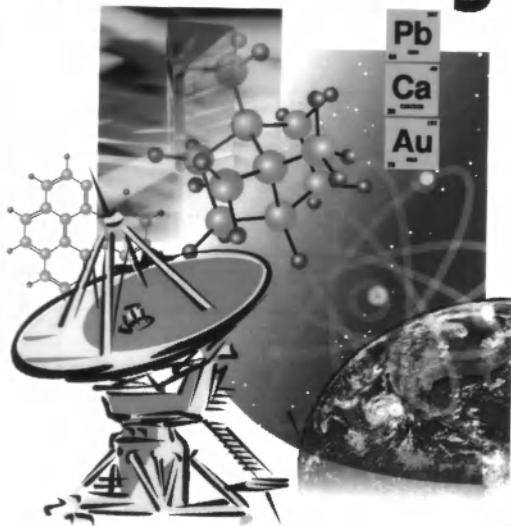


НАУКОВИЙ ВІСНИК

Волинського
національного
університету
імені Лесі Українки

ISSN 1729-360X

Фізичні науки



18. 2008

Третяк А. П., Божко В. В., Булатецька Л. В., Сачанюк В. П., Новосад О. В., Булатецький В. В.	
Електричні та фотоелектричні властивості сплавів $AgCd_{2-x}Mn_xGaSe_4$	49
Федосов А. В., Луцьов С. В., Захарчук Д. А., Тимошук В. С., Федосов С. А.	
Визначення швидкості зміщення глибоких енергетичних рівнів у монокристалах кремнію при одновісній пружній деформації	54
Khyzhun O. Yu., Izvekov A. V., Sinelnichenko A. K., Kolyagin V. A.	
Electronic Structure of Layered Compounds Based on Tantalum and Vanadium Carbides as Studied by X-ray Spectroscopy Methods	58

РОЗДІЛ II. ТЕОРЕТИЧНА ФІЗИКА

Острей С. В.	
Організація зворотного зв'язку в системах моделювання	66
Трохимчук П. П.	
Проблема насиченості збудження в квантовій електроніці та релаксаційній оптиці	72
Шваліковський Д. М.	
Інтеграл руху зарядженої частинки у кеплерівському потенціалі при фоновому магнітному полі	82

РОЗДІЛ III. ІСТОРІЯ ФІЗИКИ

Калануша Л. Р.	
Внесок учених-фізиків у розвиток навчального процесу	87

РОЗДІЛ II

Теоретична фізика

УДК 681.3

С. В. Острей – старший викладач кафедри прикладної математики Волинського національного університету імені Лесі Українки

Організація зворотного зв'язку в системах моделювання

Роботу виконано на кафедрі прикладної математики ВНУ ім. Лесі Українки

Зворотний зв'язок у системах моделювання дає змогу корегувати поведінку моделі залежно від набору вхідних параметрів. Правильно організована класифікація параметрів системи може бути основою для подачі рекомендацій щодо корегування моделі. Запропонована в статті схема зв'язку є узагальненням технологій, котрі використовуються в сучасних системах моделювання.

Ключові слова: система, параметри, модель, схема, реалізація, програма, експеримент, аналіз.

Острей С. В. Организация обратной связи в системах моделирования. В системах моделирования обратная связь разрешает управлять поведением модели в зависимости от набора вводных параметров. Правильно организованная классификация параметров может стать основой к последующим рекомендациям относительно коррекции модели. Предложенная в статье схема связи – это обобщение технологий, которые используются в современных системах моделирования.

Ключевые слова: система, параметры, модель, схема, реализация, программа, эксперимент, анализ.

Ostrey S. V. Organization of Feedback in Simulation Systems. In simulation systems the feedback permits governing the behavior of model depending on the set of the introductory parameters. The correctly organized classification of the parameters can become basis to the subsequent recommendations relative to the correction of model. The proposed in the article diagram of connection is generalization of the technologies, which are used in the contemporary systems of the simulation.

Key words: system, parameters, model, chart, realization, program, experiment, analysis.

Домовленості:

1. Модель має математичний вираз, але не обов'язково подана в явному вигляді.
2. Існує незмінне число параметрів, котрі використовуються в моделі.
3. Параметри моделі можуть бути зміненими на будь-якому етапі роботи моделі.
4. Вхідні параметри системи моделювання є незалежними. Незалежність визначається можливістю одночасного вимірювання кожного з параметрів.
5. Вимірювання параметрів не впливають на їх значення.
6. Параметрами можна вважати числові величини, котрі використовуються в математичній моделі, та характеристики самої моделі. До характеристик моделі можна віднести її тип, наявність відхилень від класичної моделі, характер взаємозв'язку з іншими моделями та взаємозв'язку між параметрами всередині моделі.
7. Зворотний зв'язок визначається як миттєва корекція схеми обробки даних у моделі при виникненні такої необхідності.

Постановка наукової проблеми та її значення

Опис предметної області. Більшість сучасних досліджень базується на математичних моделях. Сама модель може бути сформульована у вигляді виразу або системи виразів, котрі встановлюють зв'язки між аргументами. Аргументи моделі є кількісними характеристиками окремих властивостей

та явищ або описують деяку сукупність властивостей, виявити яку можливо лише за допомогою непрямих вимірювань¹. Такі аргументи є вхідними даними в системі моделювання. Системи моделювання можуть бути реалізовані за допомогою існуючих програмних комплексів² або розроблені виключно для даної моделі. В обох випадках постає проблема оптимального підбору початкових даних. Надалі весь набір вхідної інформації, взятої з математичним наповненням моделі, називатимемо характеристиками³ моделі. Набір даних без формул, що їх пов'язують, назвемо параметрами моделі.

Постановка задачі. Нехай маємо множину параметрів системи. Множина є скінченною.

1. Потрібно встановити вплив параметрів та їх груп на кінцевий результат.

2. Визначити критичні на даному етапі роботи параметри.

3. Встановити відповідність між параметрами, що аналізуються, та оцінками моделі.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. Очевидно, що на кінцевий результат значною мірою впливають характеристики моделі. Оптимальний вибір характеристик, котрі будуть давати правильний результат, назвемо правдивим⁴. Основна проблема при створенні програмного комплексу, що моделює певне явище, є підбір правдивих характеристик та оцінка їх впливу на кінцевий результат. Особливу увагу при виборі характеристик слід приділяти параметрам, зміна яких приводить до значних змін у вихідних характеристиках математичної моделі⁵. Такі параметри можуть значною мірою спотворити результат роботи програми. Для мінімізації впливу потрібно визначити правила зміни їх значень (крок дискретизації [1; 2]). **Завданням нашої роботи** буде розробка системи, котра формулює рекомендації щодо вибору характеристик моделі та змінює їх в процесі моделювання [2].

У загальному випадку швидкість зміни характеристики F протягом чисельного експерименту має бути різною. Чим більше змінюються певні вихідні параметри $F = \{f_i\}$, тим частіше мають змінюватися вхідні параметри $x = \{x_i\}$. Таку залежність можна описати як зворотний зв'язок у системі моделювання. Багато систем загального призначення мають засоби до організації такого зв'язку. В спеціалізованих системах для моделювання зворотний зв'язок присутній не завжди [3]. Вбудовані засоби зворотного зв'язку не надають можливості визначати параметри, за якими цей зв'язок відбувається. В загальному випадку швидкість зміни характеристик від вхідних параметрів є похідна $\frac{dF}{dx}$. У системах, де вхідних параметрів є більше ніж один (багатокомпонентна система),

звичайна похідна замінюється на частинну $\nabla F = \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial x_i}$ [4]. Увівши поняття швидкості зміни параметрів системи, можна встановити і прискорення їх зміни. Прискорення зростання характеристики⁶ системи є друга похідна від характеристик системи по вхідних параметрах $\frac{d^2F}{dx^2}$. Для багато-

компонентних систем $\Delta F = \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j^2}$. За умови правдивого набору вхідних параметрів усі змішані

¹ Таким набором можна вважати вимірювання коефіцієнтів в'язкості речовини, дифузії та оптичної проникності, котрі визначаються лише за допомогою вимірювань зв'язаних з ними величин.

² Прикладом такого комплексу може бути MathCad, Maple, MathLab та інші.

³ Характеристики є ключовими елементами в схемі зворотного зв'язку. За їх допомогою можна будувати систему обміну повідомленнями, де окремим характеристикам буде відведена роль транзитних зон, через які передаються повідомлення між блоками системи моделювання.

⁴ Термін "правдивий набір" можна використовувати лише тоді, коли результат роботи моделі узгоджується з реальними показниками. Для більшості фізичних експериментів узгодженість може мати умовний характер. Така ситуація зумовлена наявністю допусків та похибок, як при проведенні експерименту (дослідженні явища), так і при математичній обробці його результатів.

⁵ Залежність характеристики від вхідних даних може проявлятися, коли існує прямий (явний) механізм взаємодії між ними. Цей механізм може відобразитись у математичній моделі, що описує характеристику і входить у формулу для її отримання.

⁶ Термін "прискорення" є умовним і може описувати лише зміну зміни характеристики.

похідні, в яких $i \neq j$, будуть обертаються на 0, оскільки вхідні параметри є незалежними [5, 24]. Попереднє визначення прискорення зміни характеристик дає можливість судити про характер вихідних характеристик системи. Точки $\{x_i^{\Delta}\}$, в яких ΔF обертається на нуль, є точками зміни прискорення росту вихідних даних. Точки $\{x_j^{\nabla}\}$, в яких ∇F перетворюється на нуль, є точками екстремуму вихідної характеристики. Помістивши множину точок $x^{extr} = x_j^{\Delta} \cup x_i^{\nabla}$ на вісь і визначивши значення характеристики $F^{extr} = \{f_i(x_i^{extr})\}$, можна отримати перелік ключових точок характеристики системи [6, 156]. Усі точки x^{extr} повинні мати деякі околи, в межах яких обчислення проводяться з підвищеною точністю. Розміри околів мають залежати від кутового коефіцієнта проекції дотичної площини в даній точці на вісь, по якій відраховується параметр¹. Чим більше значення коефіцієнта, тим менший окіл екстремальної точки можна вибирати.

Множина значень параметрів, з якими вихідна характеристика системи набуває екстремальних значень, дає межі для області допустимих значень системи. Ця область використовується при відображенні результатів роботи моделі [2; 3]. При моделюванні також слід враховувати можливість встановлення ширших меж визначення моделі, ніж пропонує система зворотного зв'язку².

Схема роботи системи зі зворотним зв'язком. Опис роботи програмного комплексу можна подати за допомогою рис. 1. Ця схема демонструє циклічний процес обчислення деякої моделі. Процес є ускладненим за рахунок включення додаткових блоків обробки даних.



Рис. 1. Загальна схема роботи системи зі зворотним зв'язком

- **Вхідні дані** мають містити не лише дані для обробки, а й параметри механізму обробки даних. Такими параметрами є рахівники циклу, кроки дискретизації та типи вихідних даних. Керуючись такими даними, модель може уточнювати процес обробки даних.
- **Блок поточної обробки даних** містить опис математичної моделі з відкритими для доступу³ числовими параметрами. В ідеальному випадку цей блок може містити кілька математичних моделей, а вибір однієї з них виконується з урахуванням вхідних даних. Кожній моделі присвоюється певне значення-індекс. Вибір моделі відбувається на етапі корегування даних.
- **Проміжні дані для корекції** використовуються для тимчасового зберігання даних і для ведення статистики⁴ роботи моделі.

¹ Такий спосіб визначення околу дозволить ефективно використовувати ресурси обчислювальної системи, не навантажуючи її додатковою роботою на області визначення математичної моделі з помірною швидкістю росту.

² Пропозиція щодо встановлення меж визначення математичної моделі формується на основі обчислень x^{extr} , а також їх околів. Вихідні числові характеристики, котрі повинні обчислюватися за межами околів x^{extr} , обробляються в системі не будуть. Їх замінять апроксимовані сполучення, котрі визначатимуться на етапі корегування вхідних характеристик системи моделювання.

³ Відкритість параметрів вказує на можливість їх зміни на етапі поза обробкою в математичні моделі.

⁴ Статистика ведеться для отримання проміжних, ще не скорегованих системою результатів моделювання. Вони теж можуть бути корисними для оцінки стабільності роботи програмного комплексу та визначення ступеня впливу зворотного зв'язку на математичну модель.

- **Блок аналізу даних** має містити схему для подачі рекомендацій до корекції даних. Сама схема включає аналіз зміни величин на основі кількох минулих етапів роботи. Наприклад, величина, що швидко змінюється, може вказувати на наявність розриву 1-го роду або на значний вплив інших параметрів. Термін “швидко” має своє числове значення, котре обчислюється як ΔF в екстремальній точці.
- **Проміжні дані** використовуються для переведення їх у множину вхідних даних системи. Таке переведення може відбуватися з використанням спеціалізованого типізованого файлу. Цей підхід дозволить мати вільний доступ до усіх етапів роботи системи.
- **Корекція параметрів системи** використовується для зміни вхідних даних. Параметрами для корекції будуть значення ідентифікатора схеми моделювання¹.

Виправлення ідентифікатора дає можливість уточнити схему обробки даних. Для уточнення схема зворотного зв'язку містить перелік моделей і відповідних їм характеристик. Очевидно, різні способи обчислення математичної залежності між параметрами дають результат із різним ступенем наближення до реальних даних. Точність результату залежить від правильності вибору моделі обчислень². Сама модель обчислень має бути реалізована у вигляді модуля зі стандартним інтерфейсом, що полегшить її заміну.

Схема роботи блоків аналізу та корекції має вигляд, показаний на рис. 2.

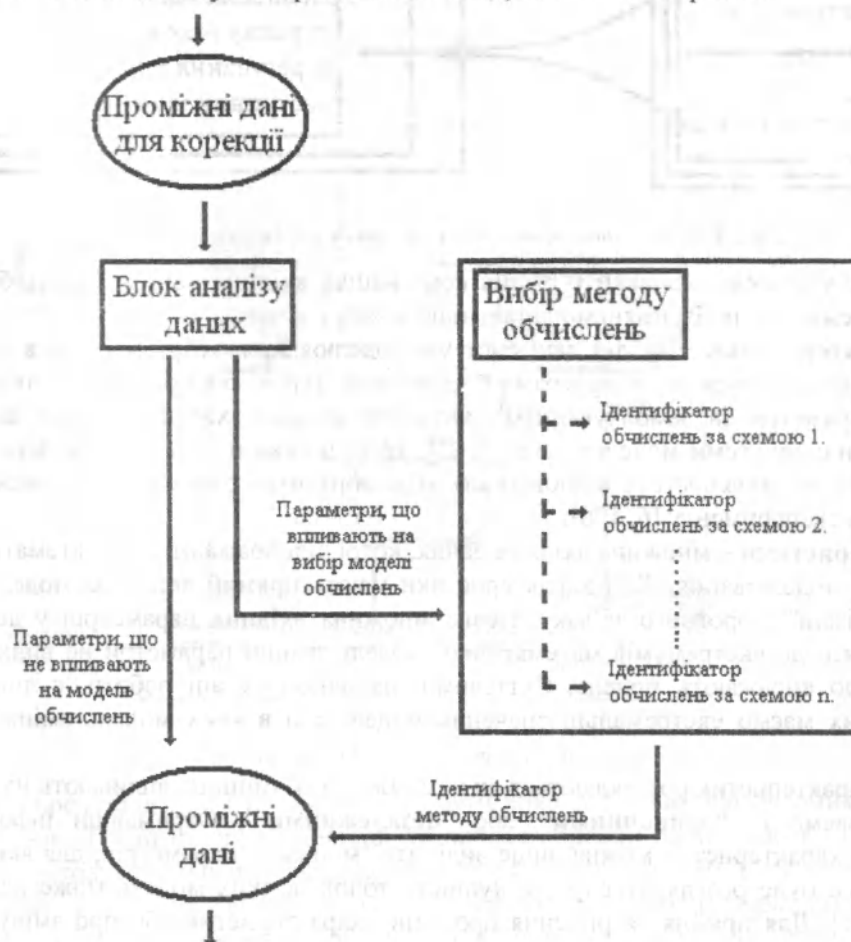


Рис. 2. Схема роботи блоку корекції параметрів

Усі параметри системи будемо розглядати як об'єкти, котрі мають числове вираження. На деякому етапі роботи моделі³ проводиться аналіз параметрів. Аналіз є підставою для корегування

¹ Детальний опис параметрів, котрі впливатимуть на вибір методу математичної обробки вхідних характеристик, може бути поданий лише після вказання моделі, котра буде виконуватись у програмному комплексі.

² Проблема вибору зводиться до пошуку правдивих вхідних характеристик системи.

³ В певному випадку після кожного циклу.

вхідних даних. Корекція може стосуватися як окремих характеристик, так і груп вхідних даних. Робота аналізатора може бути реалізована в кілька етапів. На рис. 3 показано відповідність між групами даних та рівнями подачі висновків. Кожен зв'язок між блоком характеристик і блоком висновків – це окремий процес. Процес виконує пошук відповідності та рекомендацій у базі знань або зіставлення певних даних.

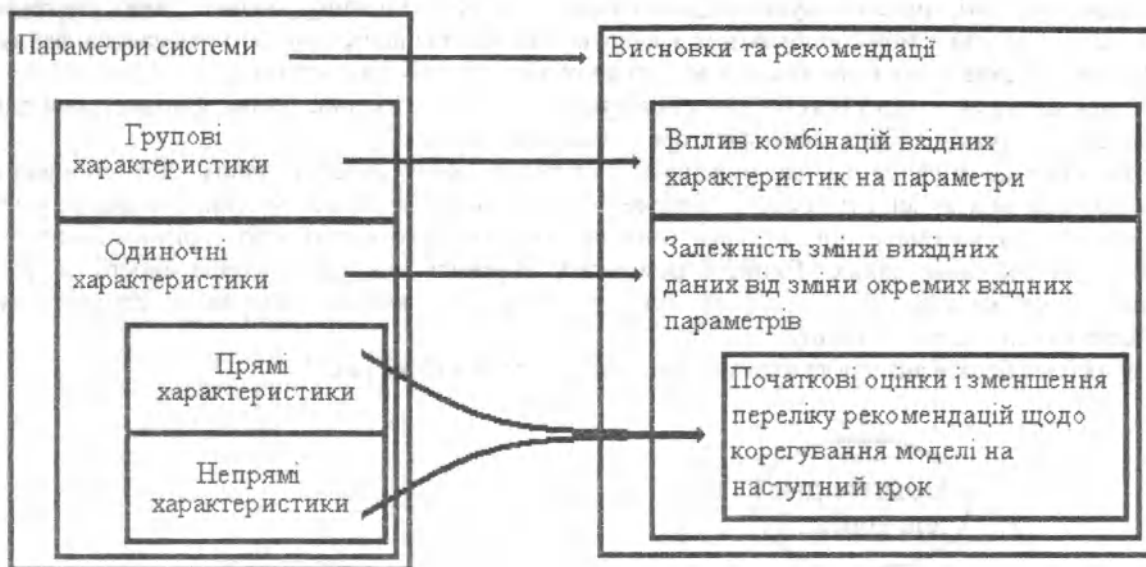


Рис. 3. Відповідність між параметрами та висновками

Відповідність є умовною, оскільки у різних комбінаціях вхідних даних можуть бути відсутні характеристики окремих видів. Розглянемо детальніше кожен елемент:

Непрямі характеристики – вхідні дані системи моделювання, котрі відсутні в математичній моделі, але використовуються в її програмній реалізації (крок дискретизації, точність, метод наближення) як параметри за замовчуванням¹. Оскільки непрямі характеристики впливають на операційне середовище системи моделювання [7, 22], то їх оцінка проводиться в першу чергу. На даному етапі роботи встановлюється відповідність між обраними точками сітки дискретизації та ключовими точками експерименту [6, 170].

Прямі характеристики – множина вхідних даних, котрі відображаються в математичній моделі як опис параметрів моделювання. Такі характеристики мають прямий вплив на модель, а, отже, є основою для організації зворотного зв'язку. Певна множина вхідних параметрів у деяких вузлах сітки може приводити до екстремумів математичної моделі² а інші параметри не впливатимуть на приріст функцій, що виражають модель. Суттєвими, на даному етапі роботи, є лише множини параметрів, для яких маємо екстремальні значення моделі або в яких модель змінює швидкість приросту.

Обидва типи характеристик розглядаються як незалежні, і їх зміни не впливають на зміну інших характеристик. Назвемо їх "одиначними", або "незалежними"³. Отримавши інформацію про перелік незалежних характеристик можна лише виділити множини параметрів, для яких необхідна зміна. Дана множина буде розглядатися як сукупність точок, в яких модель може не відповідати фізичному явищу [1]. Для прийняття рішення про зміну характеристик або про зміну чисельного методу обрахунку моделі інформації недостатньо.

У реалізації моделі процесу беруть участь багато даних, котрі можуть впливати на результат як окремі незалежні компоненти. Не варто виключати і можливого збігу деяких значень вхідних характеристик, котрі можуть значною мірою змінити результат, даючи швидке зростання похиб-

¹ Такі параметри можуть бути змінені програмістом до або під час моделювання.

² Екстремуми можуть бути як локальні, так і глобальні.

³ Групові характеристики використовуються під час опису великого числа моделей фізичних та економічних процесів.

ки [5, 16]. Такі характеристики назвемо **груповими**. В сучасних системах моделювання групових характеристик позбуваються, переходячи до безрозмірних величин у моделях. Такий метод добре працює для задач групи A^1 , де математична модель є обґрунтованою [5, 11]. Для задач групи B^2 потрібно проводити аналіз комбінацій характеристик. Точки, в яких математична модель перебуває в деякому околі екстремуму (особливо, коли маємо загальний екстремум), а також значення вихідних характеристик у цих точках використовуються для отримання висновку про необхідність зміни параметрів обчислення або чисельного методу реалізації моделі. Відповідне рішення приймається після порівняння, отриманого у результаті використання чисельного методу вихідних даних із деякою контрольною множиною даних. Наявність контрольної множини вимагає від користувача системи зі зворотним зв'язком знання проміжних наборів даних, які дають уявлення про допустимі межі значень характеристик моделі в околах точок порівняння.

Узагальнюючи вище описане, можна сказати, що програмний комплекс, котрий працюватиме за заданими схемами, може бути реалізований у сучасних системах програмування з використанням об'єктно орієнтованих методів програмування. На рис. 4 показано варіант виконання програмного комплексу, в якому можна побачити три файлових сховища даних та п'ять процесів. Кожне сховище виконано у вигляді окремого файлу, що дає можливість отримувати доступ до даних за допомогою вбудованих в операційну систему операцій файлової системи.

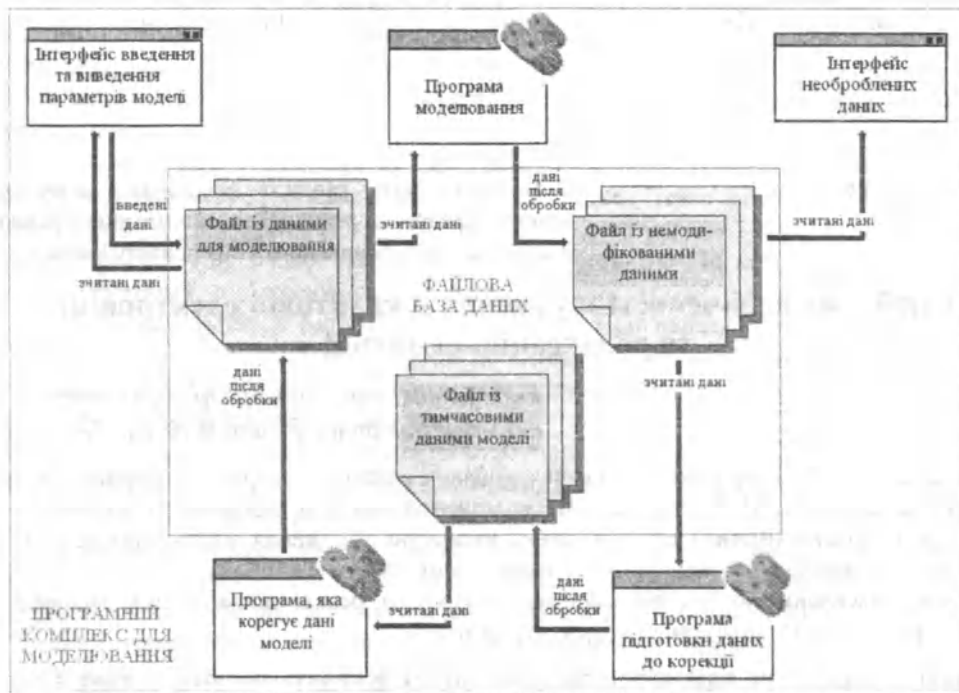


Рис. 4. Компонентна модель реалізації системи моделювання

Програми, що представлені на рис. 4, можуть бути виконані у вигляді окремих, взаємодіючих паралельних процесів. Такий підхід пришвидшить процес обробки даних і дозволить у довільний момент часу використовувати наявну інформацію. Інтерфейси теж мають бути виконані у вигляді окремих процесів, що дають змогу використовувати їх у довільний момент ітерації процесу.

Висновки. Запропонована схема зворотного зв'язку може покращити процес моделювання лише за умови наявності чіткого механізму підбору математичної моделі. Для створення такого механізму потрібно розробити систему опису моделі. Система опису повинна включати можливість подання інформації як про типи даних, що в ній використовуються, так і надавати можливість описувати математичні вирази. Така система може бути представлена у вигляді спеціалізованої мови

¹ Проблеми теплопровідності, ламінарні течії, прості пограничні турбулентні шари та інші явища, для яких розроблено математичні моделі й обґрунтовано межі застосування.

² Складні турбулентні течії, течії деяких ньютонівських рідин, утворення окису азоту при турбулентному горінні та інші явища, для яких немає обґрунтованих математичних моделей.

опису. Наявність мови опису приведе до включення в систему компонента, котрий буде проводити лексичний, синтаксичний та семантичний аналіз описів моделей і сам генеруватиме їх описи після етапів корекції.

Література

1. Ostrey S. V., Ostrey O. R. System of differential equation us a model of physical process // Second International Workgroup "Relaxed, Nonlinear and Acoustic, Optical Processes Materials-Growth and Optical Properties" RNAOPM'2005 MATERIALS. Lutsk; Shatsk, June 01-05, 2005. – Lutsk, 2005. – P. 53.
2. Дьяконов В. П. Справочник по MathCAD 6.0 Plus Pro. – М.: СК Пресс, 1997. – 336 с.
3. Дьяконов В. П., Абраменкова И. В. MathCAD7.0 в математике, физике и Internet. – М.: Изд-во Нолидж, 1998. – 352 с.
4. Острей С. В. Комп'ютерне моделювання процесів релаксаційної оптики // Вісн. НТУ України. – К.: НТУ, 2003. – № 40. – С. 50–58.
5. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152 с.
6. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
7. Гордеев А. В., Молчанов А. Ю. Системное программное обеспечение. – СПб.: Питер, 2001. – 736 с.

Адреса для листування:
Луцьк, вул. Кравчука, 36/414.

Статтю подано до редколегії
08.12.2008 р.

УДК 539.104:532.311.33:621.315.5

П. П. Трохимчук – кандидат фізико-математичних наук,
доцент кафедри теоретичної та математичної фізики
Волинського національного університету імені Лесі Українки

Проблема насиченості збудження в квантовій електроніці та релаксаційній оптиці

*Роботу виконано на кафедрі теоретичної
та математичної фізики ВНУ ім. Лесі Українки*

У роботі показано, що багатофотонне збудження в області власного поглинання твердих тіл приводить до незворотних змін середовища. Наведено результати моделювання цих процесів із використанням теорії каскадних процесів та фізико-хімічних методів оцінки насичення збудження відповідних зв'язків. Отримано задовільний збіг експериментальних результатів та теоретичних оцінок.

Ключові слова: насичення збудження, квантова електроніка, релаксаційна оптика, двовимірна решітка, каскадні функції, прямий метод, антимонід індію, телурид кадмію.

Трохимчук П. П. Проблема насыщения возбуждения в квантовой электронике и релаксационной оптике. В работе показано, что многофотонное возбуждение в области собственного поглощения твердых тел приводит к необратимым изменениям среды. Приведены результаты моделирования этих процессов с использованием теории каскадных процессов и физико-химических методов оценки насыщения возбуждения соответствующей связи. Получено удовлетворительное совпадение экспериментальных результатов и теоретических оценок.

Ключевые слова: насыщение возбуждения, квантовая электроника, релаксационная оптика, двумерная решетка, каскадная функция, прямой метод, антимонид индия, телурид кадмия.

Trokhimchuck P. P. Problem of Saturation of Excitation in Quantum Electronics and Relaxation Optics. It is shown that multiphoton excitation in range of self-absorption of solids leads to the irreversible changes in irradiated materials. The results of modeling of these processes with the use of theory of cascade functions and physical and chemical methods of estimations the saturation of excitation of the proper chemical bonds are represented. The satisfactory coincidence of experimental results and theoretical estimations is got.

Key words: saturation of excitation, quantum electronics, relaxation optics, two-dimensional lattice, cascade function, direct method, indium antimonide, cadmium telluride.