 p + 1)}. \quad (3)$$

Синтез регулятора эталонной модели. Для настройки системы управления с передаточной функцией (2) необходим следующий регулятор:

$$W_{\text{РЭМ}}(p) = K_6 p^4 + K_5 p^3 + K_4 p^2 + K_3 p + K_2 + \frac{K_1}{p}.$$

Передаточная функция (2) примет следующий вид:

$$W_{\text{возм.}\omega}(p) = \frac{\frac{64C_E}{\omega_0^4 J_\Sigma K_1'} p^3 (T_\Phi p + 1)}{\frac{K_6}{K_1'} p^5 + \frac{64K_5'}{\omega_0^4 K_1'} p^4 + \frac{64K_4'}{\omega_0^3 K_1'} p^3 + \frac{32K_3'}{\omega_0^2 K_1'} p^2 + \frac{8K_2'}{\omega_0 K_1'} p + 1}, \quad (4)$$

где $K_1' = \frac{4K_{\text{ДП}}K_1}{\omega_0 K_{\text{ДС}}} + 1$, $K_2' = \frac{K_{\text{ДП}}K_2}{2K_{\text{ДС}}} + 1$, $K_3' = \frac{K_{\text{ДП}}\omega_0 K_3}{8K_{\text{ДС}}} + 1$, $K_4' = \frac{K_{\text{ДП}}\omega_0^2 K_4}{16K_{\text{ДС}}} + 1$,

$K_5' = \frac{K_{\text{ДП}}\omega_0^3 K_5}{16K_{\text{ДС}}} + 1$. Коэффициент K_6 придаст логарифмической амплитудно-

частотной характеристике передаточной функции отрицательный наклон 20 дБ/дек в области высоких частот и позволит регулировать коэффициент усиления по возмущающему воздействию, но четыре последовательно соединенных дифференциальных звена в цифровых прецизионных системах создают существенные шумы дискретизации. Такая же проблема и с коэффициентами K_5 и K_4 , поэтому $K_6 = K_5 = K_4 = 0$, а коэффициент усиления по возмущающему воздействию в области высоких частот будет постоянным и равным $\frac{C_E T_\Phi}{J_\Sigma}$. С учетом вышесказанного, а также

формул (3) и (4) получим:

$$\frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_3} + \frac{1}{T_4} = \omega_0. \quad (5)$$

Одна из постоянных времени T_1, T_2, T_3, T_4 должна быть меньше T_Φ . Это одно из необходимых условий минимальности коэффициента усиления по возмущающему воздействию на всем диапазоне частот. Согласно (5) настраиваемые постоянные времени ограничены конечной величиной, и данное условие неосуществимо при $T_\Phi < \omega_0^{-1}$. Тогда одна из постоянных времени (пусть T_4) должна быть минимальной, а

максимальный коэффициент усиления будет на частоте $1/T_4$ равный $\frac{C_E T_4}{J_\Sigma}$, т.е.

$T_4 \ll (T_1, T_2, T_3)$. В таком случае:

$$\frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_3} = \frac{\omega_0 K_3'}{2}. \quad (6)$$

$$T_1 T_2 T_3 = \frac{64}{\omega_0^3 K_1'}. \quad (7)$$

Согласно вышеописанному условию и уравнениям (6) и (7) получаем $T_1 = T_2 = T_3$. Очевидно, что $K_1' = 1$ наиболее оптимальный вариант для выполнения $T_4 \ll (T_1, T_2, T_3)$, т.е. $K_1 = 0$.

Итак, для настройки контура с эталонной моделью необходим ПД-регулятор со следующей передаточной функцией:

$$W_{\text{РЭМ}}(p) = K_{\text{Д}} p + K_{\text{П}}.$$

Настройка регулятора эталонной модели. Коэффициенты регулятора рассчитываются исходя из вышеописанных условий и формулы (4):

$$K_{\Pi} = \frac{K_{\text{ДС}}}{K_{\text{ДП}}},$$

$$K_{\text{Д}} = \frac{4K_{\text{ДС}}}{K_{\text{ДП}}\omega_0}.$$

Результаты эксперимента. Результаты моделирования реакции на линейное задающее воздействие с инфранизкой скоростью 1"/с изображены на рис. 3. В системе подчиненного регулирования без эталонной модели отчетливо видны колебания, превышающие среднюю скорость в несколько раз. В системе с эталонной моделью эти колебания минимальны и обусловлены только лишь конечной разрядностью датчиков.

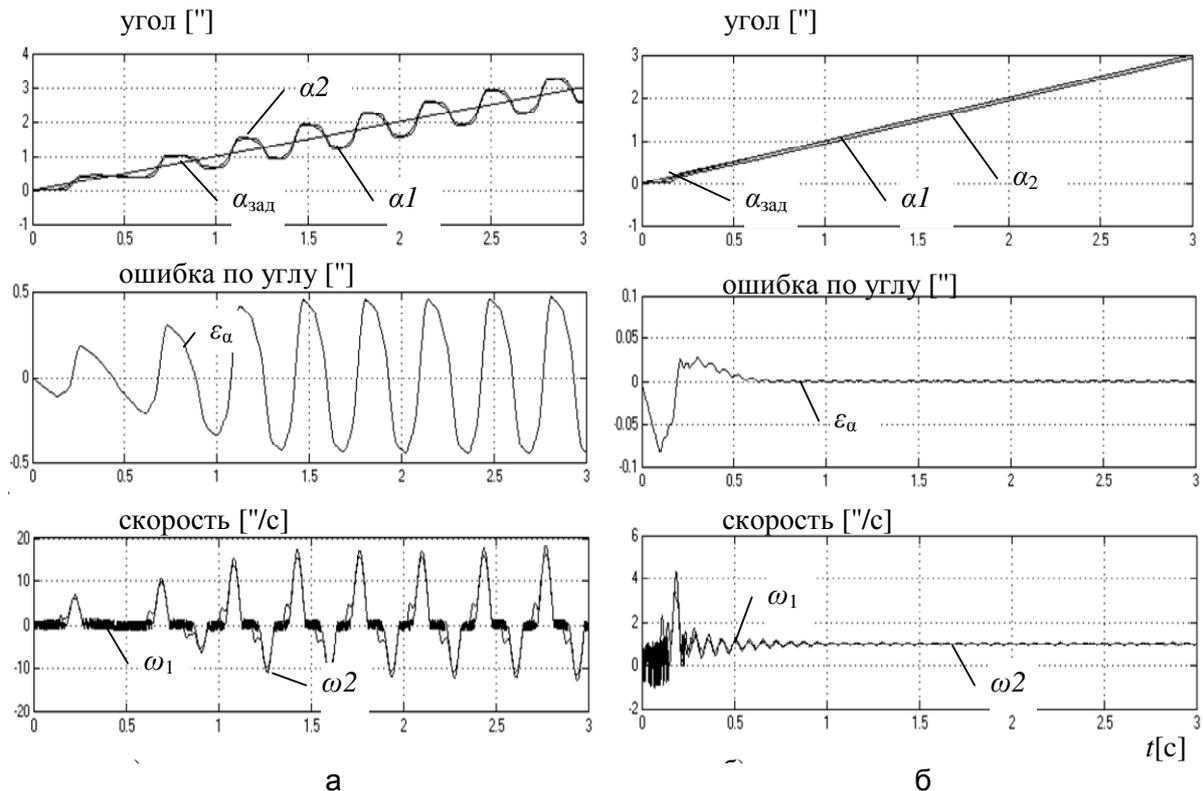


Рис. 3. Обработка сигнала задания с постоянной скоростью 1"/с традиционной системой подчиненного регулирования (а) и системы с эталонной моделью в контуре угла (б)

Заключение

В данной работе была предложена структура с эталонной моделью в контуре положения, настроенная на уменьшение автоколебаний и устранение «шагающего» режима при максимальном быстродействии системы. Предложен метод настройки систем управления по возмущающему воздействию. Данная система управления может быть использована в прецизионных следящих электроприводах с нежесткими осями, например, в телескопах тракторных измерений.

Литература

1. Толмачев В.А. Синтез следящего электропривода оси опорно-поворотного устройства // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 6. – С. 68–72.

2. Ключев В.И. Теория электропривода: Учебник для вузов. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 560 с.
3. Денисов К.М., Жданов И.Н. Оптимизация каналов скорости и положения прецизионных следящих электроприводов // Изв. вузов. Приборостроение. – 2008. – Т. 51. – № 6. – С. 45–51.
4. Стещенко Е.В. Адаптивная компенсация сухого и вязкого трения в системах автоматического управления // Вестник ЧитГУ. – 2008. – Т. 48. – № 3. – С. 123–128.

УДК 004.4'242

ПОСТРОЕНИЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ ПО ЗАШУМЛЕННЫМ ОБУЧАЮЩИМ НАБОРАМ С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА ОПТИМИЗАЦИИ МУРАВЬИНОЙ КОЛОНИИ

Д.С. Чивилихин, В.И. Ульянов

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.А. Шалыто

Построение детерминированных конечных автоматов по набору обучающих примеров является классической задачей в области машинного обучения. Особый интерес представляет модификация этой задачи, в которой обучающие наборы содержат шум. В работе эта задача решается с помощью недавно разработанного авторами алгоритма, основанного на оптимизации муравьиной колонии и мутациях. Приводятся результаты экспериментального сравнения алгоритма муравьиной колонии с эволюционными алгоритмами и одним из лучших алгоритмов слияния состояний.

Ключевые слова: конечный автомат, оптимизация муравьиной колонии.

Введение

Детерминированные конечные автоматы или автоматы-распознаватели – класс конечных автоматов, не имеющих действий на переходах или в состояниях, однако содержащих особое подмножество множества состояний – множество допускающих состояний. Допускающие состояния автомата используются для того, чтобы определить, принадлежит ли строка задаваемому автоматом регулярному языку. Автоматы-распознаватели применяются в задачах классификации и обработке языков.

За последние годы задача построения автоматов по наборам обучающих данных привлекла внимание многих ученых. В работе [1] был предложен новый алгоритм слияния состояний EDSM, показавший хорошие результаты на соревнованиях Abbadingo One, посвященных построению автоматов по обучающим наборам. Позднее был разработан эволюционный алгоритм, более эффективный, чем EDSM для автоматов с относительно небольшим числом состояний [2].

В 2004 году в рамках конференции GECCO 2004 было проведено соревнование, посвященное построению конечных автоматов по зашумленным обучающим наборам, в которых 10% классовых пометок обучающего набора было инвертировано. В работах [3, 4] было предложено два различных эволюционных алгоритма, позволяющих чрезвычайно эффективно решать эту задачу для автоматов, содержащих до 30 состояний.

Авторами настоящей работы был недавно разработан алгоритм построения конечных автоматов, основанный на алгоритме оптимизации муравьиной колонии и мутациях конечных автоматов. В работах [5, 6] новый алгоритм был применен для решения таких задач, как построение конечных автоматов по тестовым примерам и задача об «Умном муравье». В настоящей работе новый алгоритм применяется для решения задачи построения детерминированного конечного автомата по набору

обучающих примеров, 10% классовых пометок в котором было изменено на противоположные.

Конечные автоматы

Конечный автомат-преобразователь – это шестерка $\langle S, \Sigma, \Delta, \delta, \lambda, s_0 \rangle$, где S – множество состояний; Σ – множество входных событий; Δ – множество выходных воздействий; $\delta : S \times \Sigma \rightarrow S$ – функция переходов; $\lambda : S \times \Sigma \rightarrow \Delta$ – функция действий, а $s_0 \in S$ – стартовое состояние. Под *мутацией* конечного автомата понимается небольшое изменение его структуры, т.е. таблиц, задающих функции переходов и действий. В данной работе используется два типа мутаций конечных автоматов.

1. Изменение состояния, в которое ведет переход. Для случайно выбранного перехода в автомате состояние s , в которое он ведет, заменяется на другое состояние, выбранное случайным образом из множества $S / \{s\}$.
2. Изменение действия на переходе. Действие a на случайно выбранном переходе заменяется на другое действие, выбранное случайным образом из множества $\Delta / \{a\}$.

В свою очередь, *конечный автомат-распознаватель* – это пятерка $\langle S, F, \Sigma, \delta, s_0 \rangle$, где $F \subset S$ – множество *допускающих* состояний. Таким образом, автомат-распознаватель отличается от конечного автомата, определенного выше, тем, что, с одной стороны, не включает в себя функцию действий λ и множество действий Δ , а с другой стороны, включает в себя множество допускающих состояний F . Говорят, что автомат-распознаватель *принимает* строку $w \in \Sigma^*$, если после обработки последнего символа строки он переходит в допускающее состояние. При этом предполагается, что автомат является *полным*, т.е. содержит переход из каждого состояния по каждому входному событию. В противном случае говорят, что автомат не принимает строку. Примеры диаграмм состояний автомата-преобразователя и автомата-распознавателя приведены на рисунке.

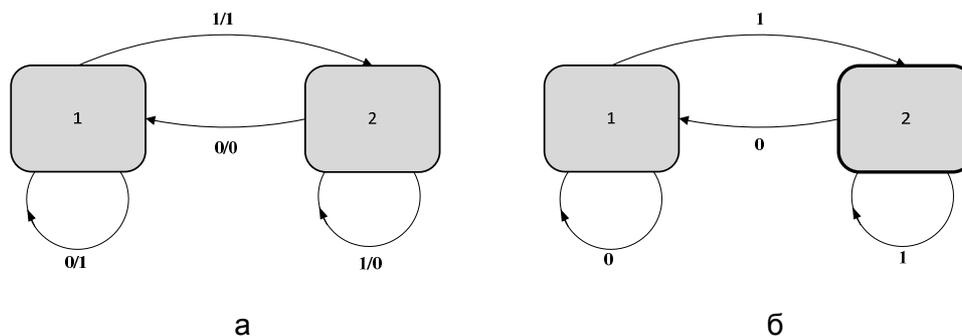


Рисунок. Примеры конечного автомата-преобразователя (а) и автомата-распознавателя (б). Стартовое состояние в обоих автоматах – первое, допускающее состояние в правом автомате выделено жирной рамкой

Алгоритмы оптимизации муравьиной колонии

Алгоритмы оптимизации муравьиной колонии (ОМК) – семейство алгоритмов оптимизации, основанных на поведении реальных колоний муравьев. Первый алгоритм ОМК был разработан Марко Дориго (Marco Dorigo) и применялся для решения задачи о коммивояжере [7]. С того времени было разработано множество алгоритмов ОМК, таких как Ant Colony System [8], MAX MIN Ant System [9] и Rank-based Ant System [10]. Алгоритмы ОМК успешно применяются для решения таких сложных

комбинаторных задач, как, например, задача о рюкзаке, задача об упаковке в контейнеры, квадратичная задача о назначениях.

Для применения ОМК к какой-либо комбинаторной задаче необходимо представить пространство поиска этой задачи в виде графа, называемого *графом конструирования*. В алгоритмах ОМК решения строятся колонией (набором) «муравьев», каждый из которых использует стохастическую стратегию для перемещения по графу. Решения обычно представляют собой пути в графе конструирования, в то время как ребра и вершины графа являются компонентами решений. Каждому ребру (u, v) графа (u и v – вершины графа) ставится в соответствие число τ_{uv} , называемое значением *феромона*. Также на ребре может быть задано число η_{uv} , называемое *эвристической информацией*. Различие между этими двумя величинами заключается в том, что эвристическая информация задается изначально по условиям задачи и не меняется во время выполнения алгоритма ОМК, в то время как значения феромона изменяются агентами-муравьями в процессе построения решений. Общая схема любого алгоритма ОМК состоит из трех последовательных операций, которые повторяются, пока не будет найдено решение или не выполнится какой-либо критерий останова.

1. Построение решений муравьями. Каждый муравей переходит от вершины к вершине графа, строя некоторый путь. Следующее ребро выбирается с помощью стохастической формулы, исходя из значения феромона и эвристической информации на этом ребре.
2. Обновление значений феромона. На этом этапе могут измениться значения феромона на всех ребрах графа. Значение феромона на ребре может возрасти, если ребро входит в путь какого-то муравья или уменьшится вследствие *испарения* феромона. Количество феромона, откладываемого муравьем на ребрах своего пути в задачах максимизации пропорционально качеству найденного им решения, которое оценивается с помощью функции приспособленности $f(\Phi)$.
3. Дополнительные действия (Необязательно). На этом этапе выполняются операции, которые не могут быть выполнены отдельными муравьями.

Предлагаемый метод построения конечных автоматов

Основой предлагаемого метода построения конечных автоматов является представление пространства поиска – множества всех автоматов с заданными параметрами – в виде ориентированного графа G . Этот граф конструирования имеет следующие свойства.

- Каждая вершина графа G ассоциирована с конечным автоматом.
- Пусть u – вершина, ассоциированная с автоматом A_1 , а v – вершина, ассоциированная с автоматом A_2 . Тогда, если автомат A_1 может быть получен из автомата A_2 применением одной операции мутации, то граф G содержит ребра $u \rightarrow v$ и $v \rightarrow u$. В противном случае, вершины u и v не связаны ребром.
- На каждом ребре (u, v) задано значение эвристической информации, вычисляемое по формуле:

$$\eta_{uv} = \max(\eta_{\min}, f(v) - f(u)),$$

где η_{\min} – небольшая положительная константа, например, 0,001.

Можно заметить, что для любой пары автоматов A_1 и A_2 и соответствующей пары вершин u и v в графе G существует путь из u в v и из v в u .

Нужно отметить, что предлагаемый алгоритм весьма существенно отличается от других алгоритмов оптимизации муравьиной колонии, хотя и заимствует их основы. Во-первых, используемые в алгоритме графы конструирования могут быть

чрезвычайно большими – для некоторых задач они могут содержать миллионы вершин. Такие графы невозможно хранить в оперативной памяти, поэтому в алгоритме используются специальные механизмы для ограничения размеров графа конструирования.

Во-вторых, в большинстве случаев в алгоритмах муравьиной колонии вершины и ребра графа конструирования являются компонентами решений, а полные решения строятся агентами-муравьями в процессе обхода графа. В предлагаемом алгоритме вершины графа представляют собой полные решения, в то время как муравьи переходят от одного решения к другому в поисках оптимального.

Построение начального решения. В начале работы алгоритма строится некоторое начальное решение, которое добавляется в граф конструирования и становится его первой вершиной. При построении этого начального решения сначала строится случайный конечный автомат с заданным числом состояний. Таблицы переходов конечного автомата заполняются случайным образом. После этого к построенному случайному решению применяется простейшая (1+1)-эволюционная стратегия (ЭС) в течение небольшого фиксированного числа итераций. Эволюционная стратегия работает следующим образом: к текущему решению применяется случайно выбранный оператор мутации и вычисляется значение функции приспособленности измененного решения. Если значение ФП нового решения не меньше значения ФП текущего решения, то текущее решение заменяется новым. Процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнуто максимальное число вычислений ФП.

Построение решений муравьями. Процедуру построения решений муравьями можно разделить на два этапа. На первом этапе выбираются вершины графа конструирования, из которых муравьи начнут построение путей. Предварительные эксперименты показали, что одной из наиболее эффективных стратегий выбора стартовых вершин является выбор вершины, ассоциированной с лучшим на момент выбора решением.

На втором этапе каждый муравей обходит граф, начиная с соответствующей стартовой вершины. Пусть муравей находится в вершине u ассоциированной с автоматом A . Если у вершины u есть дети, то муравей выбирает следующую вершину, руководствуясь следующими правилами.

1. Построение новых решений. С вероятностью p_{new} муравей пытается создать новые ребра и вершины графа G путем выполнения фиксированного числа N_{mut} мутаций автомата A . После выполнения всех N_{mut} мутаций муравей выбирает лучшую из построенных вершин и переходит в нее. Процесс обработки одной мутации автомата A таков:
 - выполнить мутацию автомата A , получить автомат A_{mut} ;
 - найти в графе G вершину t , ассоциированную с автоматом A_{mut} ; если такой вершины не существует, создать ее и добавить в граф;
 - добавить в граф ребро (u, t) .
2. Стохастический выбор. Иначе, с вероятностью $(1-p_{new})$ муравей стохастическим образом выбирает следующую вершину из множества детей N_u вершины u . Вершина v выбирается с вероятностью, определяемой классической формулой из области оптимизации муравьиной колонии:

$$p_{uv} = \frac{\tau_{uv}^\alpha \cdot \eta_{uv}^\beta}{\sum_{w \in N_u} \tau_{uw}^\alpha \cdot \eta_{uw}^\beta},$$

где $w \in N_u$ и $\alpha, \beta \in [0, 1]$.

Если у вершины u нет детей, то следующая вершина выбирается с помощью правила построения новых решений с вероятностью 1,0.

Все муравьи в колонии запускаются «параллельно» – каждый муравей делает по одному шагу до тех пор, пока все муравьи не остановятся. Каждый муравей может выполнить максимум n_{stag} шагов без увеличения своего значения ФП, после чего он будет остановлен. Аналогично, колония муравьев может выполнить максимум N_{stag} итераций без увеличения максимального значения ФП, после чего алгоритм перезапускается.

Обновление значений феромона. Правило обновления значений феромона, применяемое в данной работе, основано на правилах, используемых в алгоритмах MAX MIN Ant System [9] и Elitist Ant System [11]. Значение феромона, которое откладывает муравей на ребрах своего пути равно максимальному значению ФП всех автоматов, посещенных этим муравьем. Для каждого ребра (u, v) графа G хранится число τ_{uv}^{best} – наибольшее из значений феромона, когда-либо отложенных на этом ребре. Последовательно рассматриваются все пути муравьев на текущей итерации алгоритма. Для каждого пути муравья выделяется отрезок от начала пути до вершины, содержащей автомат с наибольшим на пути значением ФП. Для всех вершин из этого отрезка обновляются значения τ_{uv}^{best} , а значения феромона всех ребер графа G обновляются по классической формуле:

$$\tau_{uv} = \max(\tau_{\min}, \rho\tau_{uv} + \tau_{uv}^{best}),$$

где $\rho \in [0, 1]$ – скорость испарения феромона; τ_{\min} – эмпирически выбранное минимальное значение феромона (например, 0,001).

Дополнительные действия. Одной важной особенностью предлагаемого подхода является то, что муравей не всегда выбирает решения, увеличивающие его максимальное достигнутое значение ФП. Это свойство позволяет алгоритму эффективно выбираться из локальных максимумов. Однако такое поведение может привести к тому, что на ребрах, ведущих в плохие решения, будут отложены большие значения феромона. Для решения этой проблемы применяется алгоритм «неубывающих путей».

Рассмотрим последовательность вершин пути одного муравья – последовательность $[n_0, \dots, n_l]$. Выберем из этой последовательности подпоследовательность $[n_0, \dots, n_l]$, $l < L$, такую, что:

$$\forall i \in [0 \dots l-1] \forall j > i: f(A_{n_j}) \geq f(A_{n_i}),$$

где за A_{n_k} обозначен конечный автомат, ассоциированный с вершиной n_k . Соединив вершины этой подпоследовательности соответствующими мутациями можно получить путь «жадного» муравья, который всегда делает переходы, увеличивающие или не уменьшающие его максимальное значение ФП. Полученные пути используются на стадии обновления феромона.

Построение автоматов-распознавателей по зашумленным наборам обучающих примеров

В данной задаче требуется сначала построить конечный автомат, правильно классифицирующий все входные строки из обучающего набора, а затем оценить точность построенного классификатора на строках тестового набора. Входные строки обучающего и тестового наборов состоят из символов алфавита Σ . Для каждой строки

в обучающем наборе известна ее классовая пометка или класс. В общем случае, если число классов равно c , то значения пометок могут принимать значения от 0 до $c-1$. В простейшем же, наиболее часто встречаемом в литературе случае, рассматривается бинарный алфавит, т.е. $\Sigma = \{0,1\}$, число классов $c = 2$, а пометки принимают значения 0 или 1.

Функция приспособленности в этой задаче вычисляется как доля правильно классифицированных строк. Таким образом, для идеального автомата, правильно классифицирующего все строки, значение ФП будет равно 1,0, а для автомата, неправильно классифицирующего все строки, значение ФП будет равно 0. При вычислении значения ФП используется алгоритм *smart state labeling* [3]. Этот алгоритм позволяет исключить из рассмотрения мутации классовых пометок состояний автомата, что сокращает пространство поиска в 2^N раз. В процессе вычисления ФП автомату на вход поочередно подаются все строки из обучающего набора. Для каждого состояния запоминается число строк, которые должны быть допущены в этом состоянии и число строк, которые должны быть не допущены. Пометка состояния выбирается исходя из максимум этих двух чисел.

В ходе соревнования *Abbadingo One* был разработан алгоритм EDSM, способный построить автомат, идеально совместимый с обучающим набором, при условии, что обучающий набор содержит все строки вплоть до некоторой длины. Однако как указано в работе [3], эффективность алгоритма EDSM снижается с уменьшением числа строк в обучающем наборе, или, что тоже самое, с ростом разреженности обучающего набора.

Особый интерес представляет модификация этой задачи, рассматриваемая в данной работе, в которой классовые пометки некоторой доли строк обучающего набора инвертированы. В ходе соревнований, темой которых было построение автоматов по наборам зашумленных данных, проводившихся в рамках конференции GECCO 2004, рассматривались автоматы, содержащие 10, 20 и 30 состояний. Для каждого размера автоматов участникам было предоставлено по 10 обучающих и 10 тестовых наборов. В обучающих наборах 10% пометок были инвертированы. Задача считалась решенной, если алгоритм участника показывал точность на тестовом наборе более 99% для более чем половины тестовых наборов. Каждому алгоритму предоставлялось 10 минут на компьютере с процессором Intel Pentium 2.2 Ghz.

В данной работе эксперименты проводились для автоматов с 30 состояниями с использованием десяти наборов обучающих и тестовых данных с соревнований GECCO 2004. Алгоритм ОМК запускался на компьютере с процессором Intel i7 2600 3.4Ghz, время работы было ограничено 38 секундами, что примерно соответствует одной минуте на компьютере с процессором Intel Pentium 2.2 Ghz. За это время алгоритм производил в среднем около 250000 вычислений функции ФП.

В экспериментах использовались следующие значения параметров алгоритма: $n_{stag} = 15$, $N_{stag} = 15$, $\rho = 0$, $N_{mut} = 35$, $p_{new} = 0,5$, $\alpha = \beta = 1$, использовался один муравей, ЭС для построения начального решения запускалась на 100 шагов.

Вначале алгоритм ОМК был запущен по одному разу на каждом из обучающих наборов. Построенные автоматы показали точность более 99% на каждом из тестовых наборов, т.е. решили десять задач из десяти. Однако так как алгоритм ОМК является рандомизированным, для оценки его реальной производительности необходимо повторять каждый эксперимент множество раз. По этой причине для каждой пары обучающих и тестовых данных алгоритм был запущен 100 раз. Результаты работы предложенного алгоритма муравьиной колонии в сравнении с результатами, полученными другими алгоритмами, представлены в таблице. Из этих результатов видно, что предложенный алгоритм ОМК достигает большего среднего значения ФП, чем другие алгоритмы.

Таблица. Сравнение производительности различных алгоритмов для автоматов из 30 состояний из соревнований по построению автоматов GECCO 2004; указано минимальное, максимальное и среднее значение ФП на тестовых наборах по всем запускам каждого из алгоритмов

Алгоритм	Минимум	Максимум	Среднее	Число удач/ число запусков	Время работы, мин
Blue* [12]	70,0	96,0	82,0	0/10	10
ID-HFA [4]	93,5	99,9	98,5	6/10	1
Smart [3]	99,0	100,0	99,6	10/10	6
Предложенный алгоритм	88,74	100,0	99,782	910/1000	1

Заключение

В данной работе были представлены результаты применения нового метода построения конечных автоматов, основанного на алгоритме оптимизации муравьиной колонии и мутациях, к задаче построения детерминированных конечных автоматов по зашумленным обучающим наборам. Средняя точность построенных автоматов на тестовых наборах превышает средние точности других рассмотренных алгоритмов. Естественным развитием настоящего исследования является изучение поведения алгоритма оптимизации муравьиной колонии на различных размерах целевого автомата при различных плотностях обучающих наборов и долях шума.

Литература

1. Lang K.J., Pearlmutter B.A., Price R.A. Results of the Abbadingo One DFA Learning Competition and a new evidence-driven state merging algorithm // Lecture Notes In Computer Science. – 1998. – V. 1433. – P. 1–12.
2. Lucas S., Reynolds J. Learning DFA: Evolution versus Evidence Driven State Merging // The 2003 Congress on Evolutionary Computation (CEC'03). – 2006. – P. 362–369.
3. Lucas S., Reynolds J. Learning Deterministic Finite Automata with a Smart State Labeling Evolutionary Algorithm // IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence. – 2005. – V. 27. – № 7. – P. 1–12.
4. Gomez J. An Incremental-Evolutionary Approach for Learning Finite Automata // Proceedings of the 2006 IEEE Congress on Evolutionary Computation. – 2006. – P. 362–369.
5. Chivilikhin D., Ulyantsev V., Tsarev F. Test-based extended finite-state machines induction with evolutionary algorithms and ant colony optimization // Proceedings of the fourteenth international conference on Genetic and evolutionary computation conference (GECCO'12). – 2012. – P. 603–606.
6. Chivilikhin D., Ulyantsev V. Learning Finite-State Machines with Ant Colony Optimization // Lecture Notes in Computer Science. (In proceedings of the 8th International conference ANTS'12). – 2012. – P. 268–275.
7. Dorigo M. Optimization, Learning and Natural Algorithms // PhD thesis. Polytechnico di Milano, Italy. – 1992. – 140 p.
8. Dorigo M., Gambardella L.M. Ant Colony System: A Cooperative Learning Approach to the Traveling Salesman Problem // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 1997. – V. 1. – № 1. – P. 55–66.
9. Stutzle T. Hoos H.H. MAX MIN Ant System // Future Generation Computer Systems. – 2000. – V. 16. – P. 889–914.

10. Bullnheimer B., Hartl R.F., Strauss C. A new rank-based version of the Ant System: A computational study // Central European Journal for Operations Research and Economics. – 1999. – V. 7. – № 1. – P. 25–38.
11. Dorigo M., Maniezzo V., Colomi A. Ant System: Optimization by a colony of cooperating agents // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. – 1996. – V. 26. – № 1. – Part B. – P. 29–41.
12. Sebban M., Janodet J., Tantini F. BLUE*: a Blue-Fringe Procedure for Learning DFA with Noisy Data (GECCO 2004 Noisy DFA Entry) // Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conf. 2004. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://cswww.essex.ac.uk/staff/sml/gecco/results/NoisyDFA/entries/blue/BlueFringe.pdf>, свободный.

УДК 519.688

ТЕХНОЛОГИЯ СИНТЕЗА РУССКОЙ РЕЧИ НА ОСНОВЕ ОБЪЕДИНЕНИЯ СКРЫТЫХ МАРКОВСКИХ МОДЕЛЕЙ И АЛГОРИТМА UNIT SELECTION

П.Г. Чистиков

Научный руководитель – д.т.н., профессор Ю.Н. Матвеев

В исследовании рассмотрено построение системы синтеза русской речи на базе интеграции двух наиболее распространенных подходов – статистического на основе скрытых марковских моделей и конкатенативного методом Unit Selection. Для решения задачи моделирования интонации разработана методика создания модели голоса русскоязычного диктора. Эксперименты показывают повышение естественности звучания синтезируемой речи.

Ключевые слова: синтез речи, скрытые марковские модели, Unit Selection, модель голоса.

Введение

Синтез речи представляет собой автоматическую генерацию речи на основе произвольного текста путем перевода последовательности символов данного текста в последовательность чисел, представляющих собой отсчеты звукового сигнала [1–3].

Синтез естественной (эмоциональной) речи возможен только на основе аллофонно и интонационно сбалансированного речевого корпуса. Такие корпуса имеют большой объем (не менее 10 часов речи), а их подготовка и разметка осуществляется, как правило, вручную, что требует больших временных затрат. В настоящей работе автором было разработано приложение, полностью автоматизирующее этот процесс, позволяя автоматически формировать сбалансированный текст заданного объема для озвучки диктором, выполнять контроль правильности чтения диктором заданных предложений, производить автоматическую разметку материала, что позволило сократить время подготовки речевого корпуса до 20 раз, приблизив его к реальному времени.

Для генерации речевого сигнала существует несколько различных технологий, которые можно разделить на две группы: синтез, основанный на правилах, и синтез, основанный на данных. Первая технология была предложена еще в 1964 году и, несмотря на относительно плохое звучание, применяется по настоящее время. Вторая технология позволяет добиться более высокого качества звучания [4–8].

Сравнивая подходы, основанные на алгоритме Unit Selection и на статистических моделях, как наиболее распространенные, можно выделить следующие особенности.

1. Автоматическое обучение параметров моделей, которое возможно выполнять на относительно небольшом речевом материале, позволяет существенно сократить

объем требуемой памяти, а также позволяет разрабатывать новый голос за гораздо меньший период времени.

2. Речь, полученная на основе моделей, имеет более искусственное звучание, однако в ней не наблюдаются разрывы, присутствующие при конкатенативном синтезе. Кроме того, при применении технологии Unit Selection качество синтеза существенно ухудшается в случае отсутствия подходящего звукового элемента в базе данных. При применении моделей отсутствующие в обучающей выборке звуковые элементы синтезируются на основе средних значений, максимально приближенных к требуемым, благодаря применению технологии кластеризации контекстов, основанной на деревьях. Это позволяет добиться разборчивости при ограниченном количестве контекстов.
3. Синтез, основанный на моделях, позволяет легко модифицировать характеристики голоса путем применения адаптации/интерполяции диктора, в то время как алгоритм Unit Selection порождает речь, стиль которой не может быть отличен от стиля, представленного в речевом корпусе.

На основе вышеизложенного именно эти два подхода были выбраны для создания гибридной системы, как наиболее гармонично сочетающиеся и компенсирующие недостатки друг друга.

Описание системы

Система синтеза речи, в основе которой лежат скрытые марковские модели (СММ), состоит из двух основных частей:

1. обучение СММ-моделей, которые описывают параметры, полученные из обучающего звукового корпуса, учитывая контекстно-зависимые факторы;
2. составление объединенной СММ-модели, соответствующей синтезируемому тексту, и оценка наиболее вероятных параметров, на основе которых происходит синтез требуемого текста.

На этапе обучения моделей спектральные параметры, параметры функции возбуждения и информация о длительности состояний извлекаются из звуковой базы данных. Далее эти параметры описываются контекстно-зависимыми СММ-моделями для каждого аллофона. Определение контекста аллофона для конкретного языка является неотъемлемой составляющей, напрямую влияющей на качество результатов. Так, для русского языка на основе эмпирического экспертного анализа контекст был определен следующими признаками:

- аллофонные признаки: имена аллофона, стоящего перед предыдущим, предыдущего, текущего, следующего и следующего за следующим; позиция от начала и конца слога;
- слоговые признаки: типы предыдущего, текущего и следующего слогов; количество аллофонов в предыдущем, текущем и следующем слогах; позиция текущего слога в слове и синтагме; количество ударных слогов до и после текущего слога; тип гласной в слоге;
- словные признаки: часть речи предыдущего, текущего и следующего слов; количество слогов в предыдущем, текущем и следующем словах; позиция текущего слова в синтагме;
- синтагматические признаки: количество слогов и слов в синтагме; тип интонационного контура.

Задача алгоритма Unit Selection – выбрать такое множество аллофонов u_1, u_2, \dots, u_n из речевой базы данных, которое бы минимизировало общую стоимость [9] согласно формуле (1).

$$C(u, t) = \sum_{i=1}^n C^t(u_i, t_i) + \sum_{i=2}^n C^c(u_{i-1}, u_i), \quad (1)$$

где n – количество аллофонов в последовательности; t – множество всех аллофонов в базе данных; $C^t(u_i, t_i)$ – стоимость замены элементов; $C^c(u_{i-1}, u_i)$ – стоимость связи элементов.

Стоимость замены для элемента из базы u_i по отношению к искомому элементу t_i вычисляется по формуле (2):

$$C^t(u_i, t_i) = \sum_{k=1}^p w_k^t C_k^t(u_i, t_i), \quad (2)$$

где C_k^t – расстояние между k -ми характеристиками элементов; w_k^t – вес для k -ой характеристики. Другими словами, это есть взвешенная сумма различий в признаках между требуемым элементом и конкретным элементом речевой базы.

Функция стоимости связи двух элементов может быть определена как взвешенная сумма различий в признаках между двумя последовательно выбранными элементами:

$$C^c(u_{i-1}, u_i) = \sum_{k=1}^q w_k^c C_k^c(u_{i-1}, u_i), \quad (3)$$

где C_k^c – расстояние между k -ми характеристиками элементов; w_k^c – вес для k -ой характеристики.

При решении задачи поиска оптимальной последовательности звуковых элементов ключевым является выбор признаков, на основе которых вычисляются функции стоимости. В процессе реализации гибридной системы синтеза речи выбор таких характеристик проводился на основе MOS-оценок качества звучания результирующего сигнала. Таким образом, были выработаны следующие наборы признаков:

- для стоимости замены: длительность аллофона, энергия аллофона, частота основного тона (ЧОТ) (4 точки для ударных, две – для безударных), тип контекстов (соответствие соседних аллофонов элемента из базы его окружению в синтезируемом предложении), тип интонационной модели (повествовательная, вопросительная, восклицательная), позиция аллофона в слове (слове, предложении), тип слога (ударный, безударный);
- для стоимости связи: значение ЧОТ и его производной на границах аллофона, значение энергии и ее производной на границах аллофона, значение мел-частотных кепстральных коэффициентов (MFCC) на границах аллофона, непрерывность фрагмента (искусственное уменьшение веса подряд идущих аллофонов, обеспечивающих синтез требуемого фрагмента текста).

Объединение заключается в следующем. На основе СММ происходит формирование модели голоса диктора, которая в процессе синтеза речи позволяет определить акустические характеристики (ЧОТ и длительность) аллофонов, согласно которым происходит выбор множества элементов из звуковой базы данных. Далее алгоритмом Unit Selection определяется их оптимальная последовательность на основе стоимостной функции.

Идеологически и структурно систему можно разделить на 2 части (рис. 1) подготовка звуковой базы данных и синтез речи.

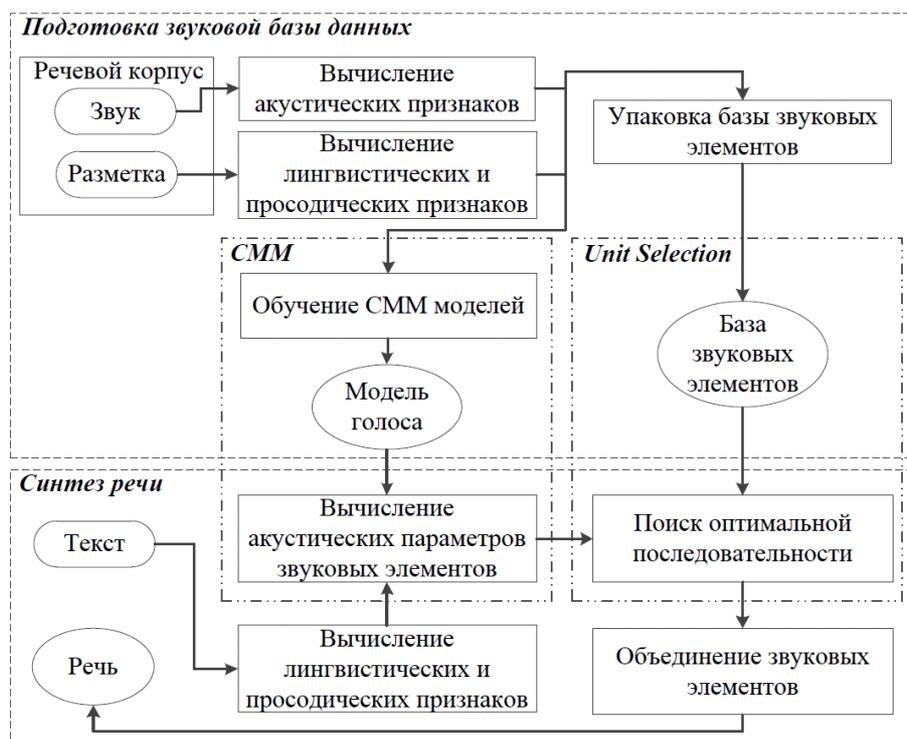


Рис. 1. Общая схема гибридной системы синтеза речи

В основе подготовки звуковой базы данных лежит речевой корпус, состоящий из набора файлов звука, каждый из которых содержит чтение одного предложения, и соответствующего ему набора файлов разметки, каждый из которых содержит подробную информацию о предложении в файле звука [10–13].

Процедура моделирования параметров голоса начинается с генерации набора характеристик для всех звуковых файлов [14, 15]. Каждый такой набор описывает короткий участок сигнала (фрейм) длиной 25 мс. В качестве характеристик автором выбраны следующие параметры.

- Последовательность векторов MFCC-коэффициентов [16], рассчитанных для каждого фрейма, где каждый вектор $\{c_1, \dots, c_K\}$ характеризует спектральную огибающую сигнала; K – общее количество фреймов; количество коэффициентов в каждом векторе равно 25.
- Последовательность значений ЧОТ $\{F_0^1, \dots, F_0^K\}$, включая информацию о том, является ли участок вокализованным или нет (если значение частоты основного тона 0, предполагается, что участок невокализованный).

На следующем шаге происходит вычисление лингвистических и просодических признаков, для каждого аллофона на основе файлов разметки. Далее для каждого аллофона происходит создание прототипов СММ-моделей. Каждая модель имеет N состояний, где переход из каждого возможен только в само себя или в следующее состояние. В разработанном автором методе $N=5$. Каждый выходной вектор наблюдений содержит 4 потока $\bar{o}^i = [\bar{o}_1^{iT}, \bar{o}_2^{iT}, \bar{o}_3^{iT}, \bar{o}_4^{iT}]^T$, где первый поток содержит значения коэффициентов MFCC, их первых и вторых производных, второй поток – значение ЧОТ, третий поток – значение первой производной ЧОТ, четвертый поток – значение второй производной ЧОТ.

Вектор наблюдения \bar{o}^i является выходом состояния n СММ-модели, вероятность которого определяется следующим выражением:

$$\beta_n(\bar{o}^i) = \prod_{j=1}^4 \left[\sum_{l=1}^{R_j} \omega_{njl} N(\bar{o}_j^i; \mu_{njl}, \Sigma_{njl}) \right], \quad (4)$$

где $N(\cdot; \mu, \Sigma)$ определяет гауссово распределение с вектором средних μ и матрицей ковариации Σ , ω_{nl} – вес l -ой компоненты смеси j -го потока выходного вектора состояния n с количеством компонент в смеси, равным R_j . Для каждой k -ой СММ-модели длительность N состояний соответствует вектору $\bar{d}^k = [\bar{d}_1^k, \dots, \bar{d}_N^k]^T$, где \bar{d}^k определяет длительность n -го состояния. Каждый вектор длительностей моделируется N -размерным однокомпонентным гауссовым распределением. Выходные вероятности моделей спектральных параметров (MFCC и ЧОТ) и длительностей переоцениваются на основе алгоритма Баума–Велша [17].

В заключение процесса построения модели голоса выполняется кластеризация состояний СММ-моделей для спектральных характеристик и параметров длительностей на основе деревьев решений. Выполнение данного шага дает возможность получать параметры тех звуковых единиц, которые отсутствуют в обучающем речевом корпусе, что позволяет получать синтезированную речь даже при наличии небольшого количества речевого материала. В результате полученная модель голоса представляет собой $N+1$ различных деревьев: N – для хранения значений ЧОТ, их первой и второй производной и одно – для значений длительностей. Звуковые элементы упаковываются в единую базу данных, обеспечивающую быстрый поиск по целевым характеристикам, таким как имя аллофона, имена аллофонов слева и справа, коэффициенты MFCC на границах, энергия на границах, ЧОТ на границах и длительность аллофона.

Синтез речи выполняется на основе текста, подаваемого на вход системе без какой-либо предварительной ручной обработки. На основе текстовой информации происходит определение аллофонной последовательности для синтеза и вычисление лингвистических и просодических признаков для каждого аллофона, характеризующих их положение в данном предложении. Тип и структура признаков аналогична тем, что вычисляются на этапе подготовки звуковой базы данных. На основе лингвистической и просодической информации производится определение физических признаков каждого аллофона на основе модели голоса. В качестве акустических метрик выступают следующие параметры: частота основного тона (несколько точек на каждый вокализованный аллофон), значение энергии и значение длительности.

Далее происходит выбор групп наиболее подходящих звуковых элементов из базы на основе значений акустических характеристик, вычисленных для каждого аллофона; формирование аллофонной решетки, описывающей синтезируемое предложение, и поиск на ней оптимального пути, т.е. формирование последовательности звуковых элементов. На заключительном шаге происходит объединение выбранной последовательности элементов в единый звуковой поток, на выходе представляющий собой синтезированную речь.

Экспериментальные результаты

На рис. 2 и 3 приведены, соответственно, осциллограммы и спектрограммы для фразы «это очень важно!».

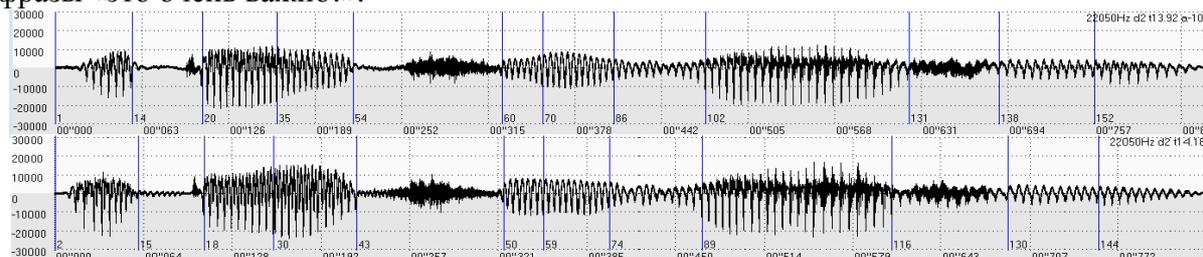


Рис. 2. Осциллограммы фразы «это очень важно!», записанной реальным диктором (сверху) и синтезированной системой (снизу)

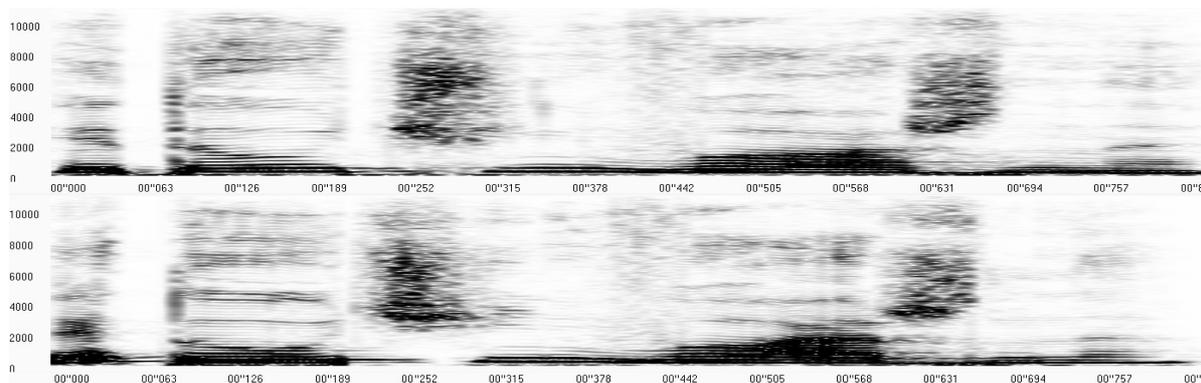


Рис. 3. Спектрограммы фразы «это очень важно!», записанной реальным диктором (сверху) и синтезированной системой (снизу)

На приведенных рисунках в верхней части представлены данные для естественной фразы, записанной реальным диктором, а в нижней – ее синтезированный вариант. Следует отметить, что синтезируемая фраза не была включена в обучающую выборку.

На основе данных диаграмм можно сделать вывод, что синтезированная фраза имеет такие же темпо-ритмические и спектральные характеристики, как и ее эквивалент, произнесенный диктором, что достигается за счет моделирования значений этих характеристик на основе СММ.

В таблице приведены результаты сравнения показателей естественности речи (значения в интервале от 0 до 5, где 5 определяет максимальную оценку естественности) представленной в работе системы с системой на основе метода Unit Selection, лежащей в основе гибридного подхода. Сравнение проводилось пятью экспертами для двух (мужского и женского) голосов, данные в таблице усреднены. Как видно из результатов эксперимента, применение гибридного подхода позволило улучшить показатели естественности синтезированной речи.

Таблица. Показатели естественности систем синтеза

Тип подхода к синтезу		
Unit Selection	Гибридный подход	Естественная речь
4,0	4,3	4,8

Заключение

В ходе проведенных исследований была разработана гибридная система синтеза русской речи по тексту, в основе которой лежат скрытые марковские модели и алгоритм Unit Selection. Результаты испытаний показали, что по показателям естественности звучания данная система является одной из лучших среди систем синтеза на русском языке.

Литература

1. Dines J. Model based trainable speech synthesis and its applications // Ph.D. Thesis, Queensland University of Technology. – Brisbane, Australia. – 2003.
2. Dutoit Th. Introduction au traitement de la parole // Faculte Polytechnique de Mons. – 2002.
3. Stilianou Y. Harmonic plus noise models for speech, combined with statistical methods, for speech and speaker modification // PhD, Ecole Nationale Supérieure des Telecommunications Departement Signal, ENST-Telecom Paris, France. – 1996.

4. Klatt D.H. Review of text-to-speech conversion for English // *Journal of the Acoustical Society of America*. – 1987. – V. 82. – P. 737–793.
5. Tokuda K. HMM-based Speech Synthesis System (HTS). – 2011 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://hts.sp.nitech.ac.jp>, свободн.
6. Huang X., Acero A., Adcock J., Goldsmith J., Liu J. Whistler A Trainable Text-to-Speech System // *Proceedings of the International Conference on Spoken Language Processing*. – Philadelphia, PA. – 1996.
7. Donovan R.E., Eide E.M. The IBM Trainable Speech Synthesis System // *Proceedings ICSLP'98*. – Sydney, Australia. – 1998.
8. Donovan R.E., Ittycheriah A., Franz M., Ramabhadran B., Eide E., Viswanathan M., Bakis R., Hamza W. Current Status of the IBM Trainable Speech Synthesis System // *Proc. ICSLP*. – 2001. – P. 1703–1706.
9. Продан А., Чистиков П., Таланов А. Система подготовки нового голоса для системы синтеза «VITALVOICE» // *Сборник «Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии»*. – 2010. – № 9 (16). – С. 394–399.
10. Смирнова Н., Чистиков П. Программа анализа фонетических статистик в текстах на русском языке и ее использование для решения прикладных задач в области речевых технологий // *Сборник «Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии»*. – 2011. – № 10 (17). – С. 632–643.
11. Чистиков П., Хомицевич О. Автоматическое определение границ предложений в потоковом режиме в системе распознавания русской речи // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана*. – 2011. – Вып. S. – С. 117–125. Спец.вып. Биометрические технологии. - С. 115-123.
12. Chistikov P., Khomitsevich O. On-line automatic sentence boundary detection in a Russian ASR system // *SPECOM 2011 International Conference*. – 2011. – P. 112–117.
13. Чистиков П.Г. Моделирование параметров русской речи в системе синтеза // *Сборник тезисов докладов конгресса молодых ученых, Выпуск 2. Труды молодых ученых*. – СПб: НИУ ИТМО. – 2012. – С. 227–228.
14. Chistikov P., Korolkov E. Data-driven Speech Parameter Generation For Russian Text-to-Speech System // *Сборник «Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии»*. – 2012. – № 11(18). – С. 103–111.
15. Fukada T., Tokuda K., Kobayashi T., Imai S. An adaptive algorithm for mel-cepstral analysis of speech // *Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP)*. – 1992. – P. 137–140.
16. Zen H., Tokuda K., Masuko T., Kobayashi T., Kitamura T. Hidden semi-Markov model based speech synthesis // *Proceedings of the International Conference on Spoken Language Processing (ICSLP)*. – 2004. – P. 1393–1396.
17. Black A.W., Hunt A.J. Unit Selection in a Concatenative Speech Synthesis Using a Large Speech Database // *Proceedings of ICASSP 96*. – Atlanta, Georgia. – 1996. – V. 1. – P. 373–376.

ВИТАМИН В₁₂ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ ПРОДУКТ ДЛЯ ПРЕДПРИЯТИЙ ЦЕНТРАЛИЗОВАННОЙ УТИЛИЗАЦИИ МОЛОЧНОЙ СЫВОРОТКИ

Б.С. Шершенков

Научный руководитель – к.т.н., доцент Е.П. Сучкова

Рассмотрено решение проблемы обеспечения населения и животноводческих хозяйств витамином В₁₂ путем утилизации молочной сыворотки с использованием возбудителей пропионовокислого брожения, способы стандартизации и модификации молочной сыворотки, как питательной среды с целью получения постоянного максимального выхода витамина, а также замена существующих методов получения и анализа витамина В₁₂ на более безопасные с целью их применения на предприятиях молочной промышленности.

Утилизация молочной сыворотки является одной из основных проблем молочной промышленности России. Сыворотка содержит около 50% сухих веществ молока и также имеет высокую биологическую и энергетическую ценность за счет содержания высокоценных сывороточных белков и лактозы, но из-за необходимости применения высокзатратных технологий глубокой переработки для придания ей потребительской ценности лишь небольшое количество предприятий выпускает продукты на ее основе. Подавляющее большинство предприятий рассматривает сыворотку как отходы производства, что ведет к снижению эффективности переработки молока и биологическому загрязнению окружающей среды [1].

При рациональном использовании молочной сыворотки можно решить следующие задачи: снижение потерь ценного сырья, реализация дополнительной товарной продукции без увеличения объема заготавливаемого молока, а также повышение экологической безопасности за счет снижения показателя биологической потребности в кислороде сточных вод предприятий отрасли и, как следствие, затрат на их очистку [2].

Проблема экономически-рациональной переработки молочной сыворотки на российских предприятиях может быть решена с помощью создания централизованного производства, на которое транспортируется сыворотка со всех заводов, находящихся в регионе (строительство специализированного завода), или централизованного производства на одном из существующих крупнотоннажных заводов, где производится наибольшее количество сыворотки и на которое будет транспортироваться сыворотка со всех остальных предприятий.

При этом возможна организация дополнительных технологических участков для сгущения или мембранного концентрирования сыворотки на каждом отдельном заводе или на крупном предприятии, куда будет свозиться натуральная сыворотка. А также дальнейшая транспортировка концентрированных сывороточных продуктов в центр переработки, где будет производиться ее унификация по составу путем деминерализации и депротеинизации с целью дальнейшей переработки с использованием биотехнологических методов [3].

Одним из таких методов является микробиологическая биоконверсия лактозы, с помощью которой можно получать продукты брожения различных микроорганизмов, например, молочную, пропионовую и уксусную кислоты, этиловый спирт, рибофлавин и витамин В₁₂ [4].

Витамин В₁₂ (цианкобаламин) – важное биологическое соединение, активный кроветворный фактор млекопитающих, а также ростовой фактор для многих видов микроорганизмов и животных.

Недостаток витамина В₁₂ в рационе приводит к анемии. Он широко используется как добавка в производстве комбикормов, а также при лечении цирроза печени и различных нервных и психических расстройств.

Витамин В₁₂ необходим для нормального функционирования организма, он воздействует на кроветворную функцию и на обмен белков, принимает участие в регуляции оптимального содержания в организме животного метионина, валина, треонина, лейцина, изолейцина [5].

Главная особенность витамина В₁₂ заключается в том, что он синтезируется исключительно микроорганизмами. Молекула витамина состоит из двух частей – кобальтосодержащей (порфириноподобной) и нуклеотидной (содержащей 5,6-диметилбензимидазол). Химический синтез витамина В₁₂ отличается большой сложностью и затратностью, поэтому в настоящее время витамин В₁₂ в промышленности получают исключительно биосинтетическим путем [6].

Помимо витамина В₁₂ микроорганизмами могут образовываться его производные: окси-, хлоро-, сульфато-, нитритоксобаламины, не уступающие по своей клинической активности цианкобаламину, и неактивные для человека и животных «псевдовитамины», характеризующиеся тем, что в нуклеотидной части молекулы вместо 5,6-диметилбензимидазола содержатся различные пурины. Наибольший интерес при промышленном синтезе витамина представляют пропионовокислые бактерии (*Propionibacterium shermanii*), так как они синтезируют исключительно истинный витамин В₁₂, обладающий высокой биологической активностью, а также хорошо сбраживают лактозу, благодаря чему активно развиваются в молочной сыворотке [7].

Для определения наиболее оптимального состава сыворотки и режимов сбраживания молочной сыворотки пропионовокислыми бактериями с целью получения максимального выхода продукта был проведен обзор литературы, а также ряд исследований.

Температурные границы развития бактерий довольно широки и в значительной степени зависят от вида и состава среды. Оптимальная температура культивирования составляет 30±2°C, минимальная температура роста 10°C, максимальная – до 58°C; при этом молодые клетки более чувствительны к высоким температурам, чем старые.

Оптимальная величина рН роста пропионовокислых бактерий составляет 6,9–7,0; максимальная – 8,0; минимальная – 5,0 [7].

С целью унификации состава сыворотки, как питательной среды, а также экономии ресурсов, времени обработки, производственных площадей, наиболее целесообразно проводить депротеинизацию, а при необходимости – деминерализацию, и затем частичное сгущение молочной сыворотки перед сбраживанием. При этом степень сгущения сыворотки должна быть максимальной, но в качестве культуральной среды сыворотка должна создавать невысокое осмотическое давление и не должна обладать свойствами, значительно отличающимися от натуральной сыворотки.

В результате проведенных опытов и литературного обзора [4, 5, 7, 8] был выбран наиболее оптимальный состав подсгущенной молочной сыворотки: содержание лактозы не менее 13%, содержание минеральных солей не более 1,5%, содержания белка не более 0,5%; общее содержание сухих веществ порядка 15%.

При этом важно использование прогрессивных методов депротеинизации сыворотки с целью сохранения нативных свойств сывороточных белков с целью их дальнейшего использования в тонкой переработке, таких как мембранное концентрирование и других.

Для ускорения роста бактерий в среду также необходимо добавлять небольшие количества солей Fe, Mn и Mg и Co, а также различные источники азота [5].

В результате исследования наиболее перспективным дополнительным источником небелкового азота признан белковый гидролизат сывороточных белков, для приготовления которого был использован протеолитический ферментный препарат на основе панкреатина благодаря высокой скорости гидролиза и повышению выхода витамина.

Практические исследования проводились в лаборатории кафедры ТМиПБ НИУ ИТМО ИХиБТ. Целью исследований являлось определение оптимальных условий культивирования чистой культуры пропионовокислых бактерий и совместного их культивирования с уксуснокислыми бактериями на различных питательных средах на основе концентрированной молочной сыворотки для получения витамина В₁₂ и его аналогов, а также внедрение более безопасных методов количественного определения и выделения витамина для их применения в условиях пищевых производств.

В качестве продуцентов витамина для культивирования был выбран чистый штамм ВКПМ В-4891 *Propionibacterium freudenreichii* subsp. *shermanii* I-63, а в качестве симбиотической культуры штамм ВКПМ В-2021 *Acetobacter aceti* РД-10.

Для приготовления питательной среды была использована восстановленная сухая сыворотка с содержанием лактозы 13,5%, осветленная термическим методом ($98 \pm 2^\circ\text{C}$ в течение 60 мин) с добавлением 0,01% MgSO_4 и 0,02% CoSO_4 . В образец № 3 также было добавлено 0,01% $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ в качестве азотсодержащей добавки. Культивирование производилось согласно рекомендациям [7].

Стабилизации витамина по общепринятому методу с использованием цианидов не проводилось, так как использование опасных и высокотоксичных соединений в условиях пищевого производства недопустимо; использовались щадящие режимы термической деструкции клеток для высвобождения накопившегося в них витамина.

Для количественного определения вместо традиционного метода фенольной экстракции, предполагающего работу с другим высокотоксичным веществом – фенолом, был предложен фотометрический метод определения накопления кобаламинов в ультрафильтрах (УФ) сброженной сыворотки (рисунок).

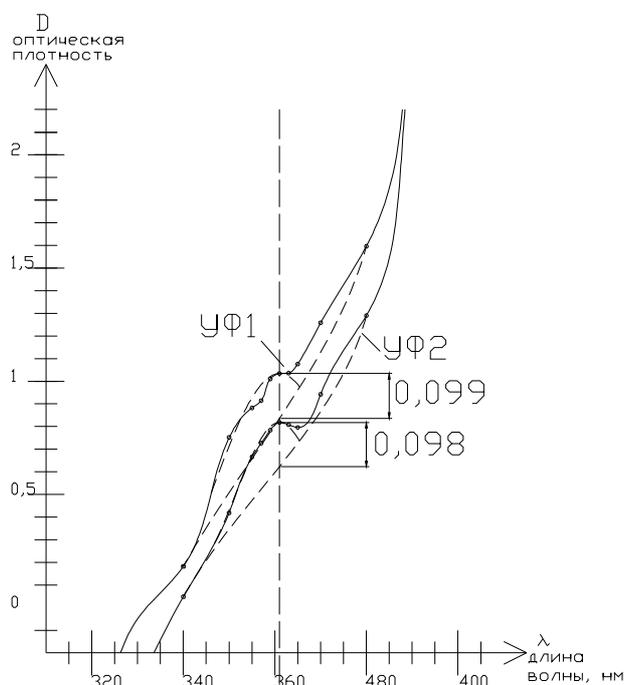


Рисунок. Графическое определение степени поглощения УФ сброженной сыворотки при длине волны 361 нм по принципу аддитивности

Производилось фотометрирование препарата цианкобаламина и УФ образцов сброженной и несброженной сыворотки в диапазоне длин волн 310–600 нм, в качестве раствора сравнения использовалась бидистиллированная вода [9].

При максимуме поглощения – 361 нм, что соответствует максимуму поглощения корринового кольца [6], были профотометрированы препараты витамина различной концентрации и построен калибровочный график, по которому была определена приблизительная концентрация устойчивых кобаламинов в УФ образцов.

Для первого образца она составляет 6,03 мг/л среды, для второго – 5,97 мг/л среды в пересчете на цианкобаламин.

Таким образом, также выяснено, что в концентрированных средах размножение уксуснокислых бактерий и их влияние на накопление витамина минимально. Также подтверждено, что внесение неорганических азотсодержащих добавок в концентрированные среды малоэффективно, а в концентрациях 0,1 мг/мл ингибирует развитие бактерий; определены базовые режимы культивации пропионовокислых бактерий на средах на основе сгущенной молочной сыворотки.

Так как стабилизация витамина цианистыми соединениями недопустима в условиях пищевого производства, необходимо использование других способов деструкции клеток, например ультразвуковой деструкции, с помощью которой можно проводить высвобождение витамина из клеток с минимальным влиянием на его молекулы [10], что является приоритетным направлением дальнейших исследований.

В настоящее время также производится определение точности предложенного метода определения витамина В₁₂ путем его сравнения с общепринятыми методами. Исследуются возможности применения получившегося витаминизированного сывороточного продукта и возможное использование его в качестве витаминной добавки для производства различных традиционных молочных продуктов, хлебобулочных изделий и других обогащенных продуктов питания, а также в кормовых целях [8].

Литература

1. Евдокимов И.А., Храмцов А.Г., Нестеренко П.Г. Современное состояние переработки молочной сыворотки // Молочная промышленность. – 2008. – № 11. – С. 36–40.
2. Волкова Т.А., Кравченко Э.Ф. И снова о сыворотке // Молочная промышленность. – 2008. – № 12. – С. 34–37.
3. Евдокимов И.А. Стратегия переработки молочной сыворотки в отечественных условиях // Переработка молока. – 2009. – № 4. – С. 38–40.
4. Храмцов А.Г., Павлов В.А., Нестеренко П.Г. и др. Переработка и использование молочной сыворотки. – М.: Росагропромиздат, 1989. – 271 с.
5. Мосин О.В. Микробиологический синтез витамина В₁₂ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://samlib.ru/o/oleg_w_m/, свободн.
6. Березовский В.М. Химия витаминов. – М.: Пищевая промышленность, 1973. – 632 с.
7. Залашко М.В. Биотехнология переработки молочной сыворотки. – М.: Агропромиздат, 1990. – 192 с.
8. Крусъ Г.Н., Храмцов А. Г. и др. Технология молока и молочных продуктов. – М.: КолосС, 2006. – 456 с.
9. Долгов В.В., Ованесов Е.Н., Щетникович К.А. Фотометрия в лабораторной практике. – М.: Российская медицинская академия последипломного образования, 2004. – 142 с.
10. Акоюн В.Б., Ершов Ю.А. Основы взаимодействия ультразвука с биологическими объектами. – М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, 2005. – 224 с.

СОДЕРЖАНИЕ

Абдуллин А.А. Автоматизированный синтез алгоритма управления прецизионного следящего электропривода с упругой связью.....	3
Андреев Ю.С. Исследование влияния микрогеометрии на функциональные свойства деталей приборов	7
Балакшин П.В., Садовников Е.А. Использование системы распознавания речи при анализе работы телефонной службы поддержки	11
Баля В.К. Микрооптические элементы для защищенной печати.....	16
Блинова И.В. (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), Гусаров В.В. (Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)), Попов И.Ю. (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики). Каталитическая активность и нерегулярная примесь на поверхности наночастицы	21
Бужинский И.П. Построение автоматов с непрерывными выходными воздействиями по обучающим примерам	26
Буздалова А.С. Выбор функции приспособленности особой эволюционного алгоритма с помощью обучения с подкреплением	32
Булгакова В.Г. Трехмерная литография в объемных полимерных материалах.....	37
Вавулин Д.Н. Исследование размеров нанонеоднородностей в поглощающих и рассеивающих средах	42
Симовский К.Р., Ворошилов П.М., Гужва М.Е. (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), Мориц Д.К. (Университет Аалто, Финляндия). Повышение эффективности тонкопленочных солнечных элементов за счет оптических наноантенн	44
Громова Ю.А. Спектрально-люминесцентные свойства квантовых точек CdSe/ZnS в пористом стекле.....	50
Ежова К.В. Анализ влияния центрального экранирования входного зрачка на функцию передачи модуляции оптической системы.....	53
Ежова В.В. Разработка основ композиции и параметрического синтеза оптических систем современных приборов гражданского и специального назначения	57
Ефимчик Е.А. Технология RLCP-совместимых виртуальных лабораторий	61
Левичев В.В., Жуков М.В., Мухин И.С., Денисюк А.И., Голубок А.О. Устойчивость работы сканирующего силового микроскопа при использовании зонда с нановискером.....	66
Забодалова Л.А., Иванова О.В. (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), Новинюк Л.В. (ГУ ВНИИ пищевых ароматизаторов, кислот и красителей Россельхозакадемии). Исследование влияния пищевой добавки глюконо-дельта-лактон на качество творога	72
Идрисов Э.Г. Нелинейное поглощение ультракоротких импульсов света в твердых телах в условиях многофотонных резонансов	77
Казакова Д.С. Обеспечение информационной безопасности в кредитной организации путем моделирования и оценки перегрузок в информационных автоматизированных системах.....	83
Капитанова П.В., Масловский С.А., Шадривов И.В., Белов П.А., Кившарь Ю.С. Магнитные метаматериалы, перестраиваемые при помощи света.....	86
Колюбин С.А. Адаптивное гибридное управление существенно нелинейными системами	91
Копыльцова С.Е. Разработка экологической декларации продукции детского питания на основе оценки жизненного цикла	97

Косульников С.Ю., Янковская Е.А. Исследование коэффициентов отражения и прохождения для массива металлических проводов в зависимости от их радиуса.....	103
Краснок А.Е. Оптические антенны на основе диэлектрических наночастиц: концепция и экспериментальная верификация.....	108
Кузнецова О.В. Рекомендации по применению методики 3D-моделирования печатной платы в Altium Designer.....	114
Кузнецова Л.М. (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), Доморощенкова М.Л., Демьяненко Т.Ф. (Государственное научное учреждение Всероссийский научно-исследовательский институт жиров Российской академии сельскохозяйственных наук). Ферментативная биоконверсия полисахаридов муки люпина и ее применение при получении белковых концентратов из растительного сырья.....	119
Лапшов С.Н. Оптические свойства щелоков и рефрактометрические средства контроля процессов регенерации в сульфатном производстве целлюлозы.....	125
Литвин А.П. Исследование параметров люминесценции полупроводниковых квантовых точек ближнего инфракрасного диапазона.....	131
Лихолетова (Яицкая) Е.С. Коррекция искажений произвольной кратности систематических кодов на основе квазисиндромов в алгоритмической среде рекуррентного декодирования в темпе канального времени.....	138
Ловлин С.Ю. Разработка алгоритмов эффективного управления прецизионными электроприводами комплексов высокоточных наблюдений.....	144
Мартыненко И.В. Фотофизические свойства комплексов полупроводниковых квантовых точек и молекул хлорина еб.....	152
Мельчакова И.В., Слобожанюк А.П., Козаченко А.В. Суперлинзы на основе предельно анизотропных метаматериалов для улучшения функциональных характеристик магнитно-резонансных томографов.....	156
Одинцова Г.В. Лазерно-индуцированное изменение оптических свойств поверхности металлов.....	161
Пантелеев А.В., Чивилихин С.А. Исследование химического синтеза коллоидного золота и происходящих при нем цветовых превращений.....	166
Перечесова А.Д. Анализ и синтез механизма для плетения торсионных подвесов приборов.....	172
Подшивалов А.В., Зуев В.В. (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), Бронников С.В. (Институт высокомолекулярных соединений РАН). Термодинамический анализ процессов фазового разделения в смеси несовместимых полимеров.....	182
Попов С.О., Олейников А.О., Пигасов Н.Ю., Золов П.Д., Черный Е.В. Сбор, передача, хранение и распространение данных с различных приборов учета.....	187
Правдин К.В. Явно решаемые модели в задачах о метаматериалах.....	191
Резников С.С. Основы построения эволюционной модели процесса изнашивания зубчатого зацепления.....	198
Самохвалов А.А. Лазерная очистка шероховатых и профилированных поверхностей.....	202
Семерханов И.А. Интеграция распределенных компьютерных систем на основе онтологии.....	208
Семьина С.А. Исследование влияния наночастиц SiO ₂ на самоорганизацию в ультрафиолет-полимеризуемых нанокомпозитах.....	212
Синев Д.А. Исследование локального лазерного окисления тонких пленок хрома.....	217
Слобожанюк А.П. Нелинейные спиральные метаматериалы.....	220
Созинова Е.Н. Модификация метода экспертных оценок для прогнозирования в области информационной безопасности.....	223
Сотникова А.А. Секретность протоколов квантовой криптографии на одиночных	

фотонах	230
Субботин Д.А. Поиск оптимальных структур и разработка алгоритмов управления реверсивным электромеханическим разветвляющим устройством на примере электропривода сканирующей оси телескопа	235
Трифанов А.И. Дискретная модель детектора квантовой моды с учетом процессов рассеяния фотонов в резонаторе	241
Трифанова Е.С. Модель квантовых графов для ароматических соединений.....	245
Трофимова А.С. Применение углеродной маркировки в международных инициативах по снижению выбросов парниковых газов.....	250
Ульянцев В.И. Метод построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы на основе решения задачи удовлетворения ограничений.....	256
Филатов И.В. Автоматизированная лексико-семантическая система обучения понятиям ...	261
Филонов Д.С., Краснок А.Е., Слобжанюк А.П., Капитанова П.В., Кившарь Ю.С., Белов П.А. Экспериментальная проверка концепции диэлектрической наноантенны	267
Царев Ф.Н. Построение управляющих конечных автоматов по тестам на основе генетического программирования	273
Цветкова М.Х. Синтез следящего электропривода оси телескопа с эталонной моделью в контуре угла	278
Чивилихин Д.С., Ульянцев В.И. Построение детерминированных конечных автоматов по зашумленным обучающим наборам с помощью алгоритма оптимизации муравьиной колонии	285
Чистиков П.Г. Технология синтеза русской речи на основе объединения скрытых марковских моделей и алгоритма Unit Selection	292
Шершенков Б.С. Витамин В ₁₂ как перспективный продукт для предприятий централизованной утилизации молочной сыворотки	299

**НАУЧНЫЕ РАБОТЫ
УЧАСТНИКОВ КОНКУРСА
«МОЛОДЫЕ УЧЕНЫЕ НИУ ИТМО»
2012 ГОДА**

В авторской редакции
Редакционно-издательский отдел НИУ ИТМО
Зав. РИО
Лицензия ИД № 00408 от 05.11.99
Подписано к печати 25.03.13
Заказ № 2976
Тираж 100 экз.
Отпечатано на ризографе

Н.Ф. Гусарова