

Реализация моделей второго типа требует привлечения дополнительных инструментов и элементов программирования, например VBA. При этом довольно просто моделируются физические процессы в динамике, например, при изучении колебаний и волн.

Модели третьего типа создаются в тех случаях, когда требуется большая точность расчетов или особый тип визуализации. При этом необходимо самим построить как физическую, так и математическую модель, а также обеспечить управление (интерактивный интерфейс) и вывод результатов расчетов в наглядной форме (визуализация). Для разработки таких моделей нами использованы системы программирования: Visual Basic и Delphi.

В качестве примера рассмотрим модель электрического поля нескольких зарядов. В этой задаче требуется по известному положению зарядов, их величине и знаку построить силовые и эквипотенциальные линии электрического поля. Математическая модель довольно сложна и сводится к решению системы дифференциальных уравнений. Такую модель очень трудно реализовать программными средствами общего назначения, например Excel. Нами разработан конструктор моделей "Поле системы зарядов" в системе Visual Basic. Реализация этой задачи в системе Delphi аналогична. В заключение отметим, что разные среды программирования отличаются подходами и несколько разными средствами для создания моделей, однако использование дополнительных библиотек практически стирает границы между ними.

НЕЙРОСЕТЕВАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

П.В. Назаров, Е.В. Макарова

Научный руководитель – д.ф.-м. н., профессор *В.В. Ананасович*
Белорусский государственный университет

Задача определения неизвестных параметров различных экспериментальных систем является одной из основополагающих во многих областях науки. Важнейший этап при этом – адекватный анализ экспериментальных данных. Однако из-за сложности проведения анализа доступных данных, на практике зачастую приходится прибегать к упрощенной трактовке эмпирической информации и фокусировке на отдельных интегральных значениях. Особенно остро данная проблематика характерна для изучения фотофизических процессов в биомолекулярных образованиях при исследовании их флуоресцентными методами [1]. Таким образом, возникает проблема адекватного анализа данных флуоресцентного эксперимента.

Одним из наиболее перспективных методов интерпретации экспериментальных данных оптической спектроскопии, является метод имитационного моделирования [2]. Для построения имитационной модели сложной системы достаточно обладать информацией об элементарных процессах, происходящих в ней, и иметь представление о структуре системы, тогда как стандартное математическое моделирование предполагает наличие полного аналитического описания поведения системы и знание законов распределения всех стохастических параметров, что редко осуществимо на практике. В то же время, определение параметров систем с помощью имитационного моделирования затруднено, поскольку сопряжено со значительными вычислительными затратами. Как правило, идентификация системы осуществляется путем аппроксимации экспериментальных данных результатами моделирования, при этом используются стандартные методы многопараметрической оптимизации [3]. Очевидно, что в этом случае число пусков моделирования совпадает или даже превосходит число вычислений функции невязок. Во многих случаях высокие временные затраты не позволяют применять такой подход для идентификации систем. Поэтому, актуальной является разработка методов и алгоритмов, позволяющих снизить вычислительные и временные затраты при определении параметров систем с помощью статистического моделирования.

Для решения этой проблемы была предложена методика замены имитационной модели искусственной нейронной сетью (ИНС), т.е. моделью типа "черного ящика". При этом искомые и варьируемые в эксперименте параметры выступают в качестве входов такой модели, а аппроксимирующие данные – в качестве выходов. До начала анализа ИНС обучается задаче аппроксимации имитационной модели. Для этого генерируется репрезентативная выборка

входных параметров модели и соответствующих им выходов. Сеть обучается стандартным методом обратного распространения ошибки [4].

Нейросетевая аппроксимация имитационной модели позволяет значительно ускорить процесс моделирования. Кроме того, результатом работы ИНС является гладкая функция, значительно снижающая стохастические девиации выходной функции, возникающие при имитационном моделировании. Предложенный алгоритм анализа данных был применен на практике для идентификации процессов переноса энергии в системах мембранных протеинов. В качестве ИНС использовался трехслойный перцептрон [4]. В результате было получено ускорение процесса на этапе анализа в среднем в 10^4 раза.

Литература

1. Lakowicz J.R. Principles of fluorescence spectroscopy. Kluwer Academic/Plenum Publishers: New York, 1999.
2. Andrews L.; Demidov A. Resonance Energy Transfer. John Wiley & Sons Ltd Inc: New York, 1999.
3. Yatskou M.M.; Donker H.; Koehorst R.B.M.; van Hoek A.; Schaafsma T.J. Energy transfer processes in zinc porphyrin films studied by time-resolved fluorescence spectroscopy and Monte Carlo simulations // Chem. Phys. Lett. –2001.- V. 345.- p. 141–150.
4. Уоссермен Ф. Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика. -М.: Мир, 1992.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ БЫСТРОЗАТВЕРДЕВШИХ ФОЛЬГ СПЛАВОВ АЛЮМИНИЯ С ПЕРЕХОДНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

Е.Ю. Неумержицкая

Научный руководитель – доктор ф.-м.н. *В.Г. Шепелевич*
Белорусский государственный университет

При сверхбыстрой закалке из жидкой фазы достигается значительное увеличение растворимости легирующих элементов в матрице, формируется микрокристаллическая структура, возможно образование мелкодисперсных выделений метастабильных и стабильных фаз, что существенно влияет на физико-механические свойства материалов. Известно, что равновесная растворимость переходных элементов в алюминии очень низкая, что ограничивает их использование в качестве легирующих элементов при получении сплавов традиционными технологиями. В связи с этим в данной работе представляются результаты исследования структуры быстрозатвердевших фольг сплавов систем алюминий-железо, алюминий-кобальт и алюминий-никель.

Быстрозатвердевшие фольги сплавов Al-Fe, содержащие 0,25...2,0 ат. % Fe; Al-Co, содержащие 0,3...2,4 ат. % Co и Al-Ni, содержащие 0,15...1,2 ат. % Ni были получены инъецированием капли расплава ($\approx 0,2$ г) на внутреннюю полированную поверхность вращающегося медного цилиндра, где и происходила кристаллизация. Линейная скорость поверхности цилиндра 15 м/с. Для исследования использовались фольги толщиной 30 ... 80 мкм. Скорость охлаждения жидкости при получении фольги такой толщины $\approx 10^6$ К/с. Рентгеноструктурные исследования быстрозатвердевших фольг выполнены на дифрактометре ДРОН-3 в медном излучении. Для проведения металлографического анализа использовался ПМТ-3.

Быстрозатвердевшие фольги сплавов Al-Fe, Al-Co, Al-Ni имеют микрокристаллическую структуру. Средний размер зерна составляет несколько микрон и уменьшается с увеличением концентрации легирующего компонента в сплавах.

Зерна в фольге имеют преимущественную ориентировку. В таблице приведены значения полюсных плотностей дифракционных линий исследуемых сплавов, полученных сверхбыстрой закалкой из жидкой фазы. Как видно из таблицы, наибольшим значением полюсной плотности