

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 инжектированием 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

Сплав	Дифракционные линии					
	111	200	220	311	331	420
Al - 0,15 ат. % Ni	3,1	0,5	0,6	0,6	0,6	0,6
Al - 0,25 ат. % Fe	2,0	0,7	1,0	0,8	0,7	0,8
Al - 0,3 ат. % Co	3,3	0,7	0,6	0,7	0,3	0,4

характеризуется дифракционная линия 111 для всех исследуемых сплавов. Также известно, что при сильно неравновесных условиях получения пленок алюминия и его сплавов образуется текстура (111), а не текстура (100), которая формируется в массивных слитках при условии кристаллизации, близких к равновесным.

Рентгеноструктурные исследования показали, что основной фазой быстрозатвердевших фольг сплавов алюминий-железо, является твердый раствор на основе алюминия. Также наблюдались дифракционные отражения интерметаллического соединения Al₃Ni. Для быстрозатвердевших фольг сплавов алюминий-кобальт и алюминий-железо дополнительных дифракционных отражений, не принадлежащих алюминию, на дифрактограмме не было обнаружено.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДЕФОРМАЦИИ НА СТРУКТУРУ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ С ЗАНЯТЫМИ И ВАКАНТНЫМИ УЗЛАМИ

Д.А. Павленко, Е.В. Фарафонтова

Научный руководитель – д.ф.-м. н., профессор *И.И. Наркевич*
Белорусский государственный технологический университет

Теоретическое исследование структурных, механических и термодинамических свойств одномерной статистической модели растяжения-сжатия молекулярного кристалла основывается на общих результатах, полученных при разработке двухуровневого [1] молекулярно-статистического описания неоднородных сред, которое состоит в одновременном использовании методов коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (метод ББГКИ), метода условных коррелятивных функций Л.А. Ротта и метода термодинамических функционалов. Эти методы являются независимыми с точки зрения их исходных принципов и поэтому они лежат в основе двух вполне самостоятельных статистических направлений современной физики. Методы коррелятивных функций используются преимущественно при описании однородных систем, в теории объёмных свойств жидкостей, широко известен метод интегральных уравнений, а метод термодинамических функционалов, предполагающий решение соответствующих вариационных задач, привлекается для изучения неоднородных систем, например, в гетерогенных системах с плоской или сферической поверхностями раздела фаз.

Отличительной особенностью развиваемого подхода является естественное для разрабатываемого статистического направления преобразование, в результате которого все коррелятивные функции конденсированной среды представляются в виде произведения двух функций. Одна из них описывает микрораспределение частиц в элементарных ячейках, на которые мысленно разделён объём V (метод условных распределений), и при замыкании подвергается аппроксимации по методу потенциалов средних сил. Другая часть, описывающая усреднённое по микроячейкам распределение частиц среды, является нормировочным множителем для функций первого типа, она описывает поле неоднородного распределения плотности в системе.

В развиваемом статистическом подходе при решении задач теории упругости учитывается, что в модифицированном методе условных распределений [1, 2] весь объём V