

ОБЗОРНАЯ СТАТЬЯ

Фотоника и оптоинформатика в Европе: тренды 2003–2013

ФОТНИКА И ОПТОИНФОРМАТИКА

Двумерная локализация атомных населенностей в четырехуровневых квантовых системах

Рекуррентный алгоритм обработки интерферометрических сигналов на основе мультиоблачной модели предсказания
Исследование биологических объектов в оптической когерентной томографии с обработкой данных последовательным методом Монте-Карло

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

Метод автоматической калибровки стереоскопической системы

Метод повышения качества снимков космических объектов

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

Робастное регулирование систем с полиномиальной нелинейностью на примере быстрых термических процессов

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Наноструктурирование как способ повышения эффективности термоэлектриков

Спектрально-люминесцентные свойства ионов хрома в наностеклокерамиках на основе форстерита

Спектрально-люминесцентные свойства фторофосфатных стекол, активированных иттербием и эрбием

Оптимизация параметров металл-диэлектрических наноструктур для сенсорных применений

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Применение HLD-методологии для проектирования реконфигурируемых встраиваемых систем

Технология синтеза естественной речи с использованием базы данных небольшого объема

Определение клипированных фрагментов в акустических сигналах
Двухуровневый метод иерархическо-координационного обслуживания очередей на узлах телекоммуникационной сети

Метод поиска повторяющихся фрагментов текста в технической документации

Методика оценки эффективности системы менеджмента информационной безопасности по времени реакции системы на инциденты информационной безопасности
Идентификация движущегося человека в системах видеонаблюдения

ТЕХНИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

Применение мультисенсорной системы для анализа горькости препаратов китайской народной медицины

Определение погрешности бесконтактного измерения площади дефектов на поверхностях сложной формы при видеозендоскопическом контроле
Сравнительный анализ систем запаса энергии и определение оптимальных областей применения современных супермаховиков

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Многосеточный метод ускорения сходимости при решении задач газовой динамики на неструктурированных сетках

Расширение тензорного произведения операторов на примере оператора Дирака
Молекулярно-динамическое моделирование пептидных полиэлектролитов

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Идентификация параметров нелинейной математической модели быстрых термических процессов

Стафеев С.К., Лившиц И.Л., Ольшеская А.В., Жогина В.А., Денисова Е.А., Маркина Г.Л., Urbach H.Paul 1

Ефремова Е.А., Гордеев М.Ю., Рождественский Ю.В. 12
Волынский М.А., Гуров И.П., Скаков П.С. 18

Скаков П.С., Волынский М.А., Гуров И.П., Ермолаев П.А. 23

Коротаев В.В., Краснящих А.В., Ярышев С.Н., Нгуен Х.В. 29

Алтухов А.И., Коршунов Д.С., Шабаков Е.И. 35

Капитонов А.А., Арановский С.В., Ортега Р. 41

Булат Л.П., Бочков Л.В., Нефедова И.А., Ахыска Р. 48

Асеев В.А., Жуков С.Н., Кулешов Н.В., Курильчик С.В., Мудрый А.В., Никоноров Н.В., Рохмин А.С., Ясюкевич А.С. 57

Зайцева С.В., Асеев В.А., Колобкова Е.В., Никоноров Н.В. 62

Егоров В.И., Звягин И.В., Карпенко Е.Д., Клюкин Д.А., Сидоров А.И. 69

Ключев А.О., Кустарев П.В., Палташев Т.Т., Платунов А.Е. 74

Чистиков П.Г., Таланов А.О., Захаров Д.С., Соломенник А.И. 83

Алейник С.В., Матвеев Ю.Н., Шолохов А.В. 91
Семеняка М.В. 98

Луцив Д.В., Кознов Д.В., Басит Х.А., Ли О.Е., Смирнов М.Н., Романовский К.Ю. 106

Шаго Ф.Н. 115

Соломатин А.Ю., Люберт А.С., Зикратов И.А. 124

Ярошенко И.С., Кирсанов Д.О., Легин А.В., Ванг П., Ха Д., Ван Х., Ван Х., Хе Ю. 132

Горевой А.В., Мачихин А.С., Перфилов А.М. 140

Соколов М.А., Томасов В.С., Jastrzebski R.P. 149

Волков К.Н. 156

Бойцев А.А., Нейдхардт Х., Попов И.Ю. 164
Неелов И.М., Мистонова А.А., Хватов А.Ю., Безродный В.В. 169

Капитонов А.А., Арановский С.В. 176

Главный редактор – В.О. Никифоров¹, д.т.н., профессор

МЕЖДУНАРОДНЫЙ РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Denis Efimov, HDR, charge de recherche 1ere grade, Institut national de recherche en informatique et en automatique, Villeneuve-d'Ascq, France

Yurii Gun'ko, PhD, Professor, School of Chemistry, Trinity College Dublin, Dublin, Ireland

Yuri Kivshar, FAA, Distinguished Professor, Australian National University, Canberra, Australia

Ilya Kolmanovsky, PhD, Full Professor, University of Michigan, Ann Arbor, USA

Konstantin R. Simovski, Dr. Sci. Full Professor, Aalto University, Aalto, Finland

Peter Sloot, PhD, Professor, University of Amsterdam, Amsterdam, Netherlands

Mart Tamre, Doctor's Degree, Professor, Tallinn University of Technology, Tallinn, Estonia

Tatiana Timofeeva, PhD, Associate Professor, New Mexico Highlands University, Las Vegas, USA

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

А.А. Бобцов¹, д.т.н., профессор

А.В. Бухановский¹, д.т.н.

Ю.А. Гатчин¹, д.т.н., профессор

Н.Ф. Гусарова¹, к.т.н., с.н.с. (редактор)

Н.С. Кармановский¹, к.т.н., доцент
(заместитель главного редактора)

Ю.Л. Колесников¹, д. ф.-м.н., профессор

С.А. Козлов¹, д.ф.-м.н., профессор

А.Г. Коробейников², д.т.н., профессор

Л.С. Лисицына¹, д.т.н., профессор

В.Г. Мельников¹, д.т.н., доцент

Н.В. Никоноров¹, д.т.н., профессор

А.А. Ожиганов¹, д.т.н., профессор

Н.Н. Розанов³, д.ф.-м.н., профессор, чл.-корр. РАН

И.Г. Сидоркина⁴, д.т.н., профессор

О.А. Степанов⁶, д.т.н., профессор

А.А. Шальто¹, д.т.н., профессор

Ю.Г. Якушенков⁵, д.т.н., профессор

Ответственный секретарь – Г.О. Артемова¹, к.т.н.

¹ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова Российской академии наук (СПбФ ИЗМИРАН), Санкт-Петербург, Россия

³ ОАО «Государственный оптический институт (ГОИ) им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, Россия

⁴ Поволжский государственный технологический университет, Йошкар-Ола, Россия

⁵ Московский государственный университет геодезии и картографии (МИИГАиК), Москва, Россия

⁶ ОАО «Концерн «ЦНИИ «Электроприбор», Санкт-Петербург, Россия

Журнал издается Университетом ИТМО с 2001 года как периодическое научное и научно-образовательное издание.

Прежние названия журнала: «Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного института точной механики и оптики (технического университета)» – до 11 выпуска 2003 года; «Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики» – с 12 выпуска 2004 года по 76 выпуск 2011 года.

Издание зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (свидетельство ПИ ФС77-47243 от 10 ноября 2011 года).

ISSN 2226-1494

Англоязычное название: «Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics».

Транслитерированное название: «Nauchno-Tekhnicheskii Vestnik Informatsionnykh Tekhnologii, Mekhaniki i Optiki».

Журнал включен в каталог периодических изданий Ulrich's Periodical Directory.

Журнал входит в утвержденный Высшей Аттестационной комиссией «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук».

Периодичность издания – 6 выпусков в год.

Плата за публикации не взимается.

Адрес: 197101, Россия, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49, Университет ИТМО, оф. 330

Телефон/факс (812) 233 45 51 <http://ntv.ifmo.ru> e-mail: karmanov@mail.ifmo.ru

Подписано к печати 01.07.2014 Тираж 350 экз. Заказ № 40(92)

Отпечатано в учреждении «Университетские телекоммуникации»
Адрес: 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

РЕДАКЦИОННАЯ ПОЛИТИКА

Редакция принимает к рассмотрению оригинальные, нигде ранее не опубликованные (за исключением материалов научных конференций) работы по тематике журнала, представляющие новые научные результаты, полученные лично авторами статьи. Публикуются также обзоры, характеризующие современное состояние актуальных направлений развития науки и техники, сообщения о научных конференциях, материалы научных дискуссий и рецензии на новые книги.

Тематика журнала включает разделы, отражающие достижения науки, техники и технологии по направлениям:

- фотоника и оптоинформатика (Photonics and Optoinformatics),
- оптические системы и технологии (Optical Engineering),
- автоматическое управление и робототехника (Automatic Control and Robotics),
- новые материалы и нанотехнологии (Material Science and Nanotechnologies),
- компьютерные системы, информационные технологии (Computer Science),
- технические системы и технологии (Engineering and Technologies),
- математическое и компьютерное моделирование (Modeling and Simulation),
- информационные технологии в образовании (Information Technologies in Education).

Представленные для публикации авторские материалы должны соответствовать следующим требованиям: актуальность темы, научная новизна исследования, оригинальность исследовательской проблемы и примененных методов исследования, высокая научная и практическая значимость полученных результатов.

Редакция в своей текущей деятельности руководствуется принципами журнальной этики (подробно см. <http://ntv.ifmo.ru>). Редакция самостоятельно принимает решение о порядке и сроках опубликования статей, исходя из их научной значимости, тематики каждого выпуска, качества предварительной подготовки рукописей.

Все статьи проходят процедуру рецензирования. После ее завершения автору направляется письменный текст рецензии и экземпляр рукописи с замечаниями рецензента и научного редактора для доработки. При опубликовании статьи указываются даты ее поступления и последующих переработок.

Редакция вправе отказать в публикации статьи на основании результатов рецензирования, несоответствия материала статьи тематике журнала, а также при неудовлетворительном качестве оформления представленных материалов.

Журнал публикует как полнотекстовые статьи, так и краткие сообщения.

Полнотекстовая статья должна иметь четкую структуру, включающую в себя аннотацию, ключевые слова, введение, несколько содержательных разделов и заключение.

В аннотации, рассчитанной на самый широкий круг читателей, необходимо в объеме **150-250** слов в форме краткого реферата изложить научное содержание статьи: предмет, цель работы, метод или методология проведения работы, краткое описание эксперимента, полученные результаты, рекомендации по их применению.

Во введении необходимо представить содержательную постановку рассматриваемого вопроса, провести краткий анализ известных из научной литературы решений (со ссылками на источники), дать критику их недостатков, показать научную новизну и преимущество (особенности) предлагаемого подхода.

В основном тексте статьи должна быть представлена строгая постановка решаемой задачи, изложены и обстоятельно разъяснены (доказаны) полученные утверждения и выводы, приведены результаты экспериментальных исследований или математического моделирования, иллюстрирующие сделанные утверждения. Основной текст статьи должен быть разбит на содержательные разделы.

В заключении необходимо кратко сформулировать основные результаты, прокомментировать их и, если возможно, указать направления дальнейших исследований и области применения.

Максимальный объем полнотекстовой статьи – 8 страниц машинописного текста (с рисунками и таблицами), шрифт 12 pt, один интервал.

Статья в форме краткого сообщения предназначена для того, чтобы в сжатые сроки и кратко информировать научное сообщество о новых научных результатах, полученных автором. Объем краткого сообщения – до 3 страниц, шрифт 12 pt, один интервал. Объем аннотации 50-100 слов. Рубрикация текста не требуется.

Пристатейный список литературы должен составлять, как правило, для обзорной статьи – не менее 50, для полнотекстовой статьи – не менее 15, для краткого сообщения – не менее 8 литературных источников (не менее половины из них должны составлять ссылки на издания, включенные в международные базы цитирования Scopus и Web of Science).

SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL

OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS

JULY-AUGUST 2014

NUMBER 4 (92)

ISSN 2226-1494

NAUCHNO-TEKHNICHESKII VESTNIK INFORMATSIONNYKH TEKHOLOGII, MEKHANIKI I OPTIKI



REVIEW ARTICLE

Photonics and optical informatics in Europe: trends of 2003–2013

S.K. Stafeev, I.L. Livshits, A.V. Ol'shevskaya, V.A. Zhogina, E.A. Denisova, G.L. Markina, H. Paul Urbach 1

PHOTONICS AND OPTOINFORMATICS

Two-dimensional localization of atomic populations in four-level quantum systems

The recurrent algorithm for interferometric signals processing

based on multi-cloud prediction model

Investigation of biological objects in optical coherence tomography with data processing

by sequential Monte Carlo method

E.A. Efremova, M.Yu. Gordeev, Yu.V. Rozhdestvensky, M.A. Volynsky, I.P. Gurov, P.S. Skakov 12

P.S. Skakov, M.A. Volynsky, I.P. Gurov, P.A. Ermolaev 23

OPTICAL ENGINEERING

Automatic calibration method for stereoscopic system

Method of image quality enhancement for space objects

V.V. Korotaev, A.V. Krasnyaschikh, S.N. Yaryshev, H.V. Nguyen 29

A.I. Altukhov, D.S. Korshunov, E.I. Shabakov 35

AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS

Robust regulation for systems with polynomial nonlinearity applied to rapid thermal processes

A.A. Kapitonov, S.V. Aranovskiy, R. Ortega 41

MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

Nanostructuring as a way for thermoelectric efficiency improvement

Spectral and luminescent properties of chromium ions in forsterite-like nano-glass ceramics

Spectral and luminescent properties of fluorophosphate glasses doped with ytterbium and erbium

Parameters optimization of metal-dielectric nanostructures for sensor applications

L.P. Bulat, L.V. Bochkov, I.A. Nefedova, R. Ahiska, V.A. Aseev, S.N. Zhukov, N.V. Kuleshov, S.V. Kurilchik, A.V. Mudriy, N.V. Nikonorov, A.S. Rokhmin, A.S. Yasyukevich 48

S.V. Zaytseva, V.A. Aseev, E.V. Kolobkova, N.V. Nikonorov 57

S.V. Zaytseva, V.A. Aseev, E.V. Kolobkova, N.V. Nikonorov 62

V.I. Egorov, I.V. Zvyagin, E.D. Karpenko, D.A. Klyukin, A.I. Sidorov 69

COMPUTER SCIENCE

HLD-methodology application for reconfigurable embedded systems design

Method of high-quality speech synthesis with a small database usage

Detection of clipped fragments in acoustic signals

Two-level hierarchical coordination queuing method for telecommunication network nodes

An approach for clone detection in documentation reuse

Effectiveness assessment methodology of information security management system

through the system response time to information security incidents

Moving person identification in video surveillance systems

A.O. Kluchev, P.V. Kustarev, T.T. Paltashev, A.E. Platonov 74

P.G. Chistikov, A.O. Talanov, D.S. Zakharov, A.I. Solomennik 83

S.V. Aleinik, Yu.N. Matveev, A.V. Sholokhov, M.V. Semenyaka 91

D.V. Lutsiv, D.V. Koznov, H.A. Basit, O. E. Lieh, M.N. Smirnov, K.Yu. Romanovskiy 98

F.N. Shago 106

A.I. Solomatin, A.S. Lyubert, I.A. Zikratov 115

ENGINEERING AND TECHNOLOGIES

Multisensor system application for preparations bitterness evaluation

in traditional Chinese medicine

Accuracy evaluation for the non-contact defect area measurement at the complex-shape surfaces

under videoendoscopic control

Comparative analysis of energy accumulation systems and determination

of optimal application areas for modern super flywheels

I.S. Yaroshenko, D.O. Kirsanov, A.V. Legin, P. Wang, D. Ha, H. Wan, H. Wan, Y. He 132

A.V. Gorevoy, A.S. Machikhin, A.M. Perfilov 140

M.A. Sokolov, V.S. Tomasov, R.P. Jastrzëbski 149

MODELING AND SIMULATION

Multi-grid method of convergence speeding-up for the solution of gas dynamics problems

on unstructured meshes

Extension of tensor product for operators on the Dirac operator example

Molecular dynamic simulation of peptide polyelectrolytes

K.N. Volkov 156

A.A. Boitsev, H. Neidhardt, I.Yu. Popov 164

I.M. Neelov, A.A. Mistonova, A.Yu. Khvatov, V.V. Bezrodny 169

BRIEF PAPERS

Identification of nonlinear model parameters for rapid thermal processes

A.A. Kapitonov, S.V. Aranovskiy 176

ОБЗОРНАЯ СТАТЬЯ REVIEW ARTICLE

УДК 535

ФОТОНИКА И ОПТОИНФОРМАТИКА В ЕВРОПЕ: ТРЕНДЫ 2003–2013

С.К. Стафеев^а, И.Л. Лившиц^а, А.В. Ольшевская^а, В.А. Жогина^а, Е.А. Денисова^а, Г.Л. Маркина^а,
Н. Paul Urbach^{а, б}

^аУниверситет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, olshevskaya@mail.ifmo.ru

^бДелфтский технологический университет, Делфт, Нидерланды

Аннотация. Представлен ретроспективный анализ структуры европейских научно-технологических платформ – фотоника, наноматериалы и фотовольтаика – с точки зрения их структуры, взаимопроникновения тематик и динамики изменений, произошедших за последние десять лет. Анализируется геоинформационная составляющая европейского оптического образования. Описаны критерии исследования и онтологические модели, позволяющие выявить корреляции между развитием научных исследований и промышленных применений, с одной стороны, и динамикой образовательных программ по оптике, фотонике и оптоинформатике, с другой стороны. Представлены данные о количественных и качественных изменениях в образовательных программах и присваиваемых академических степенях по соответствующим направлениям подготовки. Материал проиллюстрирован фрагментами ассоциативной карты «Современные направления исследований в области оптики, фотоники и оптоинформатики» и концептуальной карты «Европейские научно-технологические платформы». На более низком онтологическом уровне приведено облако тегов для двух конкретных предметных областей «Lasers» и «Optics Communications». Сформулированы конвергентные и дивергентные тренды, характерные для последнего десятилетия развития оптики, фотоники и оптоинформатики в Европе. К основным трендам можно отнести следующее: направления и темпы развития рынка коррелируют с геоинформационными данными по европейским научным и образовательным тенденциям; телекоммуникации и информационные технологии являются доминирующими сферами приложения знаний и компетенций европейских специалистов по оптике, фотонике и оптоинформатике; онтологическая структура баз знаний в области биофотоники, полимерной оптики, фотонных кристаллов и «умных» оптических метаматериалов становится все более разветвленной; ряд концептуальных онтологических узлов в оптике, фотонике и оптоинформатике постепенно теряет свою актуальность, на смену им приходят новые концепты или целые онтологические ветви.

Ключевые слова: фотоника, оптоинформатика, научно-технологические платформы, европейское оптическое образование, предметные онтологии, концептуальные и ассоциативные карты, образовательные программы, дивергентные и конвергентные тренды.

PHOTONICS AND OPTICAL INFORMATICS IN EUROPE: TRENDS OF 2003–2013

S.K. Stafeev^а, I.L. Livshits^а, A.V. Ol'shevskaya^а, V.A. Zhogina^а, E.A. Denisova^а, G.L. Markina^а,
H. Paul Urbach^а

^аITMO University, Saint Petersburg, Russia, olshevskaya@mail.ifmo.ru

^бDelft University of Technology, Delft, Netherlands

Abstract. Retrospective structure analysis of the European scientific and technological platforms – photonics, nanomaterials and photovoltaics – is represented from the point of view of their structure, interpenetration of subjects and dynamics of the changes which have occurred over the last ten years. Geoinformation component of the European optical education is analyzed. Criteria of research and the ontological models, giving the possibility to reveal correlations between development of scientific researches and industrial applications, on the one hand, and dynamics of educational programs on optics, photonics and optical informatics are described. Data on quantitative and high-quality changes in educational programs and appropriate academic degrees on the corresponding training directions are submitted. The material is illustrated with fragments of the associative card "Modern Directions of Researches in the Field of Optics, Photonics and Optical Information" and the conceptual card "European Scientific and Technological Platforms". The tag cloud is given in lower ontological level for two concrete subject domains of "Lasers" and "Optics Communications". Convergent and divergent trends, characteristic for the last decade development of optics, photonics and optical informatics in Europe are formulated. The main trends are: the directions and rates of the market development correlate with geoinformation data on the European scientific and educational tendencies; telecommunications and information technologies are dominating spheres of knowledge application and competences of the European experts in optics, photonics and optical informatics; the ontological structure of knowledge bases in the field of biophotonics, polymeric optics, photon crystals and "clever" optical metamaterials becomes more branched; a number of conceptual ontological knots in optics, photonics and optical informatics are gradually losing their relevance, being replaced by new concepts or the whole ontological branches.

Keywords: photonics, optical informatics, scientific and technological platforms, European optical education, subject ontologies, conceptual and associative cards, educational programs, divergent and convergent trends.

Введение

В настоящей работе представлены результаты исследования структуры научно-технологических платформ и динамики изменений европейского образования в области оптики, фотоники и оптоинформатики за период с 2003 по 2013 год с целью выявления основных трендов.

Анализ структуры трех европейских научно-технологических платформ (ЕНТП) – «Фотоника», «Фотовольтаика» и «Наноматериалы» производился на основе открытых данных, представленных в рамках брюссельского саммита Photonics²¹, прошедшего в апреле 2014 года [1]. Дискуссии, проходившие на заседаниях всех семи рабочих групп саммита, показали актуальность усилий по координации научно-исследовательских, инновационно-предпринимательских и образовательных (подготовка кадров) усилий в области сверхдинамично развивающихся фотоники и оптоинформатики. Кроме того, было прямо указано на необходимость выявления и фиксации взаимопересечений и структурных связей между тремя указанными техплатформами.

Анализ тенденций в области более консервативных структур университетского образования по соответствующим направлениям подготовки за последнее десятилетие был проведен на примере журнала «Optics and Photonics Education» [2–4]. В исследование были включены 122 высших учебных заведения из 21 европейской страны.

Университеты Европы – центры подготовки кадров по оптике, фотонике и оптоинформатике

На рис. 1 представлена карта, на которой отмечены европейские университеты, принимающие наиболее активное участие в реализации образовательных программ в области оптики, фотоники и оптоинформатики.

Обращает на себя внимание очевидная концентрация центров подготовки в ведущих региональных державах (Германия и Великобритания), меньшая, но также активная позиция романских стран (Испания, Франция, Италия) и почти равномерное распределение оставшейся трети университетских центров по Северной и Восточной Европе. Российская Федерация занимает почетное четвертое место в общем перечне европейских стран – лидеров подготовки кадров в области оптики, фотоники и оптоинформатики. При этом суммарный «удельный вес» России и Украины в этом перечне составляет 17%, что свидетельствует о сохраняющемся потенциале роста.

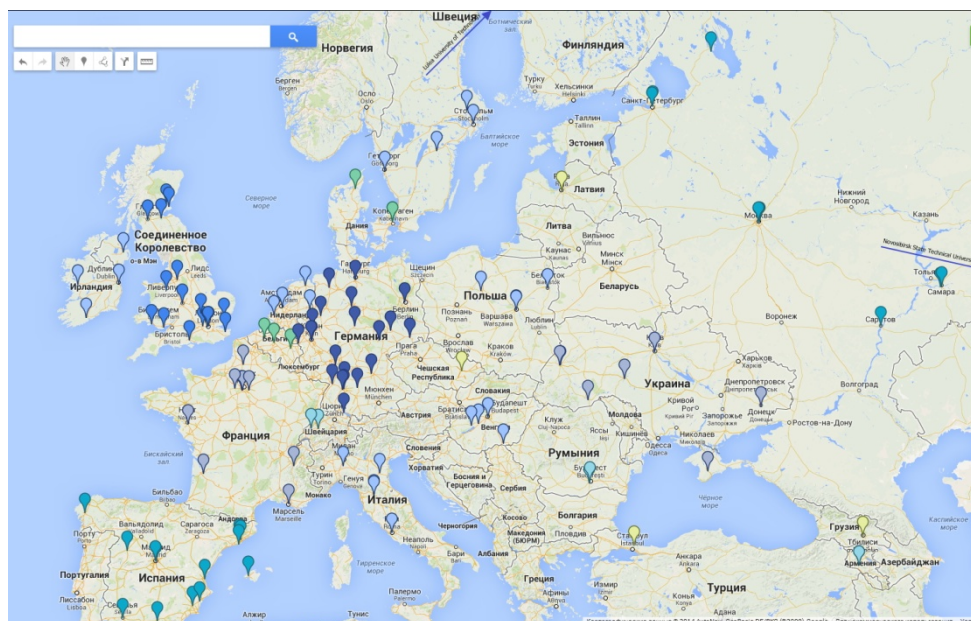


Рис. 1. Университеты Европы – центры подготовки кадров по оптике, фотонике и оптоинформатике

Если обратиться к данным десятилетней давности, то выяснится, что в 2003 году европейское образование в области оптики, фотоники и оптоинформатики представляли 84 университета. Таким образом, спустя десять лет их количество увеличилось более чем на треть, что отражает актуальность данного профиля подготовки. При этом из общей выборки только 70 университетов присутствовали в данных Европейского оптического общества все десятилетие [5]. По статистике, 14 университетов прекратили обучение (как правило, по «классическим» оптическим направлениям), но в то же время 52 – т.е. в четыре раза больше – начали реализацию программ по оптике, фотонике и оптоинформатике.

Когда общие геоинформационные данные были сведены в таблицу и к ним добавилась графа, отражающая количественный спектр предлагаемых образовательных программ (направлений подготовки) в интересующей нас области, то картина стала еще более контрастной (табл. 1). Лидирующие университетские группы, как правило, предлагают не менее 5–6 различных бакалаврских и магистерских траекторий обучения, в то время как в нижней половине таблицы этот множитель составляет не более 3–4, а зачастую подготовка ведется только по двум–трем программам. При этом в ретроспективном анализе мы снова

видим существенное увеличение числа программ, ориентированных на современные приложения оптики, фотоники и оптоинформатики – в системах коммуникаций, в информационных технологиях, в медицине, в создании «умных» оптических материалов и источников излучения. Анализ созданной общей базы данных, проведенный по критерию «научные и исследовательские специальности, связанные с оптикой/фотоникой» (academic and research specialties related to optics/photronics), показал доминирование телекоммуникационной и оптоинформационной компонент.

Страна	Количество университетов	Количество образовательных программ
Германия	23	115
Великобритания	17	85
Испания	13	52
Россия	12	48
Франция	8	40
Украина	7	21
Швеция	5	14
Италия	5	20
Венгрия	4	12
Ирландия	4	10
Польша	4	9
Нидерланды	4	8
Бельгия	3	8
Дания	3	7
Армения	2	5
Румыния	2	5
Швейцария	2	6
Чехия	1	5
Латвия	1	4
Грузия	1	4
Турция	1	3

Таблица 1. Количество европейских университетов и программ подготовки в области фотоники и оптоинформатики

Последнее обстоятельство отражает объективный рост числа инновационных решений в этой области, который, в частности, может быть зафиксирован с помощью динамически пополняемой онтологической базы знаний по оптике, фотонике и оптоинформатике, над которой авторы статьи работают уже более двух лет [6–9]. Эти тенденции проявляются не только в появлении новых концептуальных узлов в структуре онтологии, но и вкратно увеличивающемся числе порождаемых связей между старыми и новыми узлами онтологии.

Современные направления исследований в области оптики, фотоники и оптоинформатики

Как известно, современные компьютерные инструменты для создания онтологических структур позволяют формализовать некоторую область знаний с помощью визуальных образов [10, 11]. Онтология представляет собой иерархическую структуру понятий, объектов, определений, свойств и отношений [12, 13] и может быть представлена с помощью различных схем, например, ассоциативной карты (Mind map) и концептуальной карты (Concept map). Тематический фрагмент такой ассоциативной карты, опирающейся на базовое понятие «OPTICS» как на центральный узел, представлен на рис. 2. Основные понятия, связанные с объектом изучения, расходятся от центрального образа в виде ветвей, например, «CLASSICAL OPTICS», «IMAGING SCIENCE», «LASERS» и т.д. Затем эти понятия иерархически детализируются, например, в понятие «NON-CLASSICAL OPTICS» входят «Nonlinear Optics», «Ultrafast Optics», «Optoelectronics». Далее детализация происходит сколь угодно долго; в нашем случае на данный момент создано четыре иерархических уровня.

Зеленым цветом на ассоциативной карте выделены крупные классические и инновационные направления, которые сейчас развиваются максимально динамично и наиболее часто встречаются при анализе тематики ЕНТП и образовательных программ. Синим цветом выделены концепты, содержащие на следующем уровне наибольшее число подчиненных узлов и горизонтальных связей. Оба этих множества

оказываются почти идентичными даже при рассмотрении онтологических структур по нескольким независимым критериям.

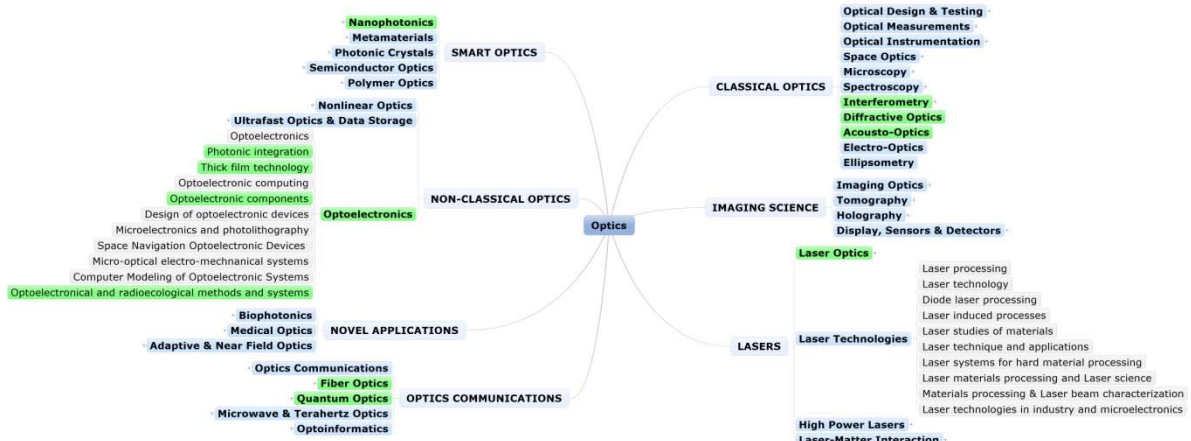


Рис. 2. Фрагмент ассоциативной карты «Современные направления исследований в области оптики, фотоники и оптоинформатики»

Обращает на себя внимание весьма скромная доля собственно оптической науки в ее классическом понимании по сравнению, например, с такими, казалось бы, частными направлениями, как «smart» и «non-classical». Сверхспециализация все более характерна для направлений научных исследований в области лазеров [14, 15]. Все более разветвленной становится тематика биофотоники, полимерной оптики, фотонных кристаллов и оптических метаматериалов. Практически все направления, порожденные из узла «optics communication», имеют 2–3 уровня и содержат в себе не менее 25–30 концептов каждый!

Интересные данные можно получить с помощью техники составления так называемых «облаков тэгов», позволяющих просто и наглядно представить значимость (частоту использования) тех или иных понятий из предметной онтологии в общей ее структуре. На рис. 3 изображена подобная тэговая детализация фрагмента базы знаний по оптике, фотонике и оптоинформатике в части научно-исследовательских направлений «Lasers» и «Optics Communications». Частотные характеристики, как обычно, определяются размером шрифтов, а уровни вложенности – цветом соответствующих устойчивых сочетаний.

В этой связи интересно проследить за тенденциями в организации профильной (бакалаврской и магистерской) подготовки по направлениям оптики, фотоники и оптоинформатики в европейских университетах [16, 17]. Если проанализировать формальное подчинение конкретных образовательных структур (кафедр, лабораторий), ведущих эту подготовку на факультетском уровне, то окажется, что только 29% от общего числа программ реализуется на профильных факультетах (рис. 4). Лидерство (35%) в подготовке специалистов по оптике/фотонике принадлежит факультетам, специализирующимся в областях знаний «Коммуникации» и «Информационные технологии». Третье место, а соответственно 24%, составляют факультеты инженерной направленности. Оставшиеся 12% от общего числа факультетов специализируются на компьютерных науках. Это еще раз подтверждает отчетливую тенденцию к прикладной специализации подготовки кадров по анализируемой тематике в европейских университетах.

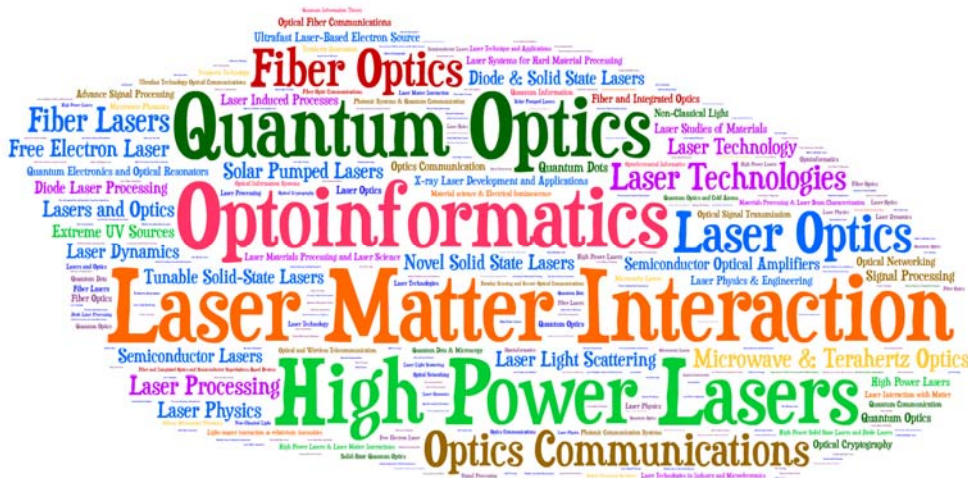


Рис. 3. Облако тэгов для фрагментов базы знаний «Lasers» и «Optics Communications»

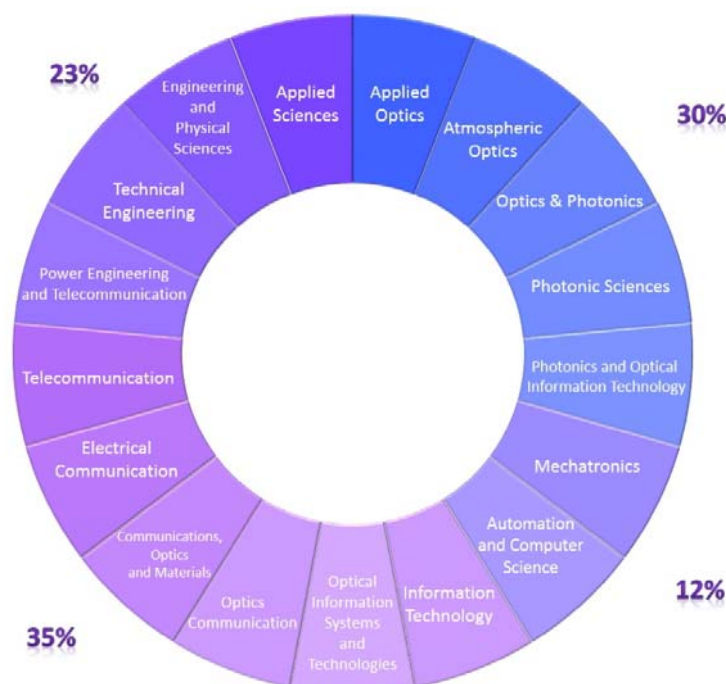


Рис. 4. Распределение программ подготовки по оптике, фотонике и оптоинформатике, реализуемых в европейских университетах на факультетах различных профилей

Проведенные исследования выявили целый ряд концептуальных онтологических узлов, постепенно теряющих свою актуальность в связи с трансформациями спектра научных (теоретических и прикладных) исследований в оптике, фотонике и оптоинформатике. На смену им приходят новые концепты или целые онтологические ветви, которые, в свою очередь, развиваются дивергентно и с различной динамикой. Например, целая трехуровневая область базы знаний «Optical instrumentation» [18] настолько сузилась, что к 2013 году уступила по удельному весу таким, казалось бы, узким тематическим разделам, как «Ultrafast optics» [19], «Optics of fractals», «Nonlinear dynamics and chaos in Laser systems» (рис. 5). Другой пример – онтологическая ветвь «Optoelectronic sensors and systems» [20, 21]. Здесь изменения за последние десять лет происходили, с одной стороны, в направлении дивергентного умножения числа сенсорных технологий, построенных на различных оптических (фотонных) принципах, а, с другой, с тенденцией заметного доминирования волоконнооптических сенсоров и полимерных элементов для оптоинформационных систем.

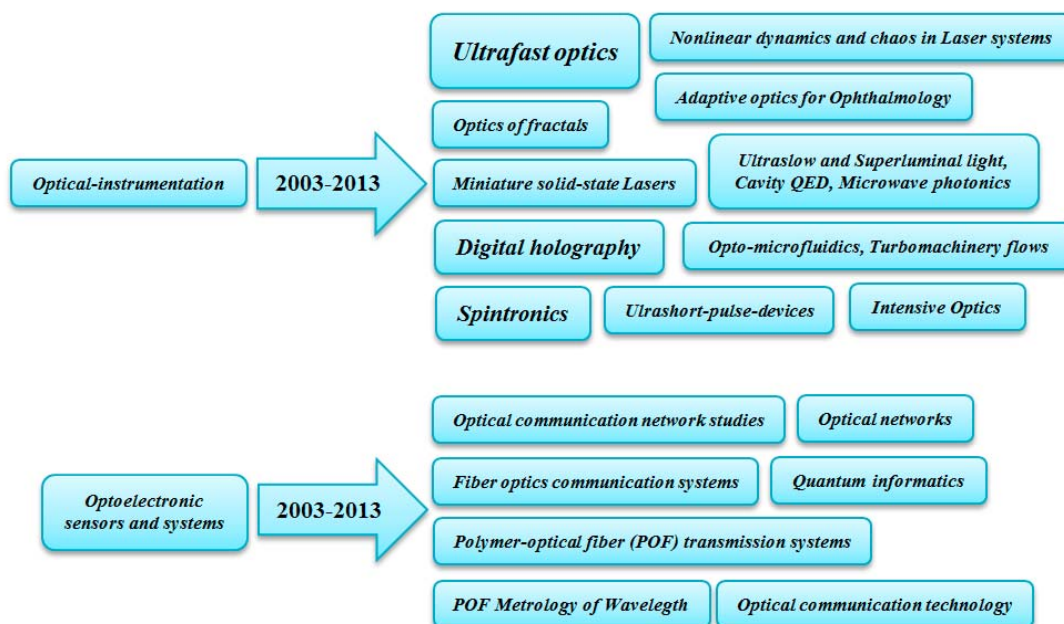


Рис. 5. Частные дивергентные тенденции изменения концептуальных узлов предметной онтологии по появившимся за последние 10 лет на европейском рынке фотоники и оптоинформатики устройствам

Если посмотреть на уровни подготовки специалистов в области оптики, фотоники и оптоинформатики в Европе, то здесь ситуация с некоторыми коррективами отражает общие тенденции болонского процесса. Сегодня структура обучения в европейских университетах подразделяется на три основных уровня, после прохождения которых можно получить академические степени: Бакалавр (Licence/Bachelor), Магистр (Master), Доктор (Doctorate) [22]. Менее распространена степень Специалист (Diploma in Engineering (DE) – Диплом в инженерном деле). Европейская академическая степень Доктор соответствует российской ученой степени Кандидата наук [23]. Различных названий академических степеней Бакалавров, Магистров и Докторов – великое множество. В табл. 2 представлены академические степени [24, 25], присуждаемые в Европе.

Академическая степень	Расшифровка академической степени на английском языке	Полное название академической степени на русском языке
Bachelor's degree (Бакалаврские степени)		
BS, BSc	Bachelor of Science	Бакалавр наук
BE, BEng	Bachelor of Engineering	Бакалавр инженерного дела
BSEE	Bachelor of Science in Electrical Engineering	Бакалавр наук в области электротехники
BA	Bachelor of Arts	Бакалавр искусств
Master's degree (Магистерские степени)		
MS, MSc, MSci	Master of Science	Магистр наук
MEng	Master of Engineering	Магистр инженерного дела
MPhil	Master of Philosophy	Магистр философии
MRes	Master of Research	Магистр исследований
MPhys	Master of Physics	Магистр физики
Doctoral's degree (Докторские степени)		
PhD	Doctor of Philosophy	Доктор философии
DrS	Doctor of Science	Доктор наук
EngD	Engineering Doctorate	Доктор инженерного дела

Таблица 2. Академические степени, присуждаемые в Европе

За последнее десятилетие произошло изменение числа образовательных программ (ОП) подготовки по оптике, фотонике и оптоинформатике. Для подготовки бакалавров было разработано 69 новых ОП (увеличение на 107%). Количество программ подготовки специалистов сократилось на 14 ОП (уменьшение на 48%). Для магистров было разработано 90 новых ОП (увеличение на 114%), для докторов – 61 ОП (увеличение на 89%). Результаты представлены на рис. 6.

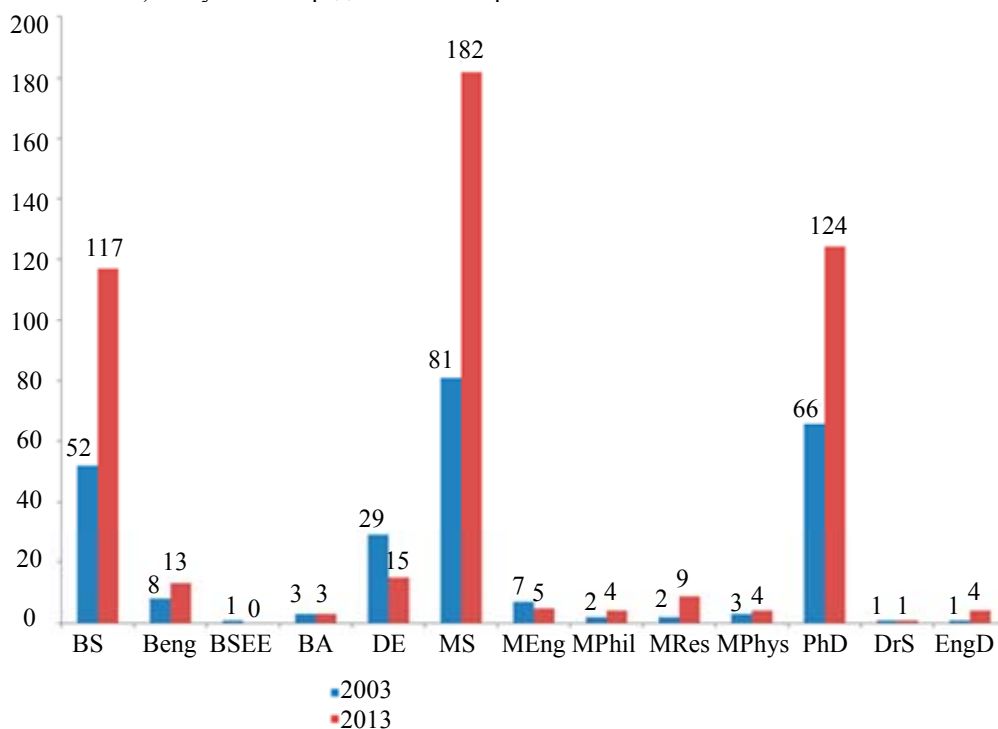


Рис. 6. Изменение числа профильных образовательных программ по оптике, фотонике и оптоинформатике в университетах Европы

Самыми распространенными академическими степенями, присуждаемыми по окончании обучения, как в 2003, так и в 2013 году являются степени Бакалавр наук, Магистр наук и Доктор философии. Академические степени Магистр философии, Магистр исследований, Магистр физики, Доктор инженерного дела не настолько распространены, как описанные ранее, но все же количество ОП с присвоением таких степеней к 2013 году увеличилось. Количество ОП с присвоением степеней Бакалавр искусств, Доктор наук не изменилось. Число ОП с присвоением академической степени Магистр инженерного дела уменьшилось. Прекратилась подготовка специалистов по фотонике и оптоинформатике с присвоением степени «бакалавра наук в области электротехники».

Европейские научно-технологические платформы

Как уже отмечалось, изменения в образовательной сфере с некоторым запозданием отслеживают тенденции, объективно происходящие в интересующей нас области науки и техники. Более оперативно на эти трансформации откликаются европейские структуры, ответственные за связь научно-исследовательских групп и профильного бизнес-сообщества. На первые роли в решении этой задачи для анализируемого геоэкономического региона сегодня выходят ЕНТП.

Анализ деятельности трех таких платформ – «Фотоника», «Фотовольтаика», «Наноматериалы» [26–28] – позволил выделить основные направления научных исследований и установить взаимосвязи между ними. Для этого по вполне понятным причинам была применена методика составления концептуальных карт. Если ассоциативные карты демонстрируют понятия и древовидную структуру произвольных фрагментов знаний, то концептуальные карты позволяют глубже рассмотреть предмет изучения и включают отношения между понятиями. Концептуальная карта представляется в виде графа, узлы которого отображают понятия (объекты или концепты), а направленные дуги, соединяющие эти узлы, – отношения (связи) [29]. Любая разработка концептуальной карты подразумевает структурный анализ взаимодействий между отдельными понятиями предметной области.

На рис. 7 представлен фрагмент концептуальной карты для указанных выше ЕНТП, которая, помимо прочего, наглядно демонстрирует области взаимопроникновения платформ и межплатформенные связи. Фрагмент ограничен областью пересечений на энергетической, коммуникационной и промышленной тематиках. Кроме того, для упрощения визуального восприятия на первом этапе анализа были совмещены структуры двух наиболее близких ЕНТП – «Фотоника» и «Фотовольтаика». На втором этапе искались существенные связи и пересекающиеся концептуальные узлы полученной симбиозной схемы со структурой третьей платформы «Наноматериалы». В результате были автоматически выявлены конвергентные тренды, демонстрирующие единство конечных концептов в формате конкретных научно-технических приложений.

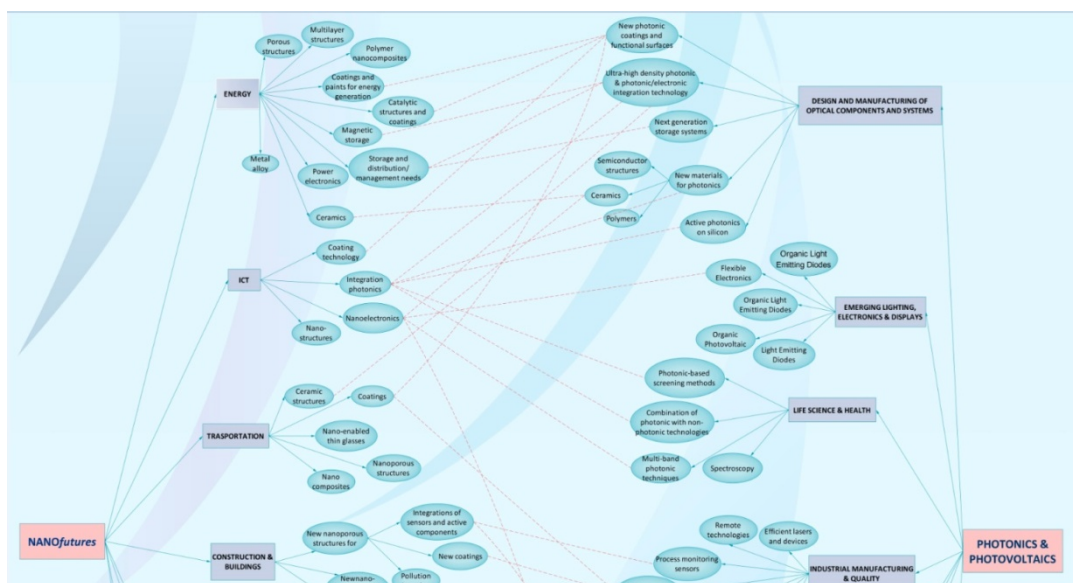


Рис. 7. Фрагмент концептуальной карты «Технологические платформы»

Заключение

На основе результатов исследования сформулированы следующие тренды.

1. Геоинформационные данные по европейским научным и образовательным тенденциям в области оптики, фотоники и оптоинформатики, а также динамика их трансформаций коррелируют с направлениями и темпами развития рынка соответствующих технологий.

2. Доминирующими сферами приложения знаний и компетенций европейских специалистов по оптике, фотонике и оптоинформатике на сегодня являются телекоммуникации и информационные технологии. На все более узкие профили дивергентно разбиваются прикладные исследования в области лазеров.
3. Все более разветвленной становится онтологическая структура баз знаний в области биофотоники, полимерной оптики, фотонных кристаллов и «умных» оптических метаматериалов.
4. Выявляется ряд концептуальных онтологических узлов, постепенно теряющих свою актуальность в оптике, фотонике и оптоинформатике. На смену им приходят новые концепты или целые онтологические ветви, которые, в свою очередь, развиваются дивергентно и с различной динамикой.
5. В результате построения концептуальных карт для трех профильных европейских научно-технологических платформ были автоматически выявлены конвергентные тренды, демонстрирующие единство конечных технических приложений при движении к ним с различных, а иногда и противоположных, онтологических узлов.

Литература

1. Photonics21 – A Key Enabling Technology of Europe [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.photonics21.org/index.php>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 21.04.2014).
2. Optics and Photonics Education 2013 / Ed. P. Barnett. Bellingham: SPIE, OSA Publ., 2013. 138 p.
3. Optics Education 2003-2004. International directory of degree programs in optics / Ed. P. Barnett. Bellingham: SPIE, OSA Publ., 2003. P. 96.
4. Optics and Photonics Education 2012 / Ed. P. Barnett. Bellingham: SPIE, OSA Publ., 2012. 130 p.
5. European Optical Society [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.myeos.org/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 29.04.2014).
6. Ольшевская А.В., Стафеев С.К., Боярский К.К., Катков Ю.В., Муромцев Д.И., Яговкин В.И. Комплексная визуализация предметной онтологии на основе взаимосвязанных конструкций // Компьютерные инструменты в образовании. 2011. № 5. С. 38–45.
7. Ольшевская А.В., Николаев Д.Г. Сравнительный анализ возможностей социальных сетей для применения в образовательном процессе // Сборник трудов VI Всероссийской межвузовской конференции молодых ученых. СПб: СПбГУ ИТМО, 2009. Вып. 6. С. 273–279.
8. Ольшевская А.В. Прототип онтологии по оптике в исторической ретроспективе // Сборник трудов I Всероссийского конгресса молодых ученых. СПб: НИУ ИТМО, 2012. Т. 3. С. 22–24.
9. Арзуманян М.Ю., Маркина Г.Л. Новые методы архитектурного проектирования и организации информационного сопровождения учебного процесса // Дистанционное и виртуальное обучение. 2014. № 1. С. 117–124.
10. Шестаков В.К. Извлечение онтологий из Wiki-систем // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2012. № 1 (77). С. 62–66.
11. Невидимов А.В., Бессмертный И.А. Подход к коллективной разработке онтологий // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2013. № 2 (84). С. 161.
12. Mourontsev D. Development of a complex ontology of optics // CEUR Workshop Proceedings. 2012. V. 849. P. 12.
13. Гаврилова Т.А., Муромцев Д.И. Интеллектуальные технологии в менеджменте: инструменты и системы. 2-е изд. СПб: Высшая школа менеджмента, СПбГУ, 2008. 488 с.
14. Nemati M., Wijshoff R.W.C.G.R., Stijnen J.M.A., van Tuijl S., Bergmans J.W.M., Bhattacharya N., Urbach H.P. Laser-speckle-based detection of fluid pulsation in the presence of motion artifacts: in vitro and in vivo study // Optics Letters. 2013. V. 38. P. 5334–5337.
15. Cui M., Zeitouny M.G., Bhattacharya N., Van Den Berg S.A., Urbach H.P. New laser system for distance metrology - High accuracy long distance measurements with a frequency comb laser // Proc. of Symposium on Photonics and Optoelectronic 2010, SOPO 2010. Chengdu, China, 2010. Art. N 5504253.
16. Гуров И.П. Компьютерная фотоника: инновационные исследовательские проекты // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2005. № 22. С. 24–33.
17. Андреева О.В., Беспалов В.Г., Васильев В.Н., Козлов С.А., Лобанов С.А., Макаров Н.С. WEB-сайт по научно-образовательному направлению «Оптоинформатика» // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2004. № 2 (13). С. 15–20.
18. Negi S.S. Optical and electro-optical instrumentation // Defence Science Journal. 2013. V. 63. N 6. P. 543–544.
19. Cui M., Bhattacharya N., Urbach H.P., Van Den Berg S.A. Correlation functions formed by a femtosecond pulse interferometer // Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering. 2008. V. 7018. Art. N 70183Q.
20. Pozo J., Westerveld W., Harmsma P.J., Yang S., Bodis P., Nieuwland R., Lagioia M., Cascio D.M.R.L., Staats J., Schmits R., Berg H.V.D., Tabak E., Green K., Urbach H.P., Cheng L.K., Yousefi M. Silicon on insulator

- photonic integrated sensors: On-chip sensing and interrogation // International Conference on Transparent Optical Networks. 2011. Art. N 5970854.
21. Yurish S. Smart optoelectronic sensors and intelligent sensor systems // Sensors and Transducers. 2012. V. 14. N SPEC 1. P. 18–31.
 22. Академические степени в Европе [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.universityguideonline.org/ar/InternationalPathways/degree-options-in-europe>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 25.03.2014).
 23. Соответствие ученых степеней и званий у нас и за рубежом [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://begin-english.ru/article/uchenaya-stepen-v-amerike/>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 25.03.2014).
 24. Расшифровка академических степеней первого высшего образования в Великобритании [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.educationindex.ru/article_bachelor_degree_qualifications_in_english_and_russian.aspx, свободный. Яз. рус. (дата обращения 25.03.2014).
 25. Расшифровка академических степеней магистерского образования в Великобритании [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.educationindex.ru/article_postgraduate_degree_qualifications_in_english_and_russian.aspx, свободный. Яз. рус. (дата обращения 25.03.2014).
 26. Towards 2020 – Photonics driving economic growth in Europe. Dusseldorf: European Technology Platform Photonics21, 2013. 105 p.
 27. Innovation and New Energy Technologies. Berlin: Federal Ministry of Economics and Labour Communication and Internet Division, 2005. 84 p.
 28. Integrated Research and Industrial Roadmap for European Nanotechnology [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.nanofutures.info/sites/default/files/NANO_futures_Roadmap%20july%202012_0.pdf, свободный. Яз. англ. (дата обращения 11.04.2014).
 29. Гаврилова Т.А., Лещева И.А., Страхович Э.В. Об использовании визуальных концептуальных моделей в преподавании // Вестник СПбГУ. Сер. Менеджмент. 2011. № 4. С. 124–150.



Стафеев Сергей Константинович – доктор технических наук, профессор, декан естественнонаучного факультета, заведующий кафедрой физики, координатор проекта создания и развития Федерального образовательного естественнонаучного портала, научный руководитель Музея оптики, куратор создания сети детских научно-образовательных центров. Автор более 150 научных и учебно-методических публикаций в отечественных и зарубежных изданиях. Научные труды сосредоточены в области оптики полупроводников, ИК-систем лазерного зондирования, систем и методов визуализации оптических и электрофизических неоднородностей полупроводников и полуметаллов. Имеет публикации по оптической обработке информации и оптической фильтрации; по оптическим и рентгеновским исследованиям фрактальных структур, применению пространственных ЖК-модуляторов света. Учебно-методические работы посвящены преподаванию курса общей физики, применению современных информационных технологий в естественнонаучном

образовании, историческим аспектам развития оптических представлений. Автор лекционного курса по волновой и квантовой оптике и его сетевой версии, ряда учебных курсов по тематике «Оптика и искусство».

Sergey K. Stafeyev – Doctor of Technical Sciences, Professor, the Dean of the faculty of Natural Sciences, Head of Physics department, Coordinator of the project for creation and development of the federal natural sciences educational portal, scientific Director of Optical Museum, curator of creating a network of children's educational centers. S. Stafeyev is the author of more than 150 scientific and educational publications in national and international editions. He has got scientific works in the area of optics of semiconductors, infrared systems of laser sensing, systems and methods of visualization of optical and electrical in homogeneities of semiconductors and semimetals. He has got publications on the optical processing of information and optical filtering; on optical and X-ray research of fractal structures, on using of spatial liquid crystal-modulators of light. His pedagogical works are devoted to the teaching of general physics course, to the using of modern information technologies in science education, to historical aspects of the development of optical concepts. Sergey Stafeyev is the author of lecture course devoted to the wave and quantum optics and its network version, a series of training courses on "Optics and Art".



Лившиц Ирина Леонидовна – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, заведующая лабораторией автоматизированного проектирования оптико-информационных и энергосберегающих систем, ведущий специалист по расчету оптических систем, председатель программного комитета международного семинара по проектированию оптических систем – IODS, член Оптического общества им. Д.С. Рождественского, американского общества SPIE и Европейского оптического общества, где является членом совета директоров и тематическим редактором по секции «Проектирование оптических систем» журнала JEOS. Участвует во многих международных конференциях в качестве члена программного комитета и докладчика: «Optical Design and Fabrication», «Optical Engineering and Applications», «International Conference on Optical Instruments and Technology» и других. Вся профессиональная деятельность связана с расчетом оптических систем, результатом являются 178 научных работ, среди которых – 70 изобретений, научные статьи, отчеты, одна монография.

Irina L. Livshits – PhD, senior scientific researcher, Head of Laboratory for Computer Aided Design of Optical Information and Energy Saving Systems, leading expert on the calculation of optical systems, the Program Chair of the International seminar on the design of optical systems – IODS, Member of Rozhdestvensky Optical Society, American Optical Society SPIE and European Optical Society, where she is a Board Member and editor of the thematic section «Designing Optical Systems», JEOS journal. She takes an active part in many international conferences, as both a member of the Program Committee and a speaker: «Optical Design and Fabrication», «Optical Engineering and Applications», «International Conference on Optical Instruments and Technology» and others. All her professional activities are devoted to the calculation of optical systems resulting in 178 scientific works, among them – 70 inventions, scientific papers, reports and one monograph.



Ольшевская Анастасия Владимировна – начальник отдела лицензирования и аккредитации Университета ИТМО. Имеет 17 публикаций, 4 из которых опубликованы в журналах, входящих в перечень ВАК. Принимала участие с докладами в 10 научных и учебно-методических конференциях, в том числе международных.

Anastasiya V. Ol'shevskaya – Head of Licensing and Accreditation department of ITMO University. She has got 17 publications; four of them are published in the journals included in the list of higher attestation Committee (VAK). She took part in 10 scientific and educational conferences, including international ones.



Жогина Вероника Александровна – магистрант кафедры Интеллектуальные технологии в гуманитарной сфере, инженер отдела лицензирования и аккредитации Университета ИТМО. Имеет 3 публикации, одна из которых опубликована в журнале, входящем в перечень ВАК. Принимала участие с докладами в 4 научных и учебно-методических конференциях.

Veronika A. Zhogina – student of Intelligent Technologies department in the humanitarian field, engineer of Licensing and Accreditation department of ITMO University. She has got three publications; one of them is published in the journal included in the list of higher attestation Committee (VAK). She took part in four scientific and educational conferences.



Денисова Екатерина Александровна – студент кафедры Компьютерные образовательные технологии, инженер отдела лицензирования и аккредитации Университета ИТМО. Имеет одну публикацию. Принимала участие с докладами в 2 научных и учебно-методических конференциях.

Ekaterina A. Denisova – student of Computer Educational Technologies department, engineer of Licensing and Accreditation department of ITMO University. She has got one publication. She took part in two scientific and educational conferences as a speaker.



Маркина Галина Леонидовна – начальник отдела информационного сопровождения открытых конкурсов для государственных и муниципальных нужд Университета ИТМО. Сфера интересов: архитектурное проектирование, модель образовательного процесса, архитектурный подход, онтологическое моделирование. Имеет 8 публикаций, принимала участие в 4 конференциях.

Galina L. Markina – Head of Section for information support of open competitions for government and municipal needs of ITMO University. Her scientific areas are: architectural design, educational process model, architectural approach, ontological modeling. She has got 8 publications, took part in 4 conferences.



Н. Paul Urbach – доктор наук, профессор и глава оптической исследовательской группы Делфтского технологического университета, президент Европейского Оптического Общества, координатор проекта «Smethods» по разработке и применению когнитивных технологий в оптическом дизайне. Автор 24 научных публикаций. Провел исследования во многих отраслях оптики, таких как оптическая литография для ICs и оптическое освоение диска, флуоресценция рентгена, электромагнитное моделирование оптической записи, манипуляция непосредственной эмиссии, высокое числовое отображение апертуры, светочувствительные анизотропные медиа- и плазмоника для применения в LEDs.

H. Paul Urbach – D.Sc, Professor and the Head of Optics Research Group of TUDelft, President of European Optical Society and Coordinator of the "Smethods" project devoted to the development and application of cognitive technologies in optical design. He is the author of 127 scientific publications. He has done research in many branches of optics, such as

optical lithography for ICs and optical disc mastering, EUV and x-ray fluorescence, manipulation of spontaneous emission, high numerical aperture imaging, photoactive anisotropic media and plasmonics for application in LEDs.

- | | |
|--|--|
| <i>Стафеев Сергей Константинович</i> | – доктор технических наук, профессор, декан, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, stafeevs@yahoo.com |
| <i>Лившиц Ирина Леонидовна</i> | – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ecenter-optical10@yandex.ru |
| <i>Ольшевская Анастасия Владимировна</i> | – аспирант, начальник отдела, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, olshevskaya@mail.ifmo.ru |
| <i>Жогина Вероника Александровна</i> | – студент, инженер отдела, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, verona27.91@mail.ru |
| <i>Денисова Екатерина Александровна</i> | – студент, инженер отдела, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, katieden@mail.ru |
| <i>Маркина Галина Леонидовна</i> | – аспирант, начальник отдела, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, lina@mail.ifmo |
| <i>Urbach H. Paul</i> | – доктор наук, профессор, Глава оптической исследовательской группы, Делфтский технологический университет, Делфт, Нидерланды; профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, h.p.urbach@tudelft.nl |
| <i>Sergey K. Stafeev</i> | – D.Sc., Professor, Dean, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, stafeevs@yahoo.com |
| <i>Irina L. Livshits</i> | – PhD, senior research scientist, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, ecenter-optical10@yandex.ru |
| <i>Anastasiya V. Ol'shevskaya</i> | – Postgraduate, Head of department, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, olshevskaya@mail.ifmo.ru |
| <i>Veronika A. Zhogina</i> | – engineer, student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, verona27.91@mail.ru |
| <i>Ekaterina A. Denisova</i> | – engineer, student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, katieden@mail.ru |
| <i>Galina L. Markina</i> | – postgraduate, Head of department, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, lina@mail.ifmo |
| <i>H. Paul Urbach</i> | – D.Sc., Professor, Head of the Optics Research Group, Delft University of Technology, Delft, Netherlands; Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, h.p.urbach@tudelft.nl |

Принято к печати 14.05.14
Accepted 14.05.14

УДК 535:621.373.826]:539

ДВУМЕРНАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ АТОМНЫХ НАСЕЛЕННОСТЕЙ
В ЧЕТЫРЕХУРОВНЕВЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХЕ.А. Ефремова^а, М.Ю. Гордеев^а, Ю.В. Рождественский^а^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, mxmgordeev@gmail.com

Аннотация. Исследуется один из аспектов фундаментальной задачи взаимодействия лазерного излучения с веществом – пространственное перераспределение атомных населенностей под действием полей нескольких бегущих волн. Впервые показана возможность двумерной пространственной локализации атомных населенностей под действием поля только бегущих волн в «tripod»-конфигурации квантовых состояний. Три бегущие волны, которые распространяются в одной плоскости под углами 120° друг к другу, формируют в этой плоскости систему стоячих волн, под действием которой и происходит локализация атомных населенностей. При этом степень локализации населенностей, в принципе, может составлять сотые доли длины волны падающего оптического излучения. Показано, что необходимым условием зависимости населенностей от пространственных координат в плоскости XY является возбуждение центрального перехода «tripod»-системы полем разнонаправленных линейно поляризованных бегущих волн, а возникающие при этом двумерные зависимости могут иметь сложные структуры, такие как, например, «двойные кратеры».

Ключевые слова: пространственная локализация, «tripod»-схема, атомные населенности.

TWO-DIMENSIONAL LOCALIZATION OF ATOMIC POPULATIONS
IN FOUR-LEVEL QUANTUM SYSTEMSE.A. Efremova^a, M.Yu. Gordeev^a, Yu.V. Rozhdestvensky^a^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia, mxmgordeev@gmail.com

Abstract. The paper deals with investigation of one aspect of fundamental problem of laser radiation interaction with the matter. This problem is spatial localization of atomic populations due to fields impact of few running waves. We are the first to propose in our work two-dimensional spatial localization of atomic populations in medium with tripod-like configuration of levels under the field influence of running waves only. Three running waves, propagating along one plane 120° angle-wise to each other, form the system of standing waves in this plane. Atomic populations can be localized in the field of these standing waves. Moreover, the degree of such localization can make up hundredth parts of the wavelength of the incident optical radiation. It is shown that an excitation of the central transition of the tripod-like system using a field of multidirectional linearly polarized running waves is the necessary condition of the population dependence from spatial coordinates in the XY – plane. The two-dimensional shapes that appear in this system can have very complicated structure such as “double – craters”.

Keywords: spatial localization, tripod – scheme, atomic populations.

Введение

В настоящее время активно исследуется пространственная локализация атомных населенностей как в одном, так и в двух измерениях [1–12]. Такой интерес обусловлен возможностью получения узких (много меньше длины волны оптического излучения) пространственных распределений атомов, которые находятся в определенных внутренних состояниях.

Физической основой для локализации населенностей внутренних состояний атомной системы является пространственно неоднородная оптическая накачка, которая перераспределяет значения населенностей при взаимодействии с полем оптического излучения [13–15]. При этом для получения пространственных распределений необходимо, чтобы хотя бы на одном переходе многоуровневой системы действовала стоячая световая волна, периодичность которой задает пространственный период изменений населенностей. В то же время ширина отдельного пика населенности определяется интенсивностью поля стоячей волны. Действительно, поскольку в узле интенсивность стоячей волны равна нулю, то оптическая накачка переведет всю населенность с других уровней атомной системы в нижнее состояние, к которому приложено поле стоячей волны. С другой стороны, если атом не находится точно в узле, то оптическая накачка снижает свою эффективность, поскольку интенсивность стоячей волны возрастает. Причем, чем выше интенсивность стоячей волны, тем больше пространственный градиент поля и соответственно меньше пространственная область вблизи узла стоячей волны, для которой эффективность оптической накачки высока.

Следует особо подчеркнуть, что в англоязычной научной литературе вместо термина «локализация атомных населенностей» («localization of atom population») используется термин «локализация атомов» («atom localization»), что ведет к определенному несоответствию между физическим явлением и его названием. Дело в том, что в данном случае речь идет именно о локализации населенностей, т.е. в результате взаимодействия атома с полем оптического излучения происходит пространственное перераспреде-

ние населенностей атомных состояний. Таким образом, начальное пространственное распределение атомов $w(x, t = 0)$ с учетом всех населенностей внутренних состояний $\rho_i(x, t = 0)$ до $w_{in}(x)$ и после взаимодействия $w_f(x)$ сохранит свой вид, в то время как пространственные зависимости населенностей после взаимодействия $\rho_i(x, t)$ изменятся:

$$w_{in}(x) = w(x, t = 0) = \sum_i \rho_i(x, t = 0) = \sum_i \rho_i(x, t) = w(x, t) = w_f(x).$$

Выше предполагалось, что под действием оптического излучения атом не меняет своего трансляционного состояния. Другими словами, атом считается настолько тяжелым, что можно пренебречь энергией отдачи $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$, ($k = 1/\lambda$) (где \hbar – постоянная Планка, k – волновое число излучаемого атомом фотона, m – масса излучающего атома, λ – длина волны излучаемого атомом фотона) по сравнению с кинетической энергией атома $E_R = p^2 / 2m$ ($p = mv$).

Теперь учтем, что при поглощении (или испускании) единичного фотона происходит изменение скорости атома на величину скорости отдачи $v_R = \hbar k / m$. Тогда минимальный размер области локализации населенностей можно определить как расстояние, пройденное атомом со скоростью v_R за время жизни $t \sim \gamma^{-1}$:

$$\delta x \geq v_R \gamma^{-1} = \frac{1}{\pi} \frac{E_R}{\hbar \gamma} \lambda \sim 3 \cdot 10^{-3} \lambda,$$

где считалось, что $E_R \sim 10^{-2} \hbar \gamma$ для сильных электродипольных оптических переходов в атомах, γ – скорость спонтанной релаксации атома, λ – длина волны падающего излучения. Влияние скорости отдачи на конечную пространственную ширину локализованных населенностей также существенно при попытке выделить из общего ансамбля только атомы, которые находятся в определенном внутреннем состоянии, поскольку такое выделение также может быть реализовано с помощью оптических методов.

Таким образом, пространственная локализация населенностей внутренних состояний атома действительно является результатом неоднородной на длине волны оптического излучения оптической накачки. Физически ясно, что основной проблемой здесь является выбор схемы взаимодействия атомов с полем излучения. При этом выбор схемы взаимодействия весьма ограничен, поскольку для эффективной оптической накачки на нижние состояния системы желательно иметь только один возбужденный верхний уровень. В результате все рассмотренные схемы атомных состояний, использованные для исследований локализации населенностей, в той или иной степени основываются на трехуровневой Λ -системе. Так, в работах [1–3] предложена одномерная локализация населенностей для атомов в Λ -конфигурации. При этом обобщение на случай двух пространственных измерений нетривиально вследствие того, что в уравнениях для элементов матрицы плотности следует явно учитывать поляризации световых волн, что выражается в учете правил отбора для действующих световых волн. По правилам отбора на переходе с разностью магнитных моментов $\Delta M = \pm 1$ может действовать только поле с круговой поляризацией, в случае же, когда разность магнитных моментов между уровнями $\Delta M = 0$, действовать на переходе может лишь поле с линейной поляризацией. В связи с этим для того, чтобы использовать поля как с линейной, так и с круговой поляризацией для локализации населенностей в двух измерениях, в [4] было предложено использовать «tripod»-конфигурацию атомных состояний.

В настоящей работе впервые представлено получение пространственной двумерной локализации населенностей под действием оптических полей бегущих волн также в четырехуровневой «tripod»-системе. При этом три бегущие волны, которые распространяются в одной плоскости под углами 120° друг к другу, формируют стоячие волны, которые, взаимодействуя со средним переходом «tripod»-системы (рис. 1, а), обеспечивают пространственную локализацию атомных населенностей.

Отметим, что использование бегущих волн важно в практической реализации двумерной пространственной локализации в масштабах, значительно меньших длины волны оптического излучения λ , что уже сейчас может представлять значительный интерес для современных нанотехнологий.

Основные уравнения

Рассмотрим теперь подробно энергетическую схему уровней атома в «tripod»-конфигурации (рис. 1, а). В этом случае атомная система состоит из трех нижних состояний, оптические переходы между которыми запрещены, и одного верхнего уровня. На оптически разрешенных переходах $|m\rangle \rightarrow |4\rangle$, $m = 1-3$, действуют поля с частотами Раби g_1 , g_2 и g_3 и отстройками от резонансных значений частот переходов Δ_1 , Δ_2 , Δ_3 соответственно. На рис. 1, б, показана ориентация полей. Видно, что три бегущие волны с одинаковыми частотами Раби g_2 , действующие на переходе $|2\rangle \rightarrow |4\rangle$, распространяются в плоскости XY под углом 120° друг к другу, в то время как поля на переходах $|1\rangle \rightarrow |4\rangle$, $|3\rangle \rightarrow |4\rangle$ с частотами

тами Раби g_1 и g_3 распространяются в отрицательном и положительном направлении оси Z соответственно. В результате полное поле, которое действует на «tripod»-систему (рис. 1), можно записать в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{e}_2 E_2 (\cos(\omega_2 t - \mathbf{k}_1^2 \mathbf{r}) + \cos(\omega_2 t - \mathbf{k}_2^2 \mathbf{r})) + \mathbf{e}_1 E_1 \cos(\omega_1 t + k_1 z) + \mathbf{e}_3 E_3 \cos(\omega_3 t - k_3 z), \quad (1)$$

где волна с ω_1, k_1 распространяется в отрицательном, волна с ω_3, k_3 – в положительном направлении оси Z , а в плоскости XY действуют три волны с одинаковыми частотами, но разными направлениями волновых векторов $\mathbf{k}_2^i \wedge \mathbf{k}_2^j = 120^\circ$ ($i \neq j$; $i, j = 1, 2, 3$).

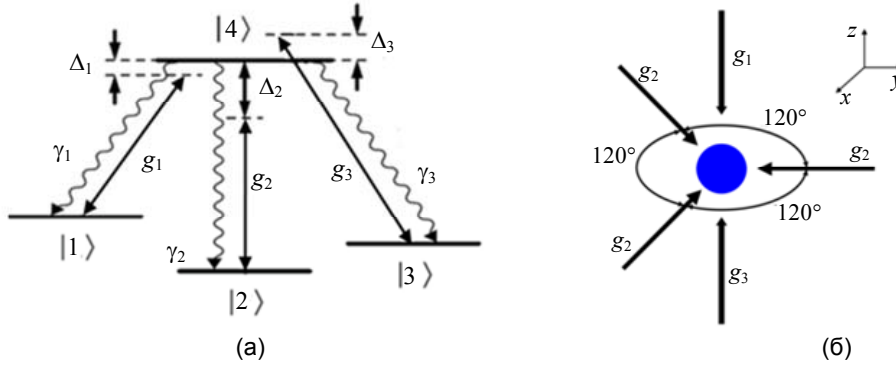


Рис. 1. (а): Схема квантовых уровней атома в «tripod»-конфигурации. Переходы $|m\rangle \rightarrow |4\rangle$, ($m = 1-3$) разрешены в дипольном приближении, а переходы между нижними состояниями запрещены. Частоты Раби световых волн и отстройки возбуждающих полей относительно частот переходов ω_{m4} , ($m = 1-3$) обозначены g_m и Δ_m ($m = 1-3$) соответственно. (б): Взаимная ориентация оптических полей. В плоскости XY три бегущие волны под углами 120° друг к другу формируют систему стоячих волн, которые обеспечивают пространственную зависимость атомных населенностей

При этом, согласно правилам отбора, вектора $\mathbf{e}_{1,3}$ задают круговую поляризацию в положительном и отрицательном направлении соответственно, а \mathbf{e}_2 определяет линейную поляризацию.

Далее для описания динамики системы на рис. 1 используем уравнения для элементов матрицы плотности $\tilde{\rho}_{ij}(x, y, t)$ в виде

$$i\hbar \dot{\tilde{\rho}}_{ij} = [H, \tilde{\rho}]_{ij} + i\Gamma_{ij} \tilde{\rho}_{ij} \quad (2)$$

с гамильтонианом в представлении взаимодействия в виде $H = H_0 + V$, где H_0 задает внутреннее состояние системы без возмущения, а $V = -\frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^3 (\mathbf{d}_{i4} \cdot \mathbf{e}_i) E_i$ определяет взаимодействие с полем оптического излучения (1) для переходов $|m\rangle \rightarrow |4\rangle$, $m = 1-3$, с матричным элементом оператора дипольного взаимодействия \mathbf{d}_{i4} . В выражении (2) матрица Γ_{ij} задает скорости релаксации элементов $\tilde{\rho}_{ij}(x, y, t)$. При этом скорость релаксации диагональных матричных элементов (т.е. населенностей) определяется естественной шириной 2γ верхнего возбужденного состояния системы $2\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3$, а скорости релаксации недиагональных матричных элементов Γ_{ij} ($i \neq j$) могут, наряду со скоростью естественного распада, учитывать и другие возможные механизмы уширения (столкновения, конечную ширину спектра возбуждающих полей и пр.). В результате уравнения для элементов матрицы плотности $\tilde{\rho}_{ij}(x, y, t)$ системы уровней в «tripod»-конфигурации имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} i\dot{\rho}_{11} &= g_1(\rho_{14} - \rho_{41}) + i\gamma_1 \rho_{44}, \\ i\dot{\rho}_{22} &= g_2(\rho_{24} - \rho_{42}) + i\gamma_2 \rho_{44}, \\ i\dot{\rho}_{33} &= g_3(\rho_{34} - \rho_{43}) + i\gamma_3 \rho_{44}, \\ i\dot{\rho}_{44} &= g_1(\rho_{41} - \rho_{14}) + g_2(\rho_{42} - \rho_{24}) + g_3(\rho_{43} - \rho_{34}) - i(\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3)\rho_{44}, \\ i\dot{\rho}_{14} &= g_1(\rho_{11} - \rho_{44}) + g_2\rho_{12} + g_3\rho_{13} + (\Delta_1 - i\Gamma_{14})\rho_{14}, \\ i\dot{\rho}_{24} &= g_2(\rho_{22} - \rho_{44}) + g_1\rho_{21} + g_3\rho_{23} + (\Delta_2 - i\Gamma_{24})\rho_{24}, \\ i\dot{\rho}_{34} &= g_3(\rho_{33} - \rho_{44}) + g_1\rho_{31} + g_2\rho_{32} + (\Delta_3 - i\Gamma_{34})\rho_{34}, \\ i\dot{\rho}_{12} &= g_2\rho_{14} - g_1\rho_{42} + (\Delta_1 - \Delta_2)\rho_{12}, \\ i\dot{\rho}_{13} &= g_3\rho_{14} - g_1\rho_{43} + (\Delta_1 - \Delta_3)\rho_{13}, \\ i\dot{\rho}_{23} &= g_3\rho_{24} - g_2\rho_{43} + (\Delta_2 - \Delta_3)\rho_{23}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$ ($i \neq j$). При выводе системы уравнений (3) мы пренебрегли членами, содержащими временные осцилляции на удвоенной оптической частоте (резонансное приближение) и использовали так называемое приближение вращающейся волны, которое состоит в замене недиагональных матричных элементов: оптических $\tilde{\rho}_{m4} = \rho_{m4} e^{i\Delta_m t}$ ($m = 1-3$) и низкочастотных когерентностей

$$\tilde{\rho}_{12} = \rho_{12} e^{i(\Delta_1 - \Delta_2)t}, \tilde{\rho}_{13} = \rho_{13} e^{i(\Delta_1 - \Delta_3)t}, \tilde{\rho}_{23} = \rho_{23} e^{i(\Delta_2 - \Delta_3)t}.$$

Существенно заметить, что среда считается оптически тонкой, что означает однородность поля по мере распространения светового пучка в среде. Согласно (1), на центральном переходе системы (рис. 1, а) действуют три поля с одинаковой частотой, но разным направлением волновых векторов. Для того чтобы фиксировать направления, примем для скалярных произведений в (1) выражения

$$\mathbf{k}_1 \mathbf{r} = -k_2 y, \mathbf{k}_2 \mathbf{r} = \frac{1}{2} k_2 y - \frac{\sqrt{3}}{2} k_2 x, \mathbf{k}_3 \mathbf{r} = \frac{1}{2} k_2 y + \frac{\sqrt{3}}{2} k_2 x. \quad (4)$$

Таким образом, выражения (4) явно демонстрируют, что в плоскости XU три бегущие разнонаправленные волны действительно задают систему стоячих волн, которые обеспечивают координатную зависимость населенностей состояний квантовой системы.

Результаты вычислений и обсуждения

Система уравнений для элементов матрицы плотности (3) полностью определяет динамику квантовой системы в «tripod»-конфигурации для поля (1). Для исследования пространственной зависимости населенностей (т.е. диагональных элементов матрицы плотности) мы используем стационарное решение уравнений (3), которое может быть получено в пренебрежении временными производными в левых частях по сравнению с членами в правых частях, содержащих скорости распада. Физически это означает, что рассматриваются значения элементов матрицы плотности на временах, значительно превышающих $t \gg \gamma^{-1}, \Gamma_{ij}^{-1}$.

На рис. 2 представлены пространственные зависимости населенностей всех состояний системы в «tripod»-конфигурации. Видно, что в нашем случае действительно имеет место двумерная (в плоскости XU) локализация населенностей для всех состояний системы. При выбранных параметрах только населенность ρ_{11} демонстрирует пространственную зависимость в виде «холмов», а для остальных населенностей имеют место «кратеры». При этом в определенных точках плоскости XU максимальные значения населенностей первых двух состояний могут достигать единицы. Это означает, что в этих точках сосредоточена вся населенность квантовой системы.

С другой стороны, среди пространственных структур на рис. 2 наиболее интересными являются зависимости населенностей уровней $|2\rangle, |3\rangle$ и $|4\rangle$ $\rho_{22}, \rho_{33}, \rho_{44}$. Так, пространственные зависимости в плоскости XU населенностей третьего и четвертого уровней ρ_{33}, ρ_{44} демонстрируют двойную структуру – так называемые «двойные кратеры», в отличие от обычного «кратера» (рис. 2, в). При этом вид сверху наглядно показывает сложную структуру пространственных зависимостей (рис. 2, е, з). Наибольший интерес здесь представляет график населенности второго уровня ρ_{22} . Полученный кратер имеет крайне узкие стенки, что означает высокую степень локализации, которая для данных параметров составляет 0,04 длины волны падающего излучения.

Заключение

Исследована возможность двумерной локализации населенности в «tripod»-системе при взаимодействии с полем бегущих световых волн. Найдено, что необходимым условием зависимости населенностей от пространственных координат в плоскости XU является возбуждение центрального перехода «tripod»-системы полем разнонаправленных линейно поляризованных бегущих волн. Возникающие при этом двумерные зависимости могут иметь сложные структуры, такие как, например, «двойные кратеры».

Отметим, что для реализации двумерной локализации не важен способ получения пространственной зависимости линейно поляризованного поля, резонансного центральному переходу «tripod»-системы. Исходя из этого, полученное двумерное распределение населенностей можно рассматривать как своеобразную визуализацию распределения интенсивности светового поля. Характеристики такого «экрана» определяются параметрами условий, при которых можно наблюдать перераспределение населенностей.

В нашем случае инертность, т.е. быстрота отклика на воздействие, характеризуется временем оптической накачки $t \sim \frac{\gamma}{g^2} = \gamma^{-1} \sim 10^{-7}$ с ($g = \gamma$), а минимальный размер «зерна», т.е. минимальный размер

области, который может быть отражен таким «экраном», составляет $\delta x \geq v_R \gamma^{-1} \sim 3 \cdot 10^{-3} \lambda \sim 2$ нм. При этом возможность получения такого разрешения непосредственно связана со значениями скоростей атомов и может быть реализована на атомных ансамблях, охлажденных до температуры энергии отдачи $T_R = E_R / k_B = \hbar^2 k^2 / 2mk_B$, где k_B – постоянная Больцмана.

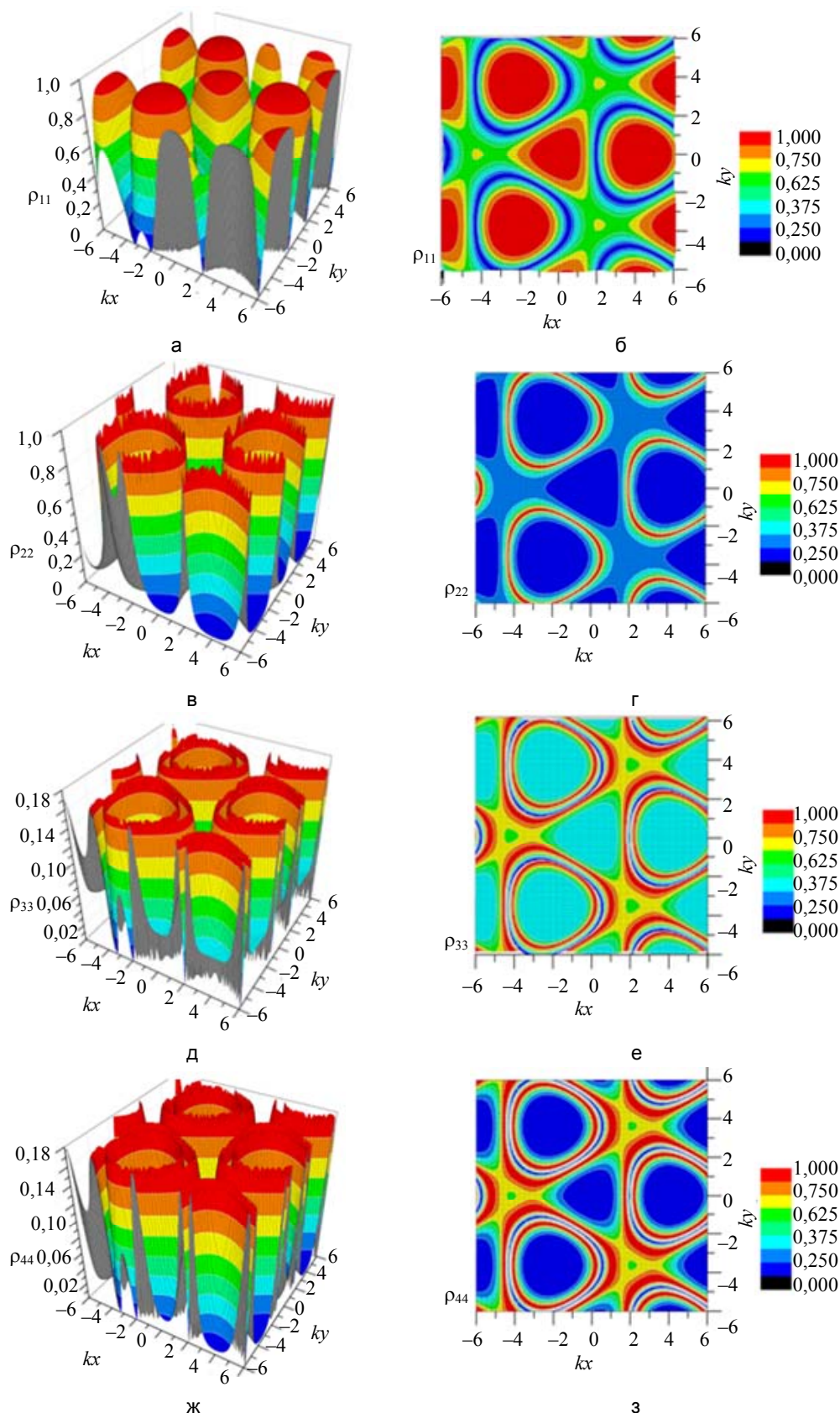


Рис. 2. Координатные зависимости населенностей состояний «tripod»-системы: $\rho_{11}(x, y)$ (а); $\rho_{22}(x, y)$ (в); $\rho_{33}(x, y)$ (д); $\rho_{44}(x, y)$ (ж). Справа (б, г, з, е) представлен вид сверху для каждой населенности. Параметры взаимодействия и релаксационные константы системы были выбраны в виде $\gamma_{1,2,3} = \gamma$, $\Gamma_{14} = \Gamma_{24} = \Gamma_{34} = 1,5\gamma$, $g_1 = \gamma$, $g_2 = 3\gamma$, $g_3 = 2\gamma$, $\Delta_1 = \gamma$, $\Delta_2 = 4\gamma$, $\Delta_3 = -2\gamma$

Литература

1. Qamar S., Zhu S.-Y., Zubairy M.S. Atom localization via resonance fluorescence // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2000. V. 61. N 6. P. 1–5.
2. Agarwal G.S., Kapale K.T. Subwavelength atom localization via coherent population trapping // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2006. V. 39. N 17. P. 3437–3446.
3. Xu J., Hu X.-M. Sub-half-wavelength localization of an atom via trichromatic phase control // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2007. V. 40. N 7. P. 1451–1459.
4. Ivanov V., Rozhdestvensky Y. Two-dimensional atom localization in a four-level tripod system in laser fields // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2010. V. 81. N 3. Art. N 033809.
5. Qamar S., Zhu S.-Y., Zubairy M.S. Precision localization of single atom using Autler–Townes microscopy // *Optics Communications*. 2000. V. 176. N 4. P. 409–416.
6. Ghafoor F., Qamar S., Zubairy M.S. Atom localization via phase and amplitude control of the driving field // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2002. V. 65. N 4. P. 0438191-0438198.
7. Paspalakis E., Knight P.L. Localizing an atom via quantum interference // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2001. V. 63. N 7. P. 065802/1-065802/4.
8. Paspalakis E., Terzis A.F., Knight P.L. Quantum interference induced sub-wavelength atomic localization // *Journal of Modern Optics*. 2005. V. 52. N 12. P. 1685–1694.
9. Liu C., Gong S., Cheng D., Fan X., Xu Z. Atom localization via interference of dark resonances // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2006. V. 73. N 2. Art. N 025801.
10. Carreño F., Antón M.A. Gradient echo memory in a tripod-like dense atomic medium // *Optics Communications*. 2010. V. 283. P. 4787–4795.
11. Gornyi M.B., Matisov B.G., Rozhdestvenskii Yu.V. Coherent population trapping in an optically dense medium // *Sov. Phys. JETP*. 1989. V. 68. N 4. P. 728–732.
12. Агапьев Б.Д., Горный М.Б., Матисов Б.Г., Рождественский Ю.В. Когерентное пленение населенностей в квантовых системах // *Успехи физических наук*. 1993. Т. 163. № 9. С. 1–36.
13. Скалли М.О., Зубайри М.С. Квантовая оптика : Пер. с англ. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 510 с.
14. Стенхольм С. Основы лазерной спектроскопии : Пер. с англ. М.: Мир, 1987. 312 с.
15. Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы : Пер. с англ. М.: Мир, 1978. 223 с.

- Ефремова Екатерина Александровна** – кандидат физико-математических наук, доцент, СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия, Efremova.kate@gmail.com
- Гордеев Максим Юрьевич** – аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, mxmgordeev@gmail.com
- Рождественский Юрий Владимирович** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, rozd-yu@mail.ru
- Ekaterina A. Efremova** – PhD, Associate professor, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, Efremova.kate@gmail.com
- Maxim Yu. Gordeev** – postgraduate, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, mxmgordeev@gmail.com
- Yuri V. Rozhdestvensky** – D.Sc., Senior scientific researcher, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, rozd-yu@mail.ru

Принято к печати 08.05.14

Accepted 08.05.14

УДК 681.787:519.245

РЕКУРРЕНТНЫЙ АЛГОРИТМ ОБРАБОТКИ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ НА ОСНОВЕ МУЛЬТИОБЛАЧНОЙ МОДЕЛИ ПРЕДСКАЗАНИЯ

М.А. Волынский^а, И.П. Гуров^а, П.С. Скаков^а^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, maxim.volynsky@gmail.com

Аннотация. Рассматривается модификация рекуррентного алгоритма обработки дискретной последовательности отсчетов интерферометрического сигнала, который основан на предсказании последующего отсчета сигнала при задании набора («облака») значений вектора параметров сигнала методом Монте-Карло, сравнении с измеренным значением сигнала и использованием полученной невязки для уточнения значений параметров сигнала на каждом шаге дискретизации. В предлагаемом модифицированном алгоритме использована концепция мультиоблачной модели предсказания, когда формируется набор нормально распределенных облаков с математическими ожиданиями, выбранными на основе критерия минимума невязки предсказания и наблюдения. Проведена экспериментальная апробация предлагаемого метода на примере оценивания начальной фазы полос в интерферометрии фазового сдвига, при этом дисперсия оценки сигнала, реконструированного по оцененной начальной фазе, относительно исходного сигнала не превышает 2% от максимального значения сигнала. Показано, что использование предложенного алгоритма позволяет избежать 2π -неоднозначности и обеспечить устойчивое восстановление фазы интерференционной картины сложного вида без использования априорной информации о распределении фазы интерференционных полос. Использование предлагаемого алгоритма применительно к оцениванию параметров интерферометрических сигналов позволяет повысить устойчивость фильтра к влиянию случайных помех и понизить требования к точности априорного задания параметров фильтрации по сравнению с обычной (однооблачной) реализацией последовательного метода Монте-Карло.

Ключевые слова: анализ интерферометрических сигналов, байесовский фильтр, последовательный метод Монте-Карло, мультиоблачная предсказание.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01) и в рамках гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук № МК-1455.2014.8.

THE RECURRENT ALGORITHM FOR INTERFEROMETRIC SIGNALS PROCESSING BASED ON MULTI-CLOUD PREDICTION MODEL

M.A. Volynsky^a, I.P. Gurov^a, P.S. Skakov^a^aITMO University, Saint Petersburg, Russia, maxim.volynsky@gmail.com

Abstract. The paper deals with modification of the recurrent processing algorithm for discrete sequence of interferometric signal samples. The algorithm is based on subsequent reference signal prediction at specifying a set (“cloud”) of values for signal parameters vector by Monte Carlo method, comparison with the measured signal value and usage of the residual for enhancing the values of signal parameters at each discretization step. The concept of multi-cloud prediction model is used in the proposed modified algorithm. A set of normally distributed clouds is created with expectation values selected on the base of criterion of minimum residual between prediction and observation values. Experimental testing of the proposed method applied to estimation of fringe initial phase in the phase shifting interferometry has been conducted. The estimate variance of the signal reconstructed according to estimated initial phase from initial signal does not exceed 2% of the maximum signal value. It has been shown that the proposed algorithm application makes it possible to avoid the 2π -ambiguity and ensure sustainable recovery of interference fringes phase of a complicated type without involving a priori information about interference fringe phase distribution. The usage of the proposed algorithm applied to estimation of interferometric signals parameters gives the possibility for improving the filter stability with respect to influence of random noise and decreasing requirements for accuracy of a priori filtration parameters setting as compared with conventional (single-cloud) implementation of the sequential Monte Carlo method.

Keywords: interferometric signals analysis, Bayesian filter, sequential Monte Carlo method, multi-cloud prediction.

Acknowledgements. The work was done under government financial support for the leading universities of the Russian Federation (grant 074-U01) and within the Russian Federation President grant for the government support of young Russian PhD scientists № МК-1455.2014.8.

Введение

Интерферометрические методы измерений благодаря их высокой точности востребованы во многих областях науки и техники (см., например, [1, 2]). В реальных интерферометрических системах регистрируемые сигналы искажены случайными помехами различной природы. Повышение вычислительной мощности при использовании современных компьютерных технологий позволило реализовать ряд быстродействующих алгоритмов обработки интерферометрических сигналов и картин полос, устойчивых к случайным внешним воздействиям (см., например, [3, 4]), однако дальнейшее повышение устойчивости алгоритмов и минимизация погрешностей обработки данных в интерферометрических системах является актуальной задачей.

Алгоритмы, основанные на преобразовании Фурье, требуют наличия полной реализации сигнала, что ограничивает их быстродействие. Альтернативный подход состоит в использовании рекуррентных алгоритмов, что позволяет обрабатывать данные по мере их поступления. С учетом возможных случай-

ных помех при формировании и регистрации сигналов целесообразно использовать формализм стохастических дифференциальных уравнений для описания моделей сигналов и эволюции их параметров.

В последние годы активно исследовались рекуррентные алгоритмы обработки интерферометрических сигналов на основе фильтра Калмана [4–8]. Результаты этих исследований позволили выявить ряд недостатков фильтра Калмана, главным из которых является неустойчивость фильтра в случае использования нелинейных математических моделей сигнала и (или) эволюции его параметров. Так, например, расширенный фильтр Калмана применительно к анализу интерферометрических сигналов предполагает локальную линеаризацию модели квазигармонического сигнала, что делает фильтр неоптимальным по критерию минимума средней квадратической ошибки оценки параметров сигнала. Особый интерес представляют алгоритмы, предполагающие замену использования нелинейных функциональных преобразований статистической аппроксимацией оцениваемых параметров. Одним из таких алгоритмов является сигма-точечный фильтр Калмана (Unscented Kalman filter) [9], примененный в [8] для задачи обработки данных в оптической когерентной томографии. Сигма-точечный фильтр Калмана предполагает замену оцениваемых параметров на так называемые сигма-точки [9], вычисляемые на основе априорной информации о статистических моментах отклонений параметров, что позволяет отказаться от использования нелинейных функциональных преобразований с сохранением устойчивости алгоритма. Последовательный метод Монте-Карло [10, 11] основывается на более общем подходе по сравнению с сигма-точечным фильтром Калмана и состоит в статистической аппроксимации оцениваемых параметров с использованием множества («облака») значений параметров и соответствующего набора значений сигнала, что при обработке повышает устойчивость метода к случайным помехам благодаря выбору наиболее близких к истинным элементов облака на основе байесовского подхода.

При использовании общепринятой [10, 11] реализации последовательного метода Монте-Карло с однооблачным предсказанием в ряде случаев истинные значения параметров лежат близко к границам облака или за его пределами при прогнозировании их локализации в центре облака. Использование мультиоблачного предсказания позволяет более корректно оценивать параметры, истинные значения которых не попадают в центр конкретного облака. Таким образом, в настоящей работе предлагается модификация последовательного метода Монте-Карло путем использования мультиоблачной модели предсказания, что позволяет дополнительно повысить устойчивость фильтра к неточно заданным при инициализации алгоритма дисперсиям параметров.

Последовательный метод Монте-Карло с мультиоблачной моделью предсказания

Наблюдаемый сигнал может быть описан в дискретном времени $t(k) = k\Delta t$, где $k = 0, 1, \dots, K-1$ – номер дискретного отсчета, Δt – шаг дискретизации, с помощью уравнения наблюдения

$$\mathbf{s}(k) = \mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}(k)) + \mathbf{n}(k), \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\theta}$ – вектор параметров; $\mathbf{h}(\cdot)$ – известная векторная функция; \mathbf{n} – белый гауссовский шум наблюдения с нулевым средним. Задача оценивания элементов вектора $\boldsymbol{\theta}$ по набору наблюдений сигнала \mathbf{s} сводится к оцениванию условного математического ожидания $E[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{s}]$. Если функция \mathbf{h} в уравнении (1) линейна, то задача решается с помощью линейного фильтра Калмана [10, 12]. В общем случае необходимо определить распределение вероятностей $p(k) = p[\boldsymbol{\theta}(k) | \mathbf{s}(k)]$, после чего выбрать наиболее вероятное значение вектора параметров $\boldsymbol{\theta}$.

Функция $p(k)$ может быть определена рекурсивно с помощью байесовской формулы [13]

$$p[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{s}(k+1)] = \frac{p[\mathbf{s}(k+1) | \boldsymbol{\theta}] p[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{s}(k)]}{\int p[\mathbf{s}(k+1) | \boldsymbol{\theta}] p[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{s}(k)] d\boldsymbol{\theta}}, \quad (2)$$

где $p[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{s}(k)]$ – предполагаемое распределение, спрогнозированное на шаге k ,

$$p[\mathbf{s}(k) | \boldsymbol{\theta}] = [(2\pi)^k \text{diag}(\mathbf{R}_n)]^{-0.5} \exp\{-0.5[\mathbf{s}(k) - \mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}(k))] \mathbf{R}_n^{-1} [\mathbf{s}(k) - \mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}(k))]\}, \quad (3)$$

\mathbf{R}_n – ковариационная матрица шума наблюдения; $\text{diag}(\mathbf{R}_n)$ – ее диагональные элементы.

Фильтр, построенный на основе формул (1)–(3), может быть реализован с помощью последовательного метода Монте-Карло [10, 11]. Алгоритм включает следующие шаги: генерация набора из N векторов параметров с известным (прогнозируемым) законом распределения $p[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{s}(k)]$ и заданными статистическими моментами (математическим ожиданием и дисперсией); вычисление для каждого вектора весового коэффициента как величины, обратной невязке предсказания, с помощью функции \mathbf{h} и наблюдения; отбор M векторов ($M < N$) с максимальными весами; их сдвиг в соответствии с известной моделью эволюции параметров; формирование нового набора из N векторов с математическим ожиданием, равным математическому ожиданию отобранных M векторов. Следует отметить, что рассматриваемый алгоритм аналогичен генерации случайных векторов с распределением (2) методом Монте-Карло. Детально реализация последовательного метода Монте-Карло применительно к обработке интерферометрических сигналов рассмотрена, например, в работе [14].

Использование одного облака векторов параметров для предсказания параметров как математического ожидания облака и генерация нового облака с вычисленным математическим ожиданием на следующем шаге фильтрации иногда не позволяют в достаточной степени минимизировать невязку предсказания и наблюдения на следующем шаге фильтрации, что особенно заметно в случае, если истинные значения параметров лежат близко к границам облака или за его пределами. Указанный недостаток однооблачного предсказания при обработке параметров интерферометрических сигналов проявляется, например, при оценивании фазы в точках, где значения фазы близки к 2π рад, и малые ошибки могут вызвать 2π -неустойчивость.

При использовании мультиоблачной модели предсказания предлагается заменить генерацию одного облака для каждого из параметров на генерацию M облаков с математическими ожиданиями, равными значениям параметров соответствующих M векторов. При этом предсказание значений параметров как математического ожидания полученного мультиоблака оказывается ближе к истинным значениям в случаях, когда однооблачный подход не позволяет корректно оценить значения параметров сигналов или вносит 2π -неустойчивость.

На рис. 1 иллюстрируется разница между однооблачной и мультиоблачной моделями предсказания. Видно, что математическое ожидание мультиоблака (серый круг на рис. 1, б) ближе к истинному значению параметров (черный круг на рис. 1), чем математическое ожидание, предсказанное в соответствии с традиционной интерпретацией алгоритма (прозрачный круг на рис. 1).

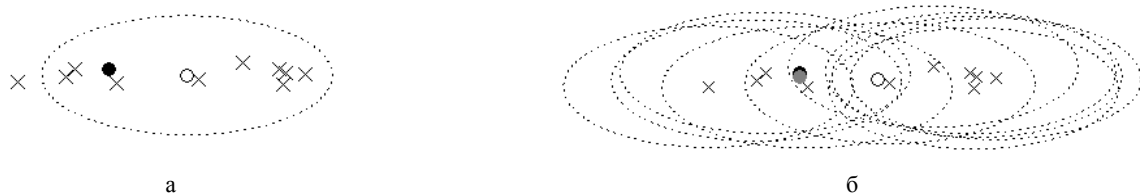


Рис. 1. Однооблачное (а) и мультиоблачное (б) предсказание. \times – точки, выбранные по критерию наибольшей вероятности; \circ – однооблачное предсказание; \bullet – мультиоблачное предсказание; \bullet – наблюдение (истинное значение); эллипсами обозначены границы облаков (размеры полуосей равны дисперсиям параметров)

Обработка интерферометрических сигналов на примере оценивания фазы

В простейшем случае скалярного наблюдения модель интерферометрического сигнала в уравнении (1) может быть задана как

$$h(\boldsymbol{\theta}(k)) = A(k) \cos(\Phi(k)), \quad (4)$$

где $A(k)$ – амплитуда сигнала, $\Phi(k)$ – полная фаза, $\boldsymbol{\theta} = (A, \Phi)^T$. В случае существенной нелинейности функции $\Phi(k)$ в выражении (4) интерес представляет способность фильтра правильно оценивать ее значение без дополнительной априорной информации о характере нелинейности. Для примера сгенерируем сигнал с квадратично возрастающей фазой $\Phi(k)$ (рис. 2) и зададим линейную модель эволюции параметров

$$\boldsymbol{\theta}(k+1) = \boldsymbol{\theta}(k) + (0, \Delta\phi)^T, \quad (5)$$

где $\Delta\phi$ – фиксированное приращение фазы. Для сигнала на рис. 1 закон изменения фазы $\Phi(k) = 0,6^2 k^2$, отношение сигнал/шум составляет 20 дБ.

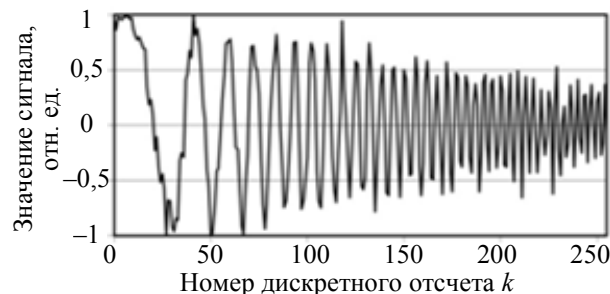


Рис. 2. Пример интерферометрического сигнала с квадратично возрастающей фазой и линейно убывающей амплитудой

При использовании однооблачного подхода выбор параметра $\Delta\phi$ в уравнении (5) существенно влияет на корректность оценки фазы: при выборе слишком малого значения $\Delta\phi$ оценка фазы корректна лишь на первых отсчетах сигнала, где приращение фазы действительно невелико, при увеличении значения $\Delta\phi$ оценка на последних отсчетах сигнала улучшается, однако появляются ошибки на 2π рад на пер-

вых отсчетов. На рис. 3 показаны результаты оценивания фазы сигнала, изображенного на рис. 2, при использовании однооблачной (рис. 3, а, б) и мультиоблачной (рис. 3, в) модели предсказания. Входные параметры алгоритма: генерируемое количество точек – 200, отбираемое количество точек – 10, среднее квадратичное отклонение амплитуды и фазы – 0,6 усл. ед. и 0,03 рад соответственно, приращение фазы – 1 рад для рис. 3, а, в, и 1,2 рад для рис. 3, б. На рис. 3, а, б, пунктирными линиями иллюстрируются истинные значения фазы, сплошными линиями – оценки фазы с описанными ошибками. Использование мультиоблачного предсказания делает алгоритм робастным по отношению к выбору значения параметра $\Delta\phi$ (рис. 3, в).

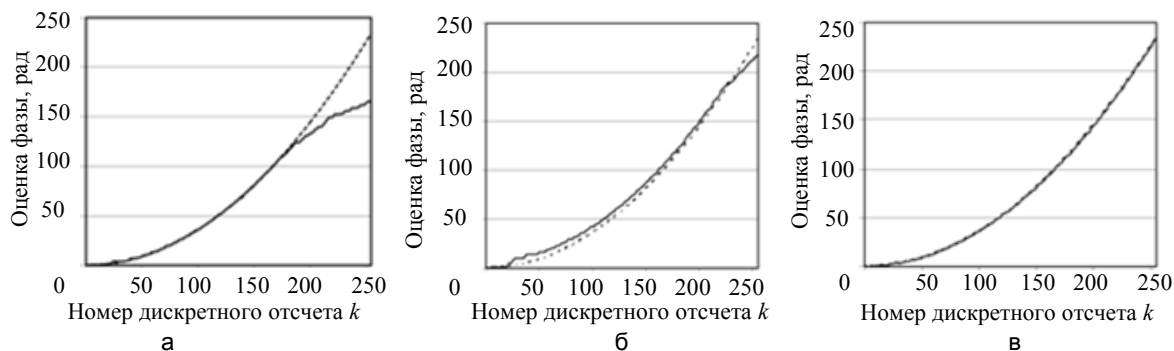


Рис. 3. Оценка фазы сигнала (рис. 2) с использованием однооблачного предсказания с малым (а) и большим (б) приращением фазы $\Delta\phi$ (пунктирные линии – истинные значения фазы, сплошные линии – оценки фазы с описанными ошибками) и с использованием мультиоблачной модели предсказания (в)

Оценивание фазы сигнала с помощью последовательного метода Монте-Карло с мультиоблачной моделью предсказания может быть использовано при анализе экспериментальных картин интерференционных полос в интерферометрии фазового сдвига [4, 15, 16], поскольку фазовый сдвиг, вносимый, например, с помощью пьезоэлемента, в условиях реального эксперимента оказывается не всегда одинаковым и не идеально линейным.

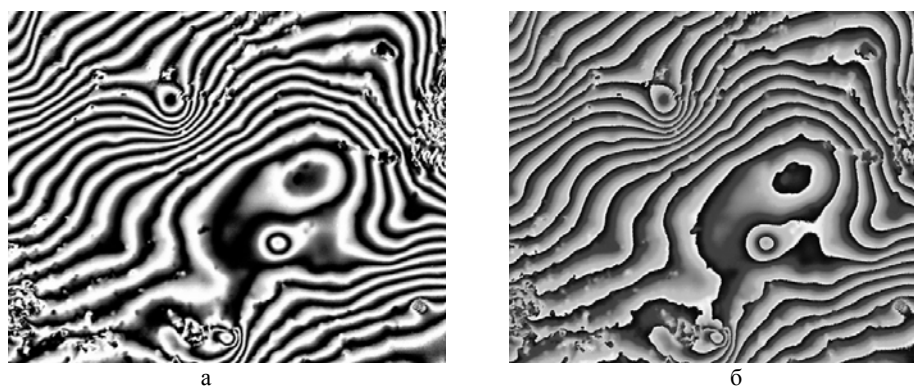


Рис. 4. Интерференционная картина с нормированной амплитудой (а) и оценка начальной фазы с использованием предложенного алгоритма (б). Размер исследуемой поверхности $3 \times 3 \text{ мм}^2$

На рис. 4 иллюстрируется результат работы алгоритма при восстановлении начальной фазы полос для серии из 50 интерференционных картин, зарегистрированных при исследовании гладкой металлической поверхности в интерферометре Майкельсона. На рис. 4, а, представлена интерференционная картина, завершающая серию. Дисперсия оценки сигнала, реконструированного по оцененной начальной фазе исходного сигнала, не превышает 2% от максимального значения сигнала. Следует отметить, что при использовании алгоритма с однооблачной моделью предсказания и теми же выходными параметрами дисперсия составляет 34%, что свидетельствует о расхождении фильтра для примерно трети точек изображения. Из рис. 4 видно, что использование предложенного алгоритма позволяет избежать 2π -неоднозначности и обеспечить устойчивое восстановление фазы интерференционной картины сложного вида без использования априорной информации о распределении фазы интерференционных полос.

Заключение

В работе предложен модифицированный последовательный метод Монте-Карло на основе мультиоблачной модели предсказания. Использование алгоритма применительно к оцениванию параметров интерферометрических сигналов позволяет повысить устойчивость фильтра к влиянию случайных помех и понизить требования к точности априорного задания параметров фильтрации по сравнению с обычной (однооблачной) реализацией последовательного метода Монте-Карло.

Экспериментальная апробация предложенной модификации алгоритма применительно к обработке интерферограмм фазового сдвига показала возможность устойчивого восстановления фазы в условиях искажений распределения фазы.

Литература

1. Malacara D. Optical Shop Testing. 2nd ed. NY: Wiley, 1992. 792 p.
2. Hariharan P. Optical interferometry // Reports on Progress in Physics. 1991. V. 54. N 3. P. 339–390.
3. Huntley J.M. Automated fringe pattern analysis in experimental mechanics: a review // Journal of Strain Analysis for Engineering Design. 1998. V. 33. N 2. P. 105–125.
4. Васильев В.Н., Гуров И.П. Компьютерная обработка сигналов в приложении к интерферометрическим системам. СПб: БХВ-Санкт-Петербург, 1998. 240 с.
5. Gurov I., Ermolaeva E., Zakharov A. Analysis of low-coherence interference fringes by the Kalman filtering method // Journal of the Optical Society of America A. 2004. V. 21. N 2. P. 242–251.
6. Gurov I., Volynsky M. Interference fringe analysis based on recurrence computational algorithms // Optics and Lasers in Engineering. 2012. V. 50. N 4. P. 514–521.
7. Захаров А.С. Нелинейный анализ стохастических параметров интерференционных систем: дис. ... канд. техн. наук ... по спец. 05.13.01. защищена 20.12.05. СПб, 2005. 157 с.
8. Волынский М.А. Рекуррентные алгоритмы обработки данных в оптической когерентной томографии: дис. ... канд. техн. наук ... по спец. 05.13.01. защищена 20.12.11. СПб, 2011. 112 с.
9. Wan E.A., van der Merwe R. The unscented Kalman filter / In: Kalman Filtering and Neural Networks. NY: John Wiley & Sons, 2001. P. 221–280.
10. Simon D. Optimal state estimation: Kalman, H_∞ , and Nonlinear Approaches. NY: John Wiley & Sons, Inc., 2006. 526 p.
11. Doucet A., de Freitas N., Gordon N. Sequential Monte Carlo methods in practice. NY: Springer-Verlag, 2001. 583 p.
12. Перов А.И. Статистическая теория радиотехнических систем. М.: Радиотехника, 2003. 400 с.
13. Øksendal B.K. Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications. 6th ed. Berlin: Springer, 2003. 379 p.
14. Волынский М.А., Гуров И.П., Ермолаев П.А., Скаков П.С. Динамическое оценивание параметров интерферометрических сигналов на основе последовательного метода Монте-Карло // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2014. № 3 (91). С. 18–23.
15. Zhao W, Cao G. A real-time adaptive phase-shifting interferometry // Proc. of SPIE - The International Society for Optical Engineering. 2012. V. 8493. Art. N 849313.
16. Chen L.-C., Yeh S.-L., Tapilouw A.M., Chang J.-C. 3-D surface profilometry using simultaneous phase-shifting interferometry // Optics Communications. 2010. V. 283. N 18. P. 3376–3382.

Волынский Максим Александрович	– кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, maxim.volynsky@gmail.com
Гуров Игорь Петрович	– доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, gurov@mail.ifmo.ru
Скаков Павел Сергеевич	– ассистент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, pavelsx@gmail.com
Maxim A. Volynsky	– PhD, Associate professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, maxim.volynsky@gmail.com
Igor P. Gurov	– D.Sc., Professor, Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, gurov@mail.ifmo.ru
Pavel S. Skakov	– assistant, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, pavelsx@gmail.com

Принято к печати 02.04.14
Accepted 02.04.14

УДК [681.787+519.245]:[59.085+595.771]

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ТОМОГРАФИИ С ОБРАБОТКОЙ ДАННЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

П.С. Скаков^а, М.А. Волынский^а, И.П. Гуров^а, П.А. Ермолаев^а

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, maxim.volynsky@gmail.com

Аннотация. Показана возможность применения последовательного метода Монте-Карло для обработки данных в корреляционной широкопольной оптической когерентной томографии для исследования биологических объектов. Предлагаемый алгоритм основан на статистической аппроксимации оцениваемых параметров взамен использования нелинейных функциональных преобразований. Приведены экспериментальные результаты обработки данных при исследованиях с помощью широкопольного оптического когерентного томографа, построенного на базе микроинтерферометра Линника, с последующим оцениванием огибающих сигналов последовательным методом Монте-Карло. Установлено, что результаты обработки содержат меньшее количество артефактов, обусловленных неустойчивостью работы алгоритма, по сравнению с результатами, полученными ранее с использованием метода расширенной фильтрации Калмана. Обработка данных широкопольного оптического когерентного томографа на основе последовательного метода Монте-Карло позволила наблюдать микроструктуру объекта с разрешением примерно 1 мкм. Экспериментальная апробация последовательного метода Монте-Карло проведена на примере анализа сигналов, полученных при исследовании переднего крыла комара-пискуна *Culex pipiens*, поскольку этот объект имеет малые размеры, малую толщину и сложную микроструктуру и поэтому является удобным тестовым объектом. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с результатами наблюдений методами классической микроскопии и представляют интерес для специалистов в области энтомологии и биоинженерии.

Ключевые слова: широкопольная корреляционная оптическая когерентная томография, последовательный метод Монте-Карло, анализ интерферометрических сигналов, биологические объекты.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01) и в рамках гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук № МК-1455.2014.8.

INVESTIGATION OF BIOLOGICAL OBJECTS IN OPTICAL COHERENCE TOMOGRAPHY WITH DATA PROCESSING BY SEQUENTIAL MONTE CARLO METHOD

P.S. Skakov^а, M.A. Volynsky^а, I.P. Gurov^а, P.A. Ermolaev^а

^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, maxim.volynsky@gmail.com

Abstract. A possibility of sequential Monte Carlo method application for data processing in the full-field optical coherent tomography for studying of biological objects is demonstrated. The suggested algorithm is based on statistical approximation of the estimated parameters instead of nonlinear functional transformations. Experimental results of data processing in the studies using full-field optical coherence tomography system based on the Linnik micro-interferometer are given with subsequent signals envelope estimation by sequential Monte Carlo method. It was established that the processing results contain fewer artifacts caused by instability of the algorithm as compared with the previously obtained results using the extended Kalman filtering. Processing of the full-field optical coherence tomography system data involving the sequential Monte Carlo method gave the possibility to observe an object microstructure with resolution of about 1 μm. Experimental testing of sequential Monte Carlo method was performed by analyzing the signals obtained in the study of the front wing of the common house mosquito *Culex pipiens*, because this object has a small size, low thickness and complicated microstructure and, therefore, is a convenient test object. These results are in a good agreement with observations obtained by conventional microscopy techniques and can be of interest for specialists in the field of entomology and bioengineering.

Keywords: full-field time-domain optical coherence tomography, sequential Monte Carlo method, interferometric signals analysis, biological objects.

Acknowledgements. The work was done under government financial support for the leading universities of the Russian Federation (grant 074-U01) and within the Russian Federation President grant for the government support of young Russian PhD scientists № МК-1455.2014.8.

Введение

Методы оптической когерентной томографии в настоящее время широко используются для контроля внутренней микроструктуры слоистых, частично прозрачных и случайно-неоднородных сред (см., например, [1–3]). В основе методов оптической когерентной томографии лежат принципы интерферометрии малой когерентности применительно к рассеивающим неоднородным средам, что обеспечивает разрешение до долей микрометра при восстановлении томографических изображений микроструктуры исследуемых объектов.

Ввиду высокой разрешающей способности в системах оптической когерентной томографии требуется обрабатывать значительные объемы информации, характеризующей исследуемые объекты. Наиболее высокая разрешающая способность как по глубине исследуемой среды, так и в боковом направлении достигается в корреляционных системах широкопольной оптической когерентной томографии [4, 5], осно-

ванных на использовании двухлучевого интерферометра с источником излучения малой когерентности и изменяемой оптической разности хода в интерферометре при регистрации интерференционных полей с помощью видеокамеры. Это позволяет селектировать слои среды по глубине объекта, по значениям огибающей сигнала каждого пикселя в последовательности зарегистрированных видеокладов.

Принимая во внимание случайный характер микроструктуры биологических сред, для обеспечения требуемой достоверности получаемых результатов при обработке данных целесообразно использовать алгоритмы стохастической фильтрации [6]. Алгоритмы на основе фильтрации Калмана применительно к анализу данных в корреляционной оптической когерентной томографии и интерферометрии малой когерентности в достаточной степени исследованы (см., например, [6–10]) и имеют недостатки, один из которых состоит в неустойчивости алгоритмов при существенной локальной нелинейности используемых математических моделей, когда алгоритмы калмановского типа, как известно [6], не являются оптимальными. Особый интерес представляют алгоритмы, предполагающие замену использования нелинейных функциональных преобразований статистической аппроксимацией оцениваемых параметров. Одним из таких алгоритмов является сигма-точный фильтр Калмана (Unscented Kalman filter) [11], примененный в [6, 12] для задачи обработки данных в оптической когерентной томографии. Последовательный метод Монте-Карло [13, 14] основывается на более общем подходе по сравнению с сигма-точечным фильтром Калмана и состоит в статистической аппроксимации оцениваемых параметров с использованием множества («облака») значений параметров и соответствующего набора значений сигнала, что при обработке повышает устойчивость метода к случайным помехам. В настоящей работе рассматривается применение последовательного метода Монте-Карло для обработки интерферометрических сигналов, получаемых в системах корреляционной широкопольной оптической когерентной томографии при исследовании биологических объектов.

Формирование сигналов в широкопольной корреляционной оптической когерентной томографии

Система корреляционной широкопольной оптической когерентной томографии (ОКТ) может быть реализована на базе микроинтерферометра Линника [1, 15, 16]. Принципиальная оптическая схема интерферометра Линника представлена на рис. 1, а.

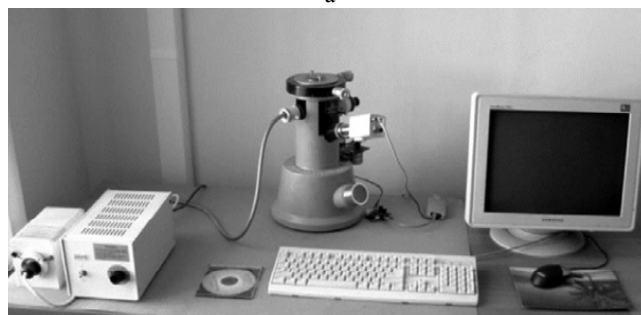
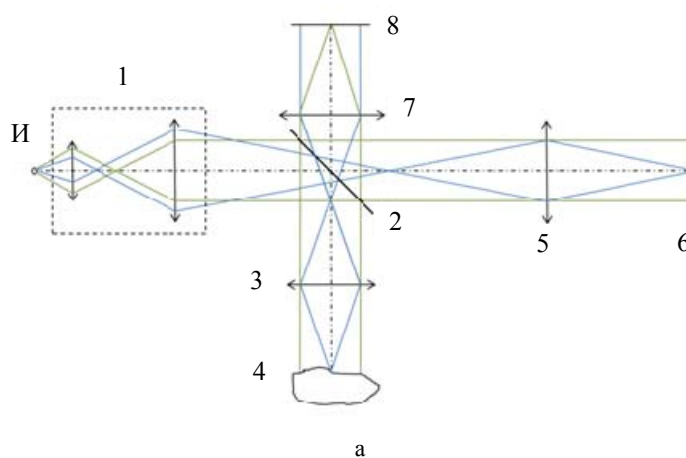


Рис. 1. Оптическая схема (а) и общий вид (б) системы широкопольной корреляционной оптической когерентной томографии: 1 – коллиматор; 2 – светоделитель; 3, 5 – микрообъектив; 4 – объект; 6 – опорное зеркало; 7 – тубусная линза; 8 – плоскость регистрации (матрица видеокамеры); И – источник излучения (выходной торец волокна)

Излучение от источника И с широким спектром, преобразованное в параллельный пучок света с помощью коллиматора 1, делится светоделителем 2 на две ветви – опорную и измерительную. В измерительном плече расположены микрообъектив 3 и исследуемый объект 4. В опорном плече установлены микрообъектив 5, оптически идентичный микрообъективу 3, и опорное зеркало 6. Поле интерференции проецируется с помощью тубусной линзы 7 на матрицу фотодетекторов (видеокамеру) 8. Сканирование по глубине образца осуществляется путем изменения оптической разности хода между опорной и измерительной волнами с помощью перемещения интерферометра относительно образца 4, что эквивалентно перемещению образца 4 вдоль оптической оси.

На рис. 1, б, представлен общий вид макета на основе модифицированного микроинтерферометра МИИ-4, реализующего представленную оптическую схему с автоматическим управлением и регистрацией видеокадров при помощи видеокамеры. В качестве источника излучения использована галогеновая лампа, излучение которой вводится в оптическое волокно. На схеме в позиции И размещается выходной торец волокна, который можно рассматривать как источник излучения конечных (малых) размеров. В макете использованы микрообъективы с увеличением $40\times$. В качестве приемника излучения используется черно-белая цифровая видеокамера VAC-135.

Разработанное программное обеспечение позволяет осуществлять управление микропозиционером (в том числе регулирование шага перемещения), накопление сигнала на матрице видеокамеры (в том числе съемка набора одинаковых изображений с последующим усреднением) и вывод на экран монитора текущей интерференционной картины в режиме реального времени. Результатом сканирования одного участка поверхности объекта является набор интерференционных картин, полученных через фиксированный интервал изменения оптической разности хода.

На рис. 2, а, иллюстрируется последовательность регистрируемых видеокадров, а на рис. 2, б, – пример интерферометрического сигнала, представляющего собой эволюцию значений сигнала в отдельном пикселе в латеральной плоскости по глубине среды (по номеру видеокадра). Обработка данных в системе корреляционной ОКТ сводится к задаче динамического оценивания параметров сигналов по последовательности видеокадров для каждого пикселя.

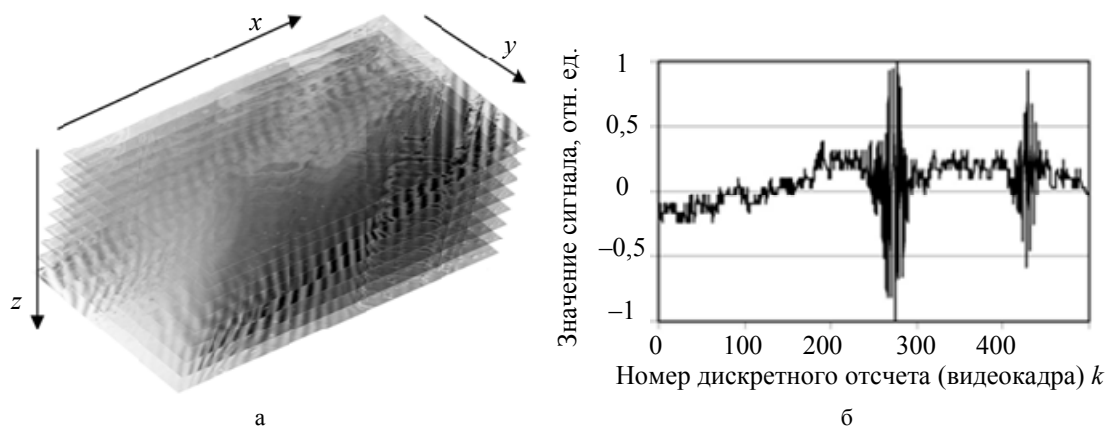


Рис. 2. Последовательность получаемых в процессе измерения видеокадров (а) и пример эволюции интенсивности одного пикселя (б)

Алгоритм обработки данных с помощью последовательного метода Монте-Карло

Параметры интерферометрических сигналов, как известно, определяются множеством факторов, в том числе геометрическими и оптическими свойствами измеряемого объекта, источником излучения и конфигурацией оптической системы [1, 16]. Модель интерферометрического сигнала, подобного представленному на рис. 2, б, может быть задана в дискретной форме:

$$s(k) = B(k) + A(k) \cos(\Phi(k)),$$

где B – фоновая составляющая интенсивности; амплитуда A характеризует значения видности интерферометрического сигнала и представляет собой огибающую сигнала; Φ – значения полной фазы интерференционных полос малой когерентности; $k = 0, 1, \dots, K-1$ – номер дискретного отсчета, т.е. номер регистрируемого видеокадра.

Параметры сигнала можно представить в виде вектора $\theta = (B, A, \Phi)^T$ и рассматривать эволюцию параметров по последовательности видеокадров. Как упоминалось выше, в корреляционной ОКТ информацию о положении отражающих слоев в среде и степени отражения несет огибающая сигнала A .

Алгоритм обработки данных на основе последовательного метода Монте-Карло [13, 14] применительно к оцениванию огибающей детально рассмотрен в [17]. Приведем краткое описание алгоритма, который на каждом шаге фильтрации включает четыре этапа.

Этап 1. Генерация набора из N векторов параметров с известным законом распределения и заданными статистическими моментами (математическим ожиданием и дисперсией).

Этап 2. Формирование набора из N прогнозируемых значений сигнала (из сгенерированного на первом этапе набора векторов) в соответствии с известной моделью функции наблюдения.

Этап 3. Выбор M векторов ($M < N$) так, чтобы невязка наблюдения и сформированного предсказания была наименьшей.

Этап 4. Вычисление математического ожидания для каждого из параметров по выбранным M векторам и его сдвиг в соответствии с априорной информацией об эволюции параметров (математическое ожидание используется для генерации нового набора из N векторов на следующем шаге фильтрации).

На рис. 3 приведен пример сигнала, представленного на рис. 2, б: результат вычитания фоновой составляющей из исходного сигнала и оценка огибающей.

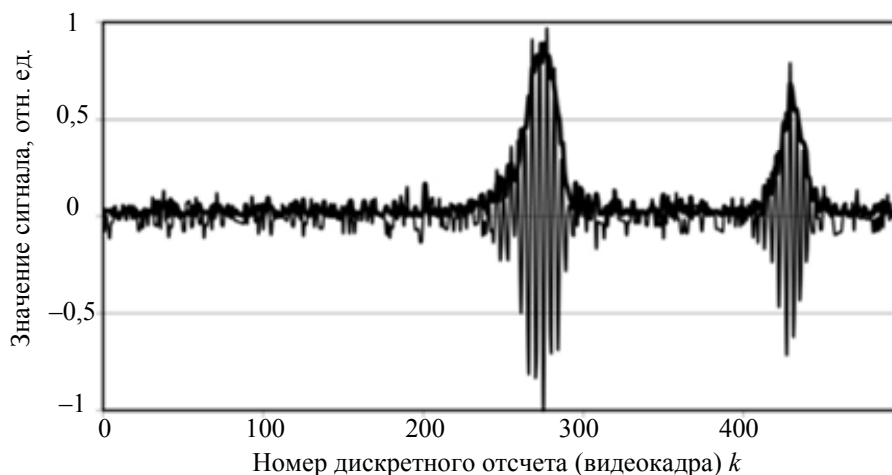


Рис. 3. Исходный сигнал без фоновой составляющей и оценка его огибающей

В простейшем случае обработка трехмерных данных сводится к независимой обработке каждого сигнала для соответствующего пикселя в латеральной плоскости объекта. Совокупность огибающих сигналов вдоль боковой координаты x объекта представляет собой двумерное томографическое изображение объекта в вертикальном сечении (В-скан).

Экспериментальное исследование биологического объекта

В качестве объекта исследования выбрано переднее крыло комара-пискуна *Culex pipiens*. Объект имеет малые размеры, малую толщину и сложную микроструктуру и поэтому является удобным тестовым объектом.

На рис. 4 представлена двумерная томограмма (В-скан) крыла. На рисунке видны две отражающие границы (верхняя и нижняя поверхности крыла), а также тонкая структура верхней поверхности, включая отдельные волоски (указаны стрелками). Визуализация трехмерной микроструктуры крыла (рис. 5) показывает, что верхняя часть крыла равномерно покрыта волосками. Также видно, что прожилка (по диагонали), в отличие от прилегающих к ней областей, отражает почти все падающее излучение, ввиду чего под ней не визуализируется участок нижней поверхности крыла, куда свет не проникает.

Детальный анализ структуры поверхностей крыла показывает, что они покрыты анизотропно направленными чешуйками (рис. 5, б). Наблюдаемая анизотропия структуры крыла позволяет рекомендовать для детального исследования данной микроструктуры методы поляризационной микроскопии и поляризационно-чувствительной ОКТ. Наблюдаемые особенности структуры соответствуют результатам, получаемым методами классической микроскопии [18], и представляют большой интерес для энтомологов и биоинженеров.

Полученные результаты показывают высокую разрешающую способность метода, обеспечивающего наблюдение деталей микроструктуры биологических объектов весьма малого геометрического масштаба.

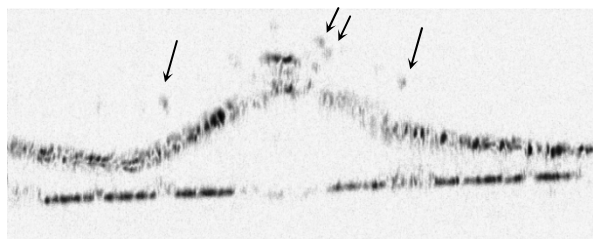


Рис. 4. В-скан переднего крыла комара-пискуна *Culex pipiens*. Высота 35 мкм, ширина 200 мкм

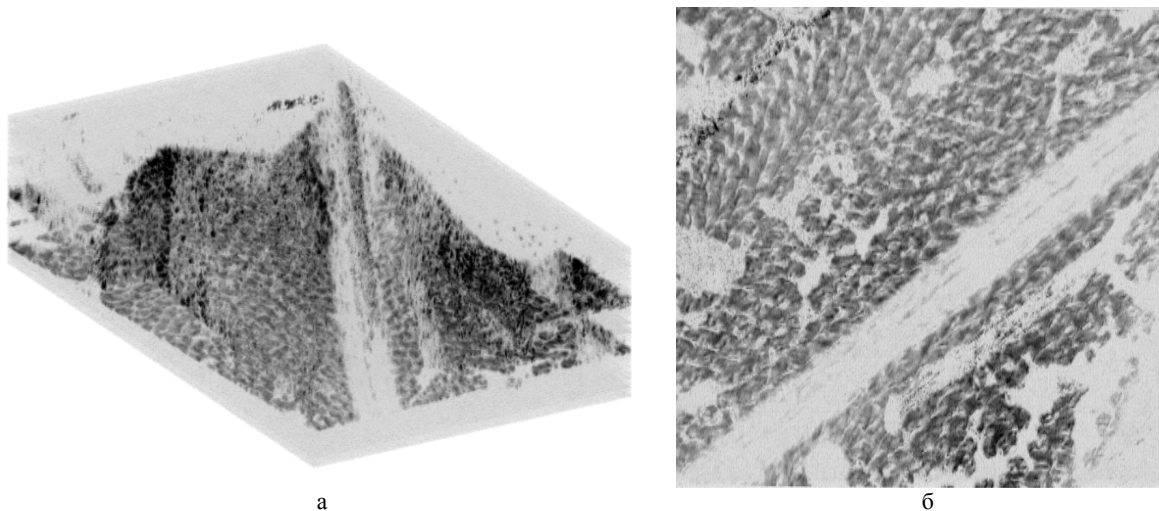


Рис. 5. Трехмерная томограмма крыла комара-пискуна (а) и С-скан нижней поверхности крыла (б). Высота 35 мкм, ширина 200 мкм, длина 160 мкм

Заключение

В работе показана возможность применения последовательного метода Монте-Карло для обработки данных в корреляционной широкопольной оптической когерентной томографии для исследования биологических объектов на примере тестового образца крыла комара. Полученные результаты содержат меньшее количество артефактов по сравнению с результатами, полученными авторским коллективом ранее при исследовании аналогичного биологического образца с обработкой данных методом расширенной фильтрации Калмана [9, 12].

Использование последовательного метода Монте-Карло позволило наблюдать микроструктуру объекта с разрешением примерно 1 мкм. Наблюдаемая анизотропия структуры крыла позволяет рекомендовать для детального исследования микроструктуры подобных объектов методы поляризационной микроскопии и поляризационно-чувствительной оптической когерентной томографии. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с результатами наблюдений методами классической микроскопии и представляют интерес для специалистов в области энтомологии и биоинженерии.

Литература

1. Гуров И.П. Оптическая когерентная томография: принципы, проблемы и перспективы. В кн.: Проблемы когерентной и нелинейной оптики / Под ред. И.П. Гурова, С.А. Козлова. СПб: СПбГУ ИТМО, 2004. С. 6–30.
2. Tomlins P.H., Wang R.K. Theory, developments and applications of optical coherence tomography // Journal of Physics D: Applied Physics. 2005. V. 38. N 15. P. 2519–2535.
3. Optical Coherence Tomography. Technology and Applications / Eds. W. Drexler, J.G. Fujimoto. Berlin: Springer-Verlag, 2008. 1376 p.
4. Dubois A., Grieve K., Moneron G., Lecaque R., Vabre L., Boccara C. Ultrahigh-resolution full-field optical coherence tomography // Applied Optics. 2004. V. 43. N 10. P. 2874–2883.
5. Oh W.Y., Bouma B.E., Ifimia N., Yun S.H., Yelin R., Tearney G.J. Ultrahigh-resolution full-field optical coherence microscopy using InGaAs camera // Optics Express. 2006. V. 14. N 2. P. 726–735.
6. Gurov I., Volynsky M. Interference fringe analysis based on recurrence computational algorithms // Optics and Lasers in Engineering. 2012. V. 50. N 4. P. 514–521.
7. Волынский М.А., Гуров И.П., Захаров А.С. Динамический анализ сигналов в оптической когерентной томографии методом нелинейной фильтрации Калмана // Оптический журнал. 2008. Т. 75. № 10. С. 89–94.

8. Gurov I., Sheynihovich D. Interferometric data analysis based on Markov nonlinear filtering methodology // Journal of the Optical Society of America A. 2000. V. 17. N 1. P. 21–27.
9. Вольнский М.А., Гуров И.П., Жукова Е.В. Рекуррентные алгоритмы обработки видеoinформации в системах оптической когерентной томографии // Оптический журнал. 2012. Т. 79. № 11. С. 28–35.
10. Ермолаев П.А. Динамическое оценивание параметров интерферометрических сигналов методом расширенной фильтрации Калмана второго порядка // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2014. № 2 (90). С. 17–22.
11. Wan E.A., van der Merwe R. The unscented Kalman filter / In: Kalman Filtering and Neural Networks. NY: John Wiley & Sons, 2001. P. 221–280.
12. Вольнский М.А. Рекуррентные алгоритмы обработки данных в оптической когерентной томографии: дис. ... канд. техн. наук: 05.13.01: защищена 20.12.11. СПб, 2011. 112 с.
13. Simon D. Optimal state estimation: Kalman, ∞ , and Nonlinear Approaches. NY: John Wiley & Sons, Inc., 2006. 526 p.
14. Doucet A., de Freitas N., Gordon N. Sequential Monte Carlo methods in practice. NY: Springer-Verlag, 2001. 583 p.
15. Malacara D. Optical Shop Testing. NY: Wiley, 1978. 862 p.
16. Коломийцов Ю.В. Интерферометры: основы инженерной теории, применение. Л.: Машиностроение, 1976. 296 с.
17. Вольнский М.А., Гуров И.П., Ермолаев П.А., Скаков П.С. Динамическое оценивание параметров интерферометрических сигналов на основе последовательного метода Монте-Карло // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2014. № 3 (91). С. 18–23.
18. Гуцевич А.В., Мончадский А.С., Штакельберг А.А. Насекомые двукрылые. Комары. Л.: Наука, 1970. 384 с.

<i>Скаков Павел Сергеевич</i>	– ассистент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, pavelsx@gmail.com
<i>Вольнский Максим Александрович</i>	– кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, maxim.volynsky@gmail.com
<i>Гуров Игорь Петрович</i>	– доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, gurov@mail.ifmo.ru
<i>Ермолаев Петр Андреевич</i>	– студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Petr-ermolaev@hotmail.com
<i>Pavel S. Skakov</i>	– assistant, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, pavelsx@gmail.com
<i>Maxim A. Volynsky</i>	– PhD, Associate professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, maxim.volynsky@gmail.com
<i>Igor P. Gurov</i>	– D.Sc., Professor, Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, gurov@mail.ifmo.ru
<i>Petr A. Ermolaev</i>	– student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Petr-ermolaev@hotmail.com

*Принято к печати 31.03.14
Accepted 31.03.14*

УДК 681.786

МЕТОД АВТОМАТИЧЕСКОЙ КАЛИБРОВКИ СТЕРЕОСКОПИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

В.В. Коротаяев^а, А.В. Краснящих^а, С.Н. Ярышев^а, Х.В. Нгуен^а

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ngvietvn@gmail.com

Аннотация. Предлагается новый метод автоматической калибровки стереоскопической системы, использующий тестовый объект. Сущность метода состоит в регистрации с помощью двух камер стереоскопического изображения специально подобранного эталонного объекта в виде шахматной доски с дополнительным полем – рамкой вокруг шахматной доски. Алгоритм, реализующий данный метод, включает семь этапов: регистрация набора изображений тест-объекта; пороговая фильтрация изображения; распознавание тест-объекта по размерам и форме; удаление фона; определение положения четырех крайних точек; калибровка первой и второй камер; калибровка системы в целом. При этом процесс калибровки первой и второй камер и системы выполняется с помощью программы, разработанной Jean-Yves Bouquet.

Проведено математическое и физическое моделирование с использованием двух измерительных камер и программного пакета MATLAB. Путем моделирования проведено сравнительное исследование погрешности определения координат тестовых точек в ручном и автоматическом режиме, а также погрешности калибровки в зависимости от количества изображений, полученных стереопарой.

Ключевые слова: автоматическая калибровка, стереоскопическая система, тест-объект, шахматная доска, алгоритм

AUTOMATIC CALIBRATION METHOD FOR STEREOSCOPIC SYSTEM

V.V. Korotaev^а, A.V. Krasnyaschikh^а, S.N. Yaryshev^а, H.V. Nguyen^а

^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, ngvietvn@gmail.com

Abstract. The paper deals with a new method of automatic calibration for stereoscopic system using test object. The idea of the method is to register stereoscopic image of specially selected reference object in the form of a chessboard with an extra field – a frame around chessboard – by means of two cameras. An algorithm implementing this method consists of seven stages: registration of set of images for a test object; image threshold filtering; recognition of test object by size and shape; background removal; position determination of four edge points; calibrating of the first and the second cameras; calibrating of stereoscopic system on the whole. The calibration process for the first and the second cameras and the system is performed by using a program developed by Jean-Yves Bouquet. Mathematical and physical modeling is done by means of two measuring cameras and MATLAB software package. Comparative error study for determination of the coordinates of test points in manual and automatic mode is carried out by modeling, as well as calibration error depending on the number of images obtained by stereo pair.

Keywords: automatic calibration, stereoscopic system, test object, chessboard, algorithm

Введение

В связи с ростом спроса на системы автоматического расположения трехмерных объектов стереокамеры все шире применяются в задачах компьютерного зрения [1–3]. При этом калибровка стереоскопической системы является важным этапом настройки оборудования, от которой зависит погрешность определения положения измеряемых объектов. Калибровка стереокамеры – это задача получения внутренних и внешних параметров камер по имеющимся изображениям объекта. В настоящее время существует много методов калибровки камер в стереоскопической системе, в том числе использование точки схода (vanishing points) [4, 5], нейронные сети [6], перпендикулярные плоскости (Calibration of stereo cameras from two perpendicular planes) [7], метод Faugéras и Toscani [8, 9], метод калибровки с помощью шахматной доски [8, 10, 11], метод калибровки камеры при помощи объектива с переменным фокусным расстоянием Марины Колесник [8]. Все эти методы имеют общий недостаток – в процессе калибровки от пользователя требуется вручную выбирать контрольные точки, линии или плоскости, имеющиеся на изображениях, которые получены с помощью камер стереопары.

В настоящей работе на основе метода, предложенного Jean-Yves Bouquet [8], в котором в качестве тестового объекта используется объект в виде шахматной доски, авторы предлагают метод автоматической калибровки стереоскопической системы, использующий в качестве тестового объекта шахматную доску с дополнительным полем – черной рамкой вокруг шахматной доски. Кроме того, путем проведения физического моделирования оценивается качество распознавания тестового объекта, определяются координаты крайних точек и необходимое количество кадров для калибровки стереоскопической системы в автоматическом режиме.

Теоретическое обоснование

Стереоскопическая система состоит из двух произвольно ориентированных камер. Внутренние параметры каждой камеры представляются в виде матрицы \mathbf{A} , которая содержит параметры оптической системы и фотоприемного устройства камеры [12–15]:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} f/w & 0 & u_0 \\ 0 & f/h & v_0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

где f – фокусное расстояние объектива, w и h – масштабы вдоль осей Ox и Oy соответственно; u_0, v_0 – координаты главной точки относительно начала координат фотоприемника (в системе координат фотоприемника). В качестве внешних параметров стереоскопической системы принимаются матрица поворота \mathbf{R} и вектор переноса \mathbf{t} :

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_\alpha \cdot \mathbf{R}_\beta \cdot \mathbf{R}_\gamma,$$

$$\mathbf{t} = (t_x, t_y, t_z)^T,$$

где $\mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R}_\beta, \mathbf{R}_\gamma$ – матрицы поворота вокруг осей Ox, Oy, Oz на углы α, β, γ ; t_x, t_y, t_z – значения переноса вдоль осей Ox, Oy, Oz ; T – знак транспонирования.

Задача калибровки стереоскопической системы состоит в определении матрицы \mathbf{R} , вектора \mathbf{t} и матрицы \mathbf{A} каждой камеры. Чтобы определить эти параметры, необходимо решить следующее уравнение:

$$\mathbf{L}\mathbf{c} = \mathbf{e}, \tag{1}$$

где матрица \mathbf{L} состоит из координат N точек в пространстве (X_i, Y_i, Z_i) и координат их проекций в плоскости изображения камеры (u_i, v_i) ; \mathbf{e} – неизвестный вектор, обусловленный наличием ошибок измерений; \mathbf{c} – калибровочный вектор.

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} X_1 & Y_1 & Z_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -u'_1 X_1 & -u'_1 Y_1 & -u'_1 Z_1 & -u'_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X_1 & Y_1 & Z_1 & 1 & -v'_1 X_1 & -v'_1 Y_1 & -v'_1 Z_1 & -v'_1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ X_N & Y_N & Z_N & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -u'_N X_N & -u'_N Y_N & -u'_N Z_N & -u'_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X_N & Y_N & Z_N & 1 & -v'_N X_N & -v'_N Y_N & -v'_N Z_N & -v'_N \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{c} = (c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{14}, c_{21}, c_{22}, c_{23}, c_{24}, c_{31}, c_{32}, c_{33}, c_{34})^T.$$

После решения уравнения (1) вектор \mathbf{t} , матрицы \mathbf{R} и \mathbf{A} могут состоять из членов вектора \mathbf{c} [12].

Принцип работы алгоритма автоматической калибровки стереоскопической системы

В 2010 г. Jean-Yves Bouquet предложил программу калибровки стереоскопической системы [8], написанную в пакете MATLAB. При работе с этой программой пользователям необходимо выбирать вручную точки на изображениях. Этот трудоемкий процесс занимает много времени. Для облегчения процесса калибровки стереоскопической системы авторы предлагают новый вид тест-объекта, а также алгоритм обработки полученного изображения и определения координат тестовых точек. Предложенный тест-объект имеет вид шахматной доски с контрастной рамкой (рис. 1) (в данном случае использована черная рамка). Она позволяет легко отделить тест-объект от фона.

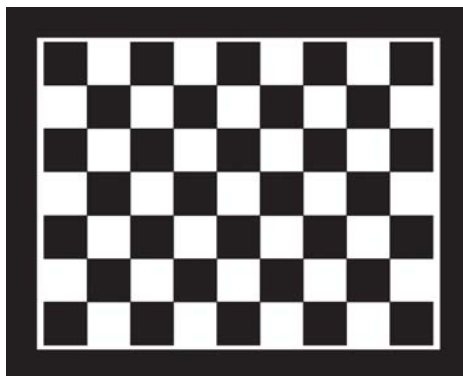


Рис. 1. Изображение тест-объекта

Разработанное программное обеспечение работает по алгоритму, включающему 7 этапов:

1. регистрация набора изображений тест-объекта;
2. пороговая фильтрация изображения;

3. распознавание тест-объекта по размерам и форме;
4. удаление фона;
5. определение положения четырех крайних точек;
6. калибровка первой и второй камер;
7. калибровка системы в целом. При этом процесс калибровки первой и второй камер и системы, выполняется с помощью программы Jean-Yves Bouguet.

Эксперимент

Экспериментальный стенд включает в себя два телевизионных датчика – A4Tech PKS-730G с разрешением 640×480 пикселей, размер одного пикселя $3,6 \times 3,6$ мкм, расстояние между камерами 106,5 мм, фокусное расстояние оптической системы камеры 3,0 мм. Тестовый объект представляет собой поле, состоящее из 9×7 чередующихся черных и белых квадратов, при этом размер квадрата составляет 28×28 мм. Оба датчика регистрируют тест-объект в 50 произвольных положениях. После получения набора изображений проводится определение координат крайних точек с помощью разработанного авторами программного обеспечения, также выполняется калибровка камер и системы в целом с использованием разных наборов изображений.

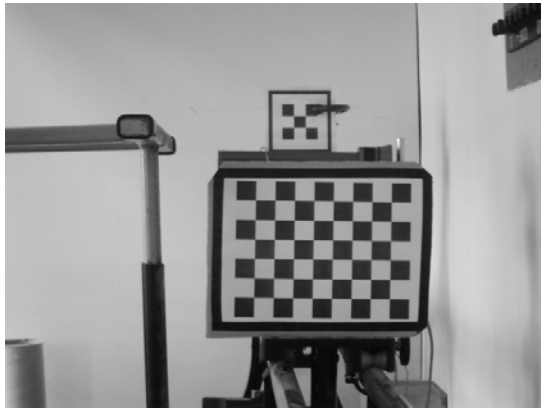
На рис. 2 показан результат работы программного обеспечения на разработанном авторами алгоритме. После ввода с камеры изображения тест-объекта (рис. 2, а) изображение обрабатывается пороговым фильтром, результат работы которого показан на рис. 2, б. На данном этапе результат обработки представляет собой бинарное изображение, на котором фон имеет черный цвет. Контрастная рамка тест-объекта после фильтрации становится фоном, а шахматная доска – объектом, который не соприкасается с другими объектами на изображении. Контрастная рамка выполняет функцию отделения шахматной доски от других объектов на изображении. С помощью встроенного в пакет MATLAB средства toolbox Blob Analysis можно выделить все объекты на изображении. Этим средством изображение шахматной доски выделяется на исходном изображении. Результат данного этапа показан на рис. 2, в. На следующем этапе происходит удаление фона для каждого из выделенных объектов. Результат этапа показан на рис. 2, г. Для каждого изображения объекта из предыдущего этапа используется пороговая фильтрация и средство toolbox Blob Analysis для выделения объекта и определения координат крайних точек (рис. 2, д). По результатам анализа формы полученного объекта и сравнения площади данного объекта с площадью объекта, полученной на предыдущем этапе (рис. 2, в), можно определить, что данной объект является шахматной доской. После получения набора координат крайних точек можно выполнить калибровку каждой отдельной камеры, результат которой показан на рис. 2, ж. После калибровки каждой отдельной камеры можно выполнить калибровку стереоскопической системы, результат которой показан на рис. 2, з. Калибровка выполняется с помощью средства Camera Calibration Toolbox, предложенного Jean-Yves Bouguet [8].

Было проведено исследование факторов, влияющих на погрешности определения координат крайних точек и погрешности калибровки системы, в зависимости от количества изображений. Для проверки погрешности определения координат крайних точек были сформированы 50 изображений тест-объекта в разных позициях и определены координаты в ручном и автоматическом режиме. Погрешность автоматического определения координат крайних точек по оси Ox и по оси Oy составляет 1,2 пикселя. Этот результат получен путем обработки серии из 50 изображений, полученных с каждой из камер, составляющих стереопару. Рис. 3 иллюстрирует результаты работы программного обеспечения в зависимости от количества изображений, полученных стереопарой.

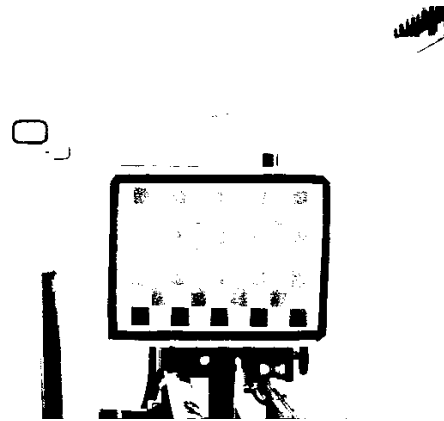
Для оценки погрешности калибровки было использовано 50 изображений тест-объекта в разных произвольных положениях объекта. При этом использовались фиксированные значения расстояния между камерами t_x (рис. 3, а) и параметров камеры f и w (рис. 3, в) (на графиках отмечены как истинные значения), с которыми сравнивается результат калибровки. Из этих графиков видно, что погрешность убывает с увеличением количества изображений тест-объекта, участвующих в калибровке системы [16]. Можно сделать вывод, что результат калибровки стабилизируется, если снимков больше двадцати. Таким образом, в практических применениях предложенного алгоритма для получения приемлемых результатов достаточно ограничиться набором из 20 изображений тест объекта.

Заключение

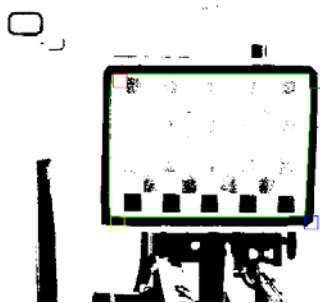
В работе авторы предложили метод автоматической калибровки стереоскопической системы с помощью модифицированного авторами тест-объекта. По результатам эксперимента, погрешность определения координат крайних точек на тест-объекте в автоматическом режиме составляет не более 1,2 пикселя. Экспериментальный результат показывает, что для получения стабильных параметров каждой камеры и стереоскопической системы в целом, достаточно использовать 20 изображений тест-объекта в различных позициях.



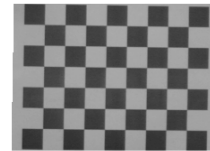
а



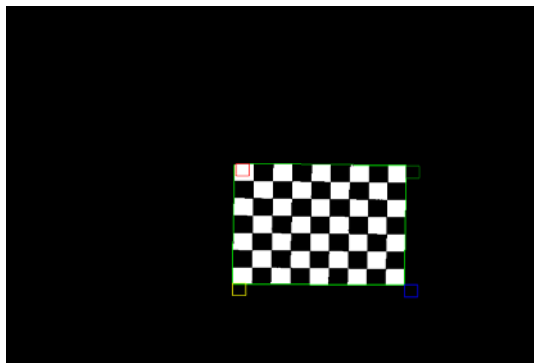
б



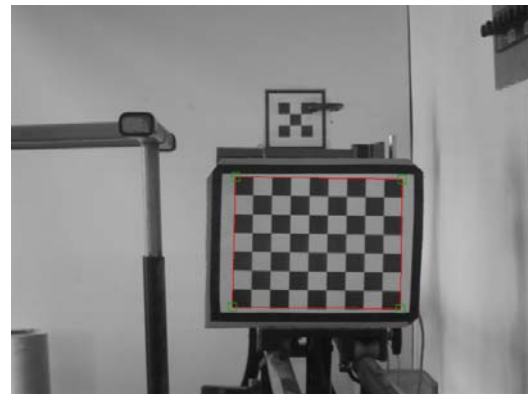
в



г

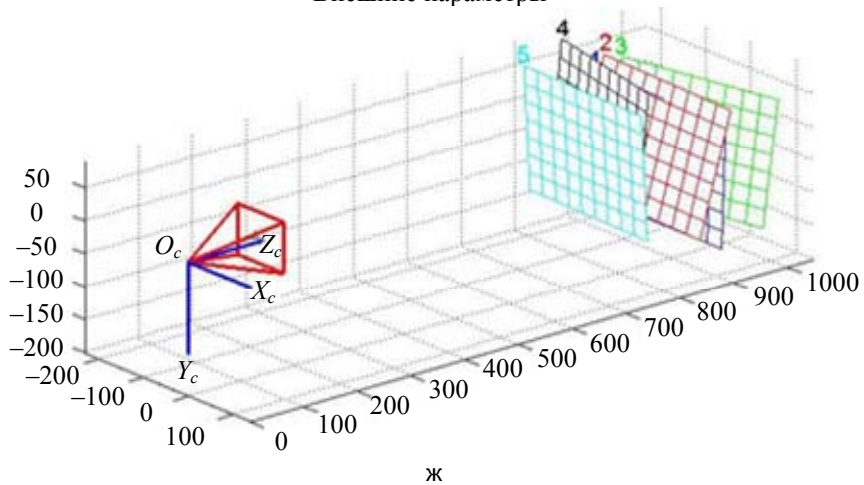


д



е

Внешние параметры



ж

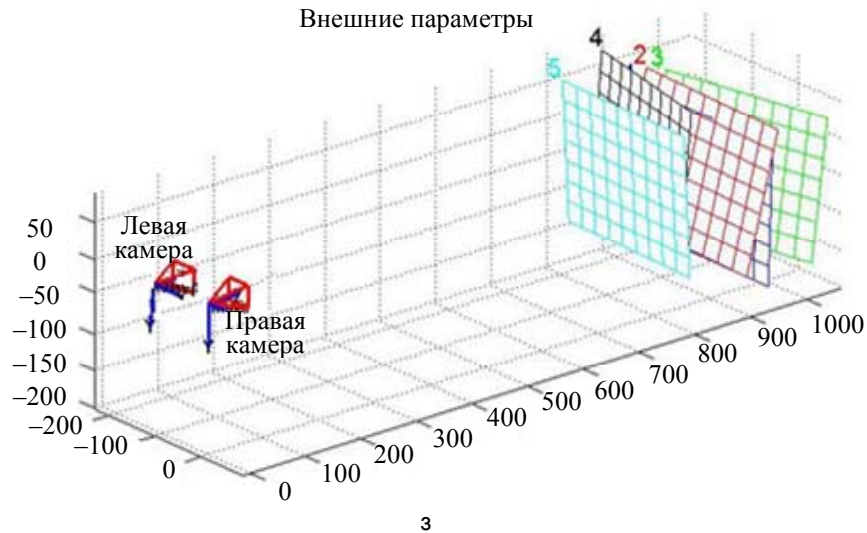


Рис. 2. Визуализация результата калибровки: пример изображения тестового объекта, полученный камерой (а); результат применения пороговой фильтрации (б); результат определения тестового объекта по внешней рамке (в); результат удаления внешнего фона (г); определение координат крайних точек (д); определение положения шахматного поля (е); результат калибровки одной камеры (ж); результат калибровки стереоскопической системы (з)

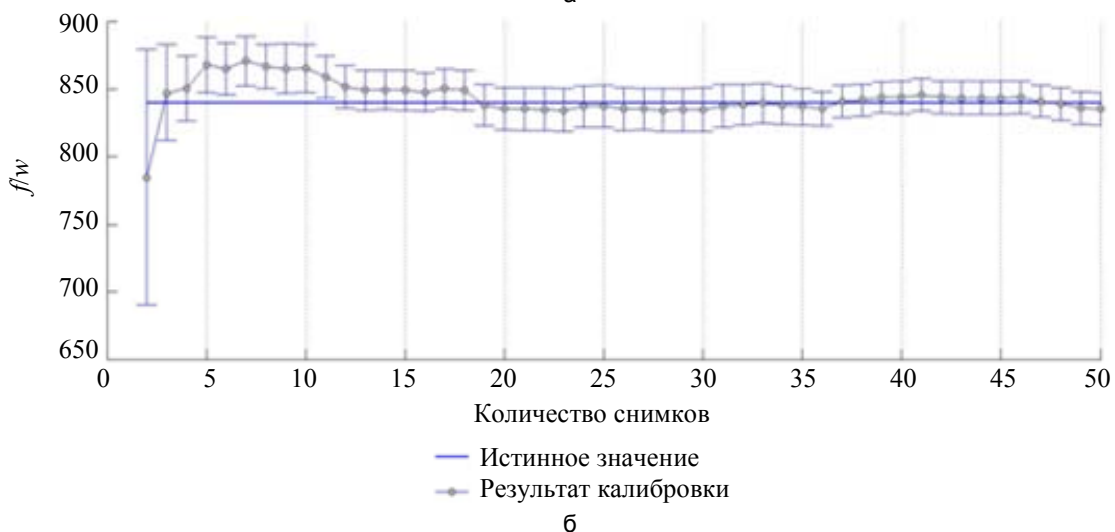
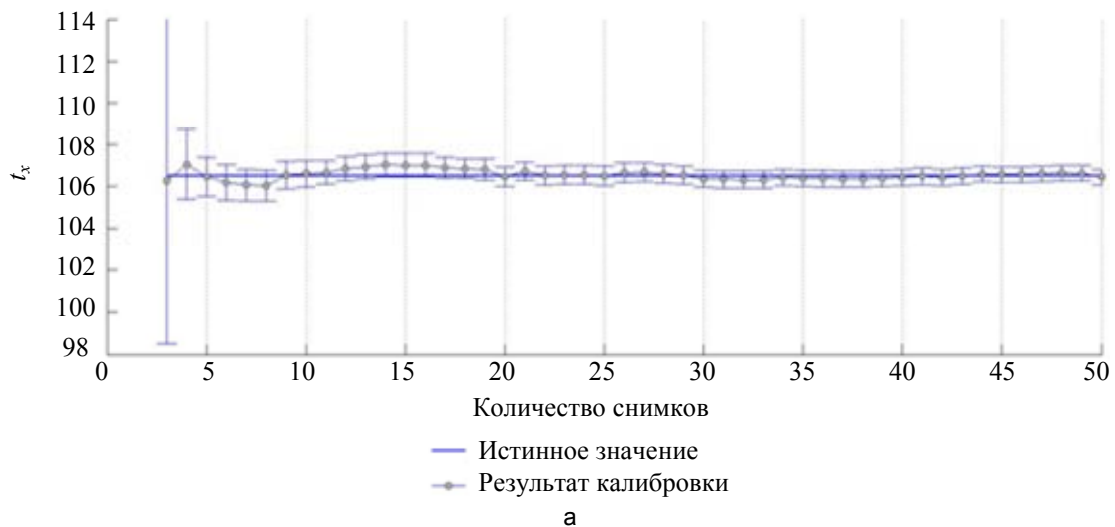


Рис. 3. Результаты калибровки камеры в зависимости от количества полученных изображений тест-объекта от 2 до 50; расстояния между камерами t_x (а); параметров камеры f/w (б); f – фокусное расстояние объективов камер, мм, w – размер пикселя матричного фотоприемника, мкм, t_x – расстояние между двумя камерами, мм

Литература

1. Волкович А.Н., Жук Д.В., Тузиков А.В. Восстановление трехмерных моделей объектов по стерео-изображениям с учетом распараллеливания // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2008. № 13 (58). С. 3–10.
2. Malik A.S., Choi T.-S., Nisar H. Depth Map and 3D Imaging Applications: Algorithms and Technologies. IGI Global, 2012. 648 p.
3. Szeliski R. Computer Vision: Algorithms and Applications. Springer, 2011. 812 p.
4. Capril B., Torre V. Using vanishing points for camera calibration // International Journal of Computer Vision. 1990. V. 4. N 2. P. 127–139.
5. Cipolla R., Drummond T., Robertson D.P. Camera calibration from vanishing points in images of architectural scenes // Proc. of British Machine Vision Conference. Nottingham, UK. 1999. V. 2. P. 382–391.
6. Chen B., Wang W., Qin Q. Stereo vision calibration based on GMDH neural network // Applied Optics. 2012. V. 51. N 7. P. 841–845.
7. Hu Z., Tan Z. Calibration of stereo cameras from two perpendicular planes // Applied Optics. 2005. V. 44. N 24. P. 5086–5090.
8. Козырева А.В. О некоторых способах калибровки видеокамеры [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://db.iis.nsk.su/preprints/articles/pdf/sbor_kas_13_kozyreva_2.pdf, свободный. Яз. рус. (дата обращения 13.05.2014).
9. Ali-Bey M., Moughamir S., Manamanni N. Calibration method for multiview camera with coplanar and de-centered image sensors // Journal of Electronic Imaging. 2013. V. 22. N 2. Art. N023021.
10. Zhang Z. Flexible new technique for camera calibration // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2000. V. 22. N 11. P. 1330–1334.
11. Bouguet J.-Y. Camera Calibration Toolbox for Matlab [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.vision.caltech.edu/bouguetj/calib_doc/, свободный. Яз. англ. (дата обращения 13.05.2014).
12. Грузман И.С., Киричук В.С., Косых В.П., Перетягин Г.И., Спектор А.А. Цифровая обработка изображений в информационных системах. Новосибирск: НГТУ, 2002. 352 с.
13. Hartley R., Zisserman A. Multiple View Geometry in Computer Vision. Cambridge University Press, 2004. 670 p.
14. Forsyth D.A., Ponce J. Computer Vision: a Modern Approach. 2nd ed. Prentice Hall, 2011. 792 p.
15. Shapiro L.G., Stockman G.C. Computer Vision. Prentice Hall, 2001. 608 p.
16. Крылов Д.В. Исследование метода фотограмметрической калибровки цифровых камер с использованием пространственного тест-объекта // Известия ВУЗов. Геодезия и аэрофотосъемка. 2011. № 1. С. 57–62.

Коротаев Валерий Викторович	–	доктор технических наук, профессор, декан факультета, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, korotaev@grv.ifmo.ru
Краснящих Андрей Владимирович	–	кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, crus@mail.ru
Ярышев Сергей Николаевич	–	кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ysn63@mail.ru
Нгуен Хоанг Вьет	–	аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ngvietvn@gmail.com
Valery V. Korotaev	–	D.Sc., Professor, Dean, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, korotaev@grv.ifmo.ru
Andrey V. Krasnyaschikh	–	PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, crus@mail.ru
Sergey N. Yaryshev	–	PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, ysn63@mail.ru
Hoang Viet Nguyen	–	postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, ngvietvn@gmail.com

Принято к печати 08.05.14
Accepted 08.05.14

УДК 520.62

МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА СНИМКОВ КОСМИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

А.И. Алтухов^а, Д.С. Коршунов^а, Е.И. Шабakov^а

^а Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия, Korshunov.Denis@rambler.ru

Аннотация. Представлен подход к повышению качества снимков космических объектов, получаемых бортовой аппаратурой наблюдения космических средств орбитальной инспекции в видимом диапазоне спектра электромагнитных волн. Подход базируется на совместном учете скорости движения космического аппарата наблюдения и наблюдаемого космического объекта в околоземном космическом пространстве при выборе времени экспонирования фотоприемного устройства, который осуществляется с использованием светосигнальной характеристики, определяющей оптимальную величину зарядового пакета, формируемого в приборе с зарядовой связью при его облучении. Это позволяет выбрать параметры работы бортовой аппаратуры наблюдения, обеспечивающие получение космических снимков, пригодных для интерпретации. В качестве показателя качества космических снимков используется линейное разрешение, дающее полное представление о геометрических свойствах объекта на снимке. Моделирование сценариев наблюдения космического объекта спутником-инспектором показало возможность повышения линейного разрешения космических снимков на 10–20% при движении космического аппарата по орбитам с углом некомпланарности менее 6° и на 40–50% при движении по орбитам с углом некомпланарности 45°. Предложенный подход к повышению качества снимков обеспечивает получение резких и контрастных изображений космических объектов опико-электронными средствами дистанционного зондирования космического базирования. Использование таких снимков позволяет своевременно обнаружить неисправности космической техники, полученные в результате ее эксплуатации в околоземном космическом пространстве. Также предложенный подход может найти применение на стадии проектирования космических систем опико-электронного наблюдения в моделях, используемых для оценивания возможностей информационного тракта съемочной аппаратуры.

Ключевые слова: орбитальная инспекция, качество космического снимка, экспозиция, смещение изображения, светосигнальная характеристика.

METHOD OF IMAGE QUALITY ENHANCEMENT FOR SPACE OBJECTS

A.I. Altukhov^a, D.S. Korshunov^a, E.I. Shabakov^a

^а Mozhaisky Military Space Academy, Saint Petersburg, Russia, Korshunov.Denis@rambler.ru

Abstract. The paper deals with an approach for image quality improvement of the space objects in the visible range of electromagnetic wave spectrum. The proposed method is based on the joint taking into account of both the motion velocity of the space supervisory apparatus and a space object observed in the near-earth space when the time of photo-detector exposure is chosen. The timing of exposure is carried out by light-signal characteristics, which determines the optimal value of the charge package formed in the charge-coupled device being irradiated. Thus, the parameters of onboard observation equipment can be selected, which provides space images suitable for interpretation. The linear resolving capacity is used as quality indicator for space images, giving a complete picture for the image contrast and geometric properties of the object on the photo. Observation scenario modeling of the space object, done by sputnik-inspector, has shown the possibility of increasing the linear resolution up to 10% - 20% or up to 40% - 50% depending on the non-complanarity angle at the movement along orbits. The proposed approach to the increase of photographs quality provides getting sharp and high-contrast images of space objects by the optical-electronic equipment of the space-based remote sensing. The usage of these images makes it possible to detect in time the space technology failures, which are the result of its exploitation in the near-earth space. The proposed method can be also applied at the stage of space systems design for optical-electronic surveillance in computer models used for facilities assessment of the shooting equipment information tract.

Keywords: orbital inspection, space photograph quality, exposure, image shift, light-signal feature.

Введение

Рост количества неуправляемых объектов искусственного происхождения в околоземном космическом пространстве (ОКП) и увеличение случаев повреждения космических систем в результате столкновений с ними является свидетельством того, что техногенные орбитальные частицы и фрагменты на сегодняшний день представляют собой реальную угрозу для орбитальных группировок. В этих условиях особо актуальной становится задача инспектирования космических аппаратов (КА) с целью своевременного обнаружения технических неисправностей вследствие физического воздействия техногенного характера для принятия мер по их устранению [1, 2]. Возможным решением данной задачи является получение детальных изображений КА в видимом диапазоне спектра средствами наблюдения орбитального базирования. Технологии получения снимков высокого разрешения с помощью космических средств наблюдения в настоящее время активно развиваются в России, США, Франции и в других странах [3–9].

Одной из проблем, возникающей при освоении технологий орбитальной инспекции, являются искажения, получаемые в результате смещения оптического изображения в плоскости приемника электромагнитного излучения (ЭМИ) за время полной выдержки при поступательном и угловом перемещении бортовой аппаратуры наблюдения или наблюдаемого космического объекта (КО), что приводит к получению «смазанных» космических снимков и снижению качества интерпретации [10, 11]. В современных

условиях уменьшить величину «смаза» можно путем выбора параметров орбит КА при планировании сеансов наблюдения, обеспечивающих минимальный угол некомпланарности между плоскостями орбит и требуемую дистанцию съемки. Другим способом уменьшения «смаза» изображения является сокращение времени выдержки в процессе космической съемки [11, 12]. Выбор параметров орбит спутников позволяет произвести космическую съемку в моменты времени, когда относительная скорость перемещения наблюдаемого КО и наблюдающего КА мала и практически не влияет на качество изображения. Однако выбрать такие моменты времени в реальных условиях полета КА сложно. Периодичность наблюдений при этом падает. Сокращение времени выдержки позволяет снизить величину «смаза», уменьшая экспозицию, но одновременно с этим ведет к уменьшению отношения сигнал/шум, что также ухудшает качество изображения.

В работе предложен подход к повышению качества снимков космических объектов путем выбора времени экспонирования приемника ЭМИ с учетом скорости относительного перемещения наблюдающего КА и наблюдаемого КО в ОКП. Выбор времени экспонирования позволяет уменьшить смещение оптического изображения при прогнозировании линейного разрешения изображения и выбрать параметры съемки, обеспечивающие получение космического снимка, пригодного для интерпретации.

Выбор экспозиции фотоприемного устройства при наблюдении космических объектов

Современные космические оптико-электронные системы дистанционного зондирования позволяют получать снимки КО в «динамическом» и «упреждающем» режимах съемки. В «динамическом» режиме съемки оптическая ось аппаратуры совпадает с наклонной дальностью на всем интервале наблюдения. В «упреждающем» режиме бортовая аппаратура ориентируется в пространстве таким образом, чтобы в момент съемки наблюдаемый КО попал в кадр. При высоких взаимных скоростях КА в обоих случаях наблюдается смещение изображения КО, величина которого определяется по формуле [10, 11]:

$$H_C = V_{\text{и}} T_{\text{Э}}, \tag{1}$$

где H_C – смещение изображения; $V_{\text{и}}$ – скорость движения изображения в плоскости приемника электромагнитного излучения (ЭМИ) или скорость движения оптического изображения; $T_{\text{Э}}$ – время полной выдержки. В выражении (1) скорость движения оптического изображения известна и зависит от угловой скорости относительного перемещения наблюдающего КА и наблюдаемого КО, а также от скорости разворота бортовой аппаратуры наблюдения при сопровождении КО. В соответствии с приведенной формулой, смещение изображения, полученное в результате его перемещения в плоскости приемника ЭМИ, может быть уменьшено путем сокращения времени полной выдержки. Данное предположение подтверждается графическими характеристиками (рис. 1), полученными при определении величины смещения изображения для времени полной выдержки 0,004–0,0001 с.

С другой стороны [10, 11], из выражения

$$H_{\text{Э}} = E T_{\text{Э}}$$

следует, что сокращение времени полной выдержки $T_{\text{Э}}$ для заданной освещенности приемника электромагнитного излучения E уменьшает экспозицию $H_{\text{Э}}$, что приводит к получению снимков с малой яркостью и низким контрастом и, как результат, снижает качество интерпретации. Для разрешения данного противоречия время полной выдержки предлагается выбрать таким образом, чтобы, с одной стороны достигалась достаточная экспозиция для получения снимка КО с необходимым для успешной интерпретации контрастом, а другой – смещение изображения не оказывало существенного влияния на качество космического снимка.

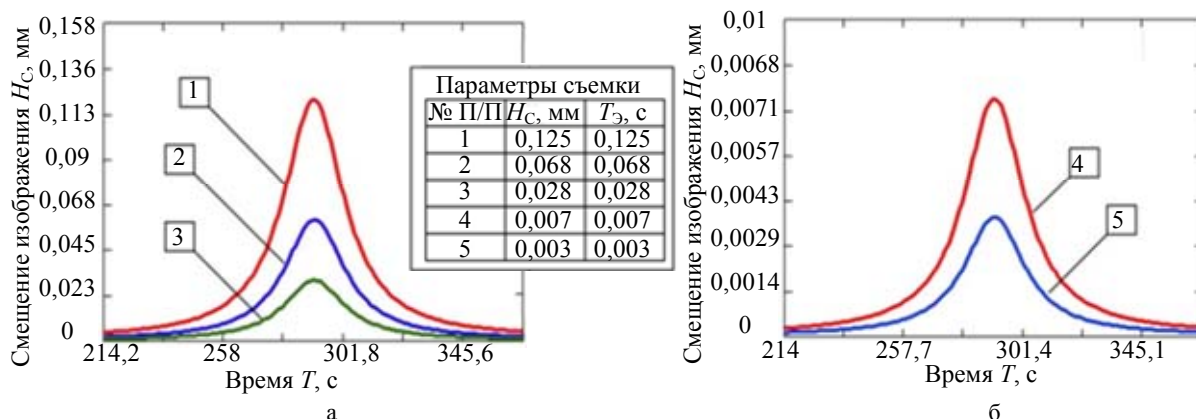


Рис. 1. Зависимость смещения изображения от времени экспонирования: $T_{\text{Э}} = 0,004$ (1), $T_{\text{Э}} = 0,002$ (2), $T_{\text{Э}} = 0,001$ (3) (а); $T_{\text{Э}} = 0,0002$ (4), $T_{\text{Э}} = 0,0001$ (5) (б)

Оценить качество снимка с учетом контрастных свойств и величины смещения изображения предлагается с помощью показателя качества изображений – линейного разрешения оптико-электронной системы $L_{ЛР}$ [13–16]. Под линейным разрешением (ЛР) понимается максимальная частота штрихов поля на изображении полосовой миры, воспринимаемых отдельно. Численное значение ЛР возможно определить с помощью частотно-контрастной характеристики (ЧКХ) передаточных звеньев бортовой аппаратуры наблюдения и порога контрастной чувствительности приемника ЭМИ [17–19].

Величина смещения изображения учитывается в выражении [2, 20]

$$T_C = \left[\frac{\sin \pi H_C \eta_o v}{\pi H_C \eta_o v} \cdot \frac{\sin \pi H_C (1 - \eta_o) v}{\pi H_C (1 - \eta_o) v} \right],$$

где T_C – ЧКХ смещения изображения; η_o – оптический коэффициент полезного действия фотозатвора; v – пространственная частота штрихов в поле полосовой миры. Результирующая ЧКХ оптико-электронной системы имеет вид кривых, представленных на рис. 2, которые показывают изменение отношения между контрастом тест-объекта на снимке и контрастом реального тест-объекта с учетом изменения частоты штрихов в поле полосовой миры.

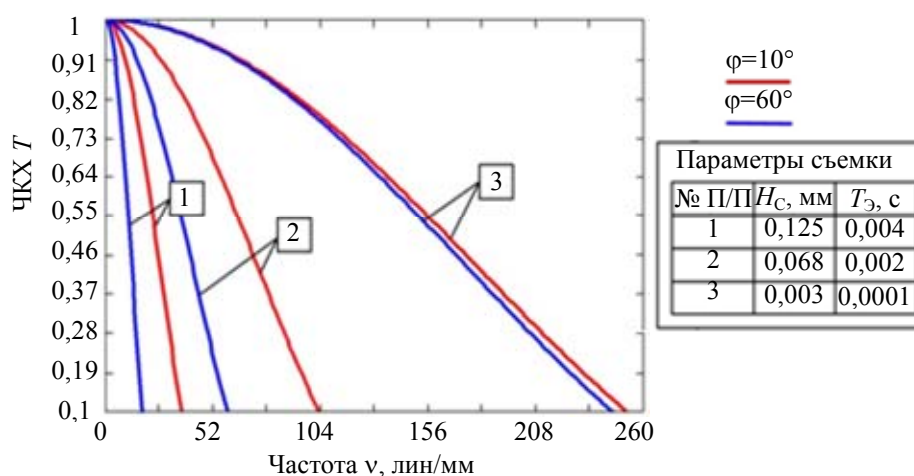


Рис. 2. ЧКХ оптико-электронной системы

Из рис. 2 видно, что уменьшение смещения изображения с 0,125 до 0,003 мм в результате сокращения времени полной выдержки с 0,004 до 0,0001 позволяет увеличить число воспринимаемых отдельно линий тест-объекта с 22–25 до 240–250. Построение графических зависимостей выполнено для значений фазового угла $\phi = 10^\circ$ и $\phi = 60^\circ$, так как условия освещенности сильно влияют на контраст получаемого изображения [11, 17, 21]. Для определения контраста, передаваемого оптико-электронной системой, требуется выражение

$$T = K / K_{Об}$$

привести к виду

$$K = T \cdot K_{Об},$$

где T – ЧКХ оптико-электронной системы; K – контраст КО на снимке; $K_{Об}$ – контраст реального КО, который может быть получен с использованием коэффициентов отражения материалов, применяемых в конструкции [20].

Другим важным параметром при определении ЛР является пороговый контраст $K_{ПОР}$, регистрируемый приемником ЭМИ, который вычисляется по следующей формуле [13, 20]:

$$K_{ПОР}^2 = \frac{2 \cdot \Psi_{ПОР}^2}{E_0 \cdot (k_0 + k_\phi) \cdot (D/f)^2 \cdot \tau \cdot N_\phi \cdot \eta \cdot \Delta \cdot T_z}, \quad (2)$$

где $\Psi_{ПОР}$ – пороговое отношение сигнал/шум, при котором возможна интерпретация изображения; E_0 – освещенность поверхности КО; D – диаметр входного отверстия объектива; k_ϕ – коэффициент отражения фона (фонового элемента КО); k_0 – коэффициент отражения элемента КО; η – квантовый выход приемника ЭМИ; N_ϕ – потенциально доступное число фотонов; Δ – площадь элемента фотоприемного устройства (ФПУ); τ – коэффициент пропускания света объективом; f – фокусное расстояние. Таким образом, порог контрастной чувствительности зависит от условий освещенности КО, отражательных характеристик материалов, параметров объектива аппаратуры наблюдения, накопительных свойств приемника ЭМИ.

В реальных условиях орбитальной съемки управление численными значениями большинства параметров формулы (2) невозможно. Регулируемым параметром, влияющим на ЛР, является время полной выдержки, выбрать которое можно с помощью светосигнальной характеристики (рис. 3).

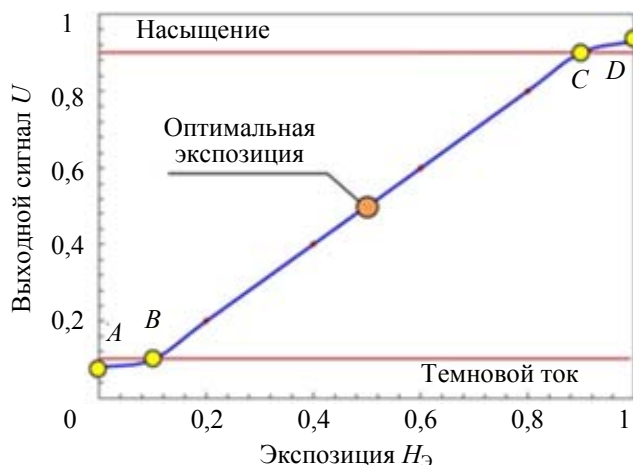


Рис. 3. Светосигнальная характеристика

Светосигнальная характеристика показывает зависимость выходного сигнала от экспозиции и описывается тремя характерными участками: AB – генерация электронов выполняется под действием темнового тока; BC – формирование полезного сигнала в результате фотоэффекта; CD – зарядовый пакет растекается в результате избыточной освещенности.

Время полной выдержки должно обеспечить получение числа электронов в результате фотоэффекта, превышающее число электронов, полученных под действием темнового тока, но не недостаточное для заполнения всей потенциальной ямы элементарной ячейки приемника ЭМИ. Для обеспечения регулирования величины зарядового пакета участку светосигнальной характеристики BC предлагается сопоставить динамический диапазон яркости изображения, связывающий экспозицию приемника ЭМИ с его контрастной чувствительностью. Таким образом, точка B соответствует минимальному значению яркости, а точка C – максимальному. Контрастная чувствительность приемника ЭМИ выражается числом дискретных значений яркости K_{Π} на участке BC . Заряд, необходимый для получения требуемого числа дискретных значений яркости K_3 , находится по формуле

$$N_E = \frac{N_{\max} - N_{\min}}{K_{\Pi}} \cdot K_3,$$

где N_{\max} – максимальное число электронов в одном элементе приемника ЭМИ; N_{\min} – минимальное число электронов в одном элементе приемника ЭМИ; N_E – число электронов, соответствующих яркости K_3 .

Влияние времени полной выдержки на качество космических снимков

Возможность повышения качества снимков КО с помощью предложенного в настоящей работе подхода доказывают результаты расчетов, которые показывают, что выбор времени полной выдержки с учетом контрастной чувствительности приемника ЭМИ и контраста, необходимого для качественной интерпретации, позволяет уменьшить смещение изображения и повысить качество космических снимков (рис. 4).

На рис. 4 графические зависимости наглядно демонстрируют повышение ЧКХ (кривые 1) при уменьшении яркости изображения. Расчеты выполнены для значений фазового угла 10° (рис. 4, а) и 60° (рис. 4, б) [10], что соответствует различным условиям освещенности при наблюдении КО. Полученные результаты подтверждают предположение о том, что сокращение времени полной выдержки повышает передаточные характеристики звеньев бортовой аппаратуры наблюдения в результате уменьшения смещения изображения в фокальной плоскости объектива. Вместе с этим повышается порог контрастной чувствительности приемника ЭМИ (кривые 2) вследствие уменьшения экспозиции. Анализ ЛР оптико-электронной системы, которое определяется значением пространственной частоты в точке пересечения ЧКХ и порога контрастной чувствительности приемника ЭМИ, позволил выбрать время полной выдержки, обеспечивающее наилучшее качество снимка КО с учетом его контрастных свойств и смещения изображения в разных условиях освещения.

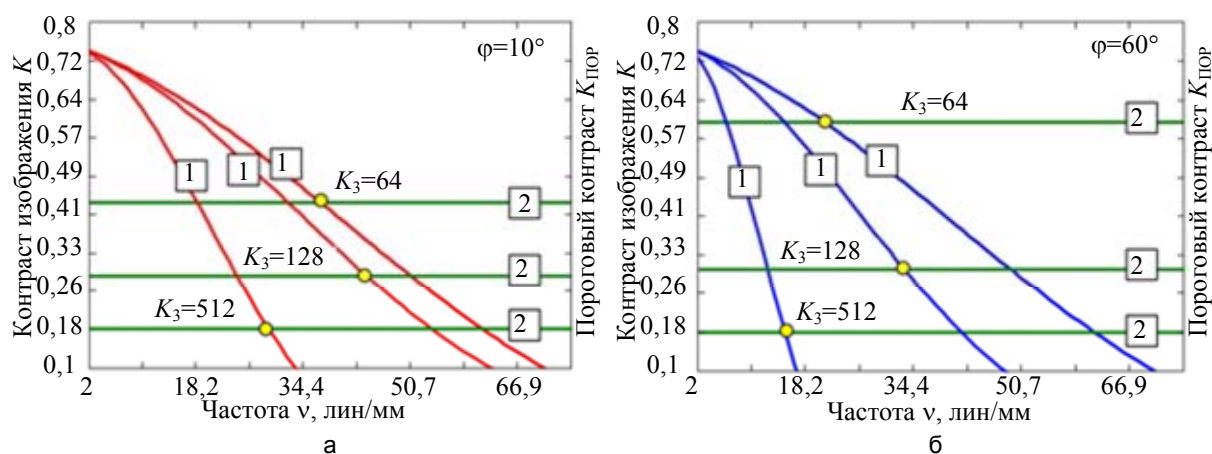


Рис. 4. Разрешающая способность оптико-электронной системы, определяемая точкой пересечения ЧКХ системы (кривая 1) и порогом контрастной чувствительности ФПУ (кривая 2), для значений фазового угла: 10° (а); 60° (б)

Оценить качество космического снимка, полученного в реальных условиях наблюдения, можно с помощью линейного разрешения на объекте, характеризующего линейный размер наименьшего элемента КО, различимого на изображении. Данный показатель качества изображения вычисляется по следующей формуле [13]:

$$L_{\text{ЛРО}} = \frac{D_{\text{Н}}}{2 L_{\text{ЛР}} f},$$

где $D_{\text{Н}}$ – дальность съемки; f – фокусное расстояние; $L_{\text{ЛР}}$ – линейное разрешение оптико-электронной системы; $L_{\text{ЛРО}}$ – линейное разрешение на объекте.

Моделирование сценариев наблюдения КО спутником-инспектором с учетом типичных условий наблюдения и предложенного подхода к выбору времени полной выдержки показало возможность повышения линейного разрешения космических снимков на 10–20% при движении КА по орбитам с углом некомпланарности менее 6° на 40–50% при движении КА по орбитам с углом некомпланарности 45°.

Заключение

Предложенный подход к повышению качества снимков космических объектов, получаемых средствами орбитальной инспекции, базируется на идее совместного учета скорости движения оптического изображения и времени полной выдержки при выборе экспозиции фотоприемного устройства бортовой аппаратуры наблюдения. Результаты расчетов показывают, что данный подход позволяет путем сокращения времени полной выдержки повысить передаточные характеристики информационного тракта оптико-электронной системы, уменьшить величину «смаза», что увеличивает резкость космических снимков. Учет величины зарядового пакета и порога контрастной чувствительности фотоприемного устройства обеспечивает необходимое количество распознаваемых градаций яркости в изображении. Таким образом, достигается выбор экспозиции, обеспечивающей получение космических снимков космических объектов, пригодных для интерпретации. Предложенный подход позволяет выбрать наилучшие параметры работы бортовой аппаратуры наблюдения и находит применение при планировании использования средств орбитальной инспекции, а также при обосновании требований в процессе создания и эксплуатации новых орбитальных систем получения изображений космических объектов.

Литература

1. Кучейко А.А. Уникальное применение спутника ДЗЗ – орбитальная инспекция [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.scanex.ru/ru/news/News_Preview.asp?id=n15525031, свободный. Яз. рус. (дата обращения 28.02.2013).
2. Алтухов А.И., Гнусарев Н.В., Коршунов Д.С. Прогнозирование качества изображений космических объектов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2013. № 3 (83). С. 36–41.
3. Ogilvie A., Allport J., Hannah M., Lymer J. Autonomous satellite servicing using the orbital express demonstration manipulator system // Proc 9th International Symposium on Artificial Intelligence, Robotics and Automation in Space. LA, 2008.
4. Dornheim M. Express Service // Aviation Week and Space Technology. 2006. V. 164. N 23. P. 46–50.
5. Vallado D.A., Griesbach J.D. Simulating space surveillance networks // Advances in the Astronautical Sciences. 2012. V. 142. P. 2769–2787.

6. Stokes G.H., von Braun C., Sridharan R., Sharma J. The space-based visible program // Space 2000 Conference and Exposition. Long Beach, USA, 2000.
7. Концепция развития российской космической системы дистанционного зондирования Земли на период до 2025 года. М.: Федеральное космическое агентство, 2006. 72 с.
8. Асташкин А.А., Любченко Ф.Н., Мальченко А.Н., Новикова Н.П. Концепция развития космических средств дистанционного зондирования земли до 2040 года // Космонавтика и ракетостроение. 2010. Т. 4. № 61. С. 118–124.
9. Лаврентьев В.Г., Олейников И.И. Автоматизированная система предупреждения об опасных ситуациях в околоземном космическом пространстве. М.: ФГУП ЦНИИмаш, 2010. 44 с.
10. Авдеев С.П. Анализ и синтез оптико-электронных приборов. СПб: Правда, 2000. 680 с.
11. Гнусарев Н.В. Геодезическое и баллистическое обеспечение космических систем дистанционного зондирования. СПб: ВКА им. А.Ф. Можайского, 2008. 220 с.
12. Бакланов А.И. Системы наблюдения и мониторинга. М.: Бином, 2009. 234 с.
13. Хартов В.В., Ефанов В.В., Занин К.А. Основы проектирования орбитальных оптико-электронных комплексов: Учеб. пособие. М.: МАИ, 2011. 127 с.
14. Занин К.А. Выбор параметров оптико-электронной космической системы наблюдения по качеству изображения // Полет. Общероссийский научно-технический журнал. 2007. №11. С. 30–37.
15. Занин К.А. Методы проектирования оптико-электронных комплексов космических аппаратов. В кн. Проектирование автоматических космических аппаратов для фундаментальных научных исследований. Т. 1 / Под ред. В.В. Ефанова, К.М. Пичхадзе. Т. 1. М.: МАИ, 2012. С. 285–360.
16. Занин К.А. Разработка методического аппарата повышения качества проектирования космических систем оптико-электронного наблюдения // Вестник НПО им. С.А. Лавочкина. 2011. № 2. С. 32–39.
17. Цыцулин А.К. Телевидение и космос: Учеб. пособие. СПб: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2003. 228 с.
18. Campbell J.B., Wynne R.H. Introduction to Remote Sensing. 5th ed. Guilford Press, 2011. 667 p.
19. Schowengerdt R.A. Remote sensing. Methods and models of image processing. 3rd ed. Academic Press, 2007. 558 p.
20. Григорьев А.Н., Коршунов Д.С., Беляев А.С. Прогнозирование качества космических снимков космических систем дистанционного зондирования // Труды Военно-космической академии им. А.Ф. Можайского. 2010. № 629. С. 143–147.
21. Емельянов С.Г., Атакишев О.И., Алтухов А.И., Гнусарев Н.В., Коршунов Д.С. К вопросу учета условий освещенности при съемке космических объектов фотографическими средствами // Известия Юго-Западного государственного университета. 2012. № 3 (42). С. 58–62.

<i>Алтухов Александр Иванович</i>	– кандидат технических наук, доцент, зав. кафедрой, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия, aai_51@mail.ru
<i>Коршунов Денис Сергеевич</i>	– кандидат технических наук, старший преподаватель, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия, Korshunov.Denis@rambler.ru
<i>Шабakov Евгений Иванович</i>	– кандидат технических наук, доцент, доцент, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия, eish@br.ru
<i>Alexander I. Altukhov</i>	– PhD, Associate Professor, Department head, Mozhaisky Military Space Academy, Saint Petersburg, Russia, aai_51@mail.ru
<i>Denis S. Korshunov</i>	– PhD, Senior lecturer, Mozhaisky Military Space Academy, Saint Petersburg, Russia, Korshunov.Denis@rambler.ru
<i>Evgeniy I. Shabakov</i>	– PhD, Associate professor, Associate professor, Mozhaisky Military Space Academy, Saint Petersburg, Russia, eish@br.ru

*Принято к печати 14.05.14
Accepted 14.05.14*

УДК 681.51

РОБАСТНОЕ РЕГУЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ С ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ
НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ НА ПРИМЕРЕ БЫСТРЫХ
ТЕРМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

А.А. Капитонов^а, С.В. Арановский^а, Р. Ортега^б

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, s.aranovskiy@gmail.com

^б Национальный центр научных исследований, Париж, Франция

Аннотация. Рассмотрена задача построения робастного закона управления по выходу для системы со степенной нелинейностью. Показано, что с использованием записи в отклонениях данная задача может быть сведена к задаче стабилизации нулевого положения в системе с полиномиальной нелинейностью. В качестве практического применения рассматривается задача регулирования температуры в быстрых термических процессах, характерных для газофазной эпитаксии. Современные промышленные установки используют сложные системы контроля температуры и нагрева, которые оказываются неприменимыми для исследовательского лабораторного оборудования. Ограниченное число сенсоров и накладываемые на систему технические ограничения делают актуальной разработку малоразмерных регуляторов, использующих измерения только выходной величины. Решение задачи получено с использованием метода последовательного компенсатора. В работе формулируется ограничение на нелинейность, представляющее собой объединение секторной и степенной нелинейностей. Показано, что полиномиальная нелинейность соответствует введенному ограничению. С использованием аппарата функций Ляпунова доказывается асимптотическая устойчивость замкнутой системы для указанного типа нелинейности, что усиливает ранее известные результаты. Численное моделирование процесса газофазной эпитаксии показало, что с применением предложенного метода удается обеспечить нулевое математическое ожидание ошибки слежения и среднеквадратичную ошибку температуры, не превышающую 1 К.

Ключевые слова: робастное управление, полиномиальная нелинейность, регулирование температуры, газофазная эпитаксия.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01) и при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект 14.Z50.31.0031).

ROBUST REGULATION FOR SYSTEMS WITH POLYNOMIAL NONLINEARITY
APPLIED TO RAPID THERMAL PROCESSES

A.A. Kapitonov^а, S.V. Aranovskiy^а, R. Ortega^б

^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, s.aranovskiy@gmail.com

^б Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, France

Abstract. A problem of output robust control for a system with power nonlinearity is considered. The considered problem can be rewritten as a stabilization problem for a system with polynomial nonlinearity by introducing the error term. The problem of temperature regulation is considered as application; the rapid thermal processes in vapor deposition processing are studied. Modern industrial equipment uses complex sensors and control systems; these devices are not available for laboratory setups. The limited amount of available sensors and other technical restrictions for laboratory setups make it an actual problem to design simple low-order output control laws. The problem is solved by the consecutive compensator approach. The paper deals with a new type of restriction which is a combination of linear and power restrictions. It is shown that the polynomial nonlinearity satisfies this restriction. Asymptotical stability of the closed-loop system is proved by the Lyapunov functions approach for the considered nonlinear function; this contribution extends previously known results. Numerical simulation of the vapor deposition processing illustrates that the proposed approach results in zero-mean tracking error with standard deviation less than 1K.

Keywords: robust control, polynomial nonlinearity, temperature regulation, vapor deposition processing.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation grant 074-U01), the Russian Ministry of Education and Science (project 14.Z50.31.0031)

Введение

Управление нелинейными процессами является не только фундаментальной задачей теории управления, но и имеет большое прикладное значение. Выбор закона управления существенным образом зависит от конкретного типа нелинейности, присущей объекту. Детальный обзор работ, рассматривающих системы, где выходной сигнал нелинейного блока входит как управление в линейный блок, приведен в работе [1]. Хорошо изучены системы с входными и выходными статическими нелинейностями, системы с секторными ограничениями [2]. Тем не менее, задача построения законов управления для более широких классов нелинейностей остается актуальной.

Одним из распространенных способов управления нелинейными системами является линеаризация обратной связью, главный недостаток которой – жесткие требования к точному знанию параметров системы. Другим возможным подходом является метод иммерсии и инвариантности (I&I) [3], однако для его реализации часто требуется измерять состояния системы, а не только выход. Отметим, что в большинстве методов при синтезе нелинейных законов управления предполагается управление по состоянию, т.е. измеримость всех внутренних состояний объекта. Это предположение может ограничивать применимость таких методов на практике. В таких ситуациях привлекательными с инженерной точки зрения являются методы управления по выходу [4]. К таким методам, например, относятся методы адаптивного и робастного управления, представленные в работах [5–10]. Целью настоящей работы является расширение результатов, представленных в работах [6, 7] на случай более широкого класса нелинейностей, чем секторная, как в [6], или степенная, как в [7].

Мотивацией для настоящих исследований послужила задача регулирования быстрых термических процессов, возникающая при разработке оборудования для выращивания полупроводников методом газофазной эпитаксии [11]. Промышленные установки для газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений обладают высокой стоимостью и позволяют достаточно точно контролировать процесс роста структур, в том числе за счет сложных систем измерения и регулирования температуры. В таких установках достигается высокая точность регулирования. В то же время исследовательское лабораторное оборудование нацелено на следующие характеристики: малогабаритность, гибкость настроек и режимов работы, невысокая цена в сравнении с промышленными образцами. Это накладывает определенные условия на систему нагрева и измерительный комплекс. Так, в лабораторном оборудовании Epiquip, используемом в ФТИ им. Иоффе (см. [12]), используются одноэлементный нагреватель и система из двух оптических пирометров, один из которых контролирует качество графитового нагревательного элемента. Указанные технические ограничения делают невозможным использование в таком оборудовании сложных систем регулирования температуры, применяющихся в промышленных установках, что обуславливает актуальность разработки простых и малоразмерных методов регулирования температуры, позволяющих достичь приемлемой точности работы системы. Для рассматриваемой установки требуемой точностью является среднеквадратичная ошибка слежения не более 1 К при рабочей температуре 1273 К, что сопоставимо с точностными характеристиками промышленных установок.

Постановка задачи

На основе работ [13–15] можно записать модель быстрых термических процессов, протекающих в рассматриваемой установке, построенную на основе уравнения баланса энергии:

$$\dot{T}(t) = -a_r (T^4(t) - T_r^4) - a_{conv} (T(t) - T_{conv}) - a_{cond} (T(t) - T_{cond}) + bu(t), \quad (1)$$

где $T(t) > 0$ – температура подложкодержателя в точке измерения; коэффициент $a_r > 0$ описывает потери тепла за счет излучения; коэффициент $a_{conv} > 0$ описывает потери тепла за счет конвекции; коэффициент $a_{cond} > 0$ описывает потери тепла за счет теплопередачи; T_r – температура, соответствующая переизлучению от внутренних стенок камеры; T_{conv} – температура газа, с которым происходит теплообмен через конвекцию; T_{cond} – температура прилегающих участков, с которыми происходит обмен теплом через теплопередачу; коэффициент $b > 0$ описывает приток тепла за счет приведенной мощности индуктора; $u(t) > 0$ – сигнал управления, соответствующий наведенной в индуктор мощности. Так как за счет продува обеспечивается постоянный поток газа, а за счет контура охлаждения – постоянный отвод тепла от стенок камеры, величины T_r , T_{conv} и T_{cond} в рабочем режиме можно считать постоянными. Модель (1) может быть переписана в виде

$$\dot{T}(t) = -a_r T^4(t) - a_c T(t) + bu(t) + C, \quad (2)$$

где $a_c = a_{conv} + a_{cond}$, а константа $C = a_r T_r^4 + a_{conv} T_{conv} + a_{cond} T_{cond}$ описывает совокупный приток тепла от внешней среды. Ставится задача формирования такого закона управления $u(t) = U(T^*, T(t))$, который обеспечивает в замкнутой системе

$$T(t) \rightarrow T^* \text{ при } t \rightarrow \infty, \quad (3)$$

где $T^* > T_r$ и $T^* > T_c$, или, что то же, обеспечивает асимптотическую устойчивость положения равновесия $T = T^*$.

Традиционно при управлении нелинейными системами рассматривается задача стабилизации нулевого положения равновесия. Для сведения задачи слежения за постоянным заданием к задаче стабилизации перепишем модель (2) в отклонениях, введя в рассмотрение $\Delta T(t) = T(t) - T^*$. Система (2) примет вид

$$\Delta \dot{T}(t) = -a_0 \Delta T + bu(t) + \bar{C} + \varphi(\Delta T), \quad (4)$$

где $a_0 = a_c + 4a_r(T^*)^3$, $\bar{C} = C - a_c T^* - a_r (T^*)^4 < 0$ и нелинейная функция

$$\varphi(\Delta T) = -a_r \cdot \Delta T^4 - 4a_r T^* \cdot \Delta T^3 - 6a_r (T^*)^2 \cdot \Delta T^2. \quad (5)$$

Тогда задача управления формулируется как формирование такого закона управления $u(t) = U(\Delta T(t))$, что нулевое положение $\Delta T = 0$ асимптотически устойчиво.

Формирование закона управления

Если предположить, что все параметры системы (4) известны, то задача может быть легко решена с использованием точной линеаризации обратной связью. Действительно, сигнал управления $u(t) = -b^{-1}(\bar{C} + \varphi(\Delta T))$ сводит систему (4) к устойчивой линейной системе. Однако на практике параметры объекта нельзя считать точно известными, так как присутствует модельная неопределенность, связанная с неточной идентификацией или с вариативностью параметров объекта (деградация графитного подложкодержателя, изменение параметров окружающей среды). В силу этих причин будем искать решение задачи в классе робастных законов управления.

В работах [6, 7] был рассмотрен объект управления вида

$$y(t) = \frac{b(p)}{a(p)} u(t) + \frac{c(p)}{a(p)} \varphi(y) + \frac{e(p)}{a(p)} \delta(t), \quad (6)$$

где $p = d/dt$; $y(t)$ – измеряемый выходной сигнал; $u(t)$ – входной сигнал; $\delta(t)$ – действующее на систему возмущение; $\varphi(y)$ – некоторая известная нелинейная функция. Коэффициенты полиномов $a(p) = p^n + \dots + a_1 p + a_0$, $b(p) = b_m p^m + \dots + b_1 p + b_0$, $c(p) = c_r p^r + \dots + c_1 p + c_0$, $e(p) = e_g p^g + \dots + e_1 p + e_0$ неизвестны, $r, g \leq n-1$, относительная степень объекта $\rho = n - m$ известна. Для рассматриваемого объекта (6) была решена задача стабилизации положения равновесия $y = 0$ с использованием метода последовательного компенсатора [8] в предположении, что для нелинейной функции $\varphi(y)$ выполняется секторное [6] или степенное ограничение [7]

$$|\varphi(y)| \leq C_0 |y|^s, \quad (7)$$

где $C_0 \geq 0$ и натуральное число $s \geq 1$. Несмотря на тот факт, что для многих распространенных в инженерной практике нелинейностей указанное соотношение выполняется, налагаемое на $\varphi(y)$ ограничение остается достаточно консервативным. Так, легко показать, что для нелинейности (5) ограничение (7) не выполняется.

Для решения поставленной задачи и достижения цели (3) рассмотрим расширение результатов, представленных в работах [6, 7], на случай более общего и менее консервативного ограничения:

$$|\varphi(y)| \leq C_1 |y| + C_2 |y|^s, \quad (8)$$

где $C_1 \geq 0$, $C_2 \geq 0$. В частности, покажем, что для полиномиальной нелинейности вида (5) неравенство (8) выполняется.

Лемма 1. Для функции

$$\varphi(y) = \sum_{i=1}^s \varphi_i y^i$$

для любых постоянных параметров φ_i , $i = 1, \dots, s$ существуют такие $C_1 \geq 0$ и $C_2 \geq 0$, что неравенство (8) выполняется для всех y .

Доказательство. Запишем

$$|\varphi(y)| = \left| \sum_{i=1}^s \varphi_i y^i \right| \leq \sum_{i=1}^s |\varphi_i| |y|^i.$$

Очевидно, что для доказательства Леммы 1 достаточно показать, что для любого $1 < k < s$ существуют такие $c_{1,k} \geq 0$ и $c_{2,k} \geq 0$, что

$$|y|^k \leq c_{1,k} |y| + c_{2,k} |y|^s. \quad (9)$$

Перепишем это неравенство как

$$|y|^{k-1} (1 - c_{2,k} |y|^{s-k}) \leq c_{1,k}. \quad (10)$$

Пусть $|y|^{s-k} \geq 1/c_{2,k}$. Тогда левая часть неравенства (10) меньше либо равна нулю и, следовательно, неравенство (10) выполняется для любого $c_{1,k} \geq 0$. Рассмотрим теперь отрезок $|y|^{s-k} < 1/c_{2,k}$. Так как на этом отрезке y ограничен, то, очевидно, ограничена и левая часть неравенства (10). Следовательно, суще-

стует такое $c_{1,k} \geq \sup_{|y|^{s-k} < 1/c_{2,k}} (|y|^{k-1} (1 - c_{2,k} |y|^{s-k})) \geq 0$, что неравенство (10) выполняется. Следовательно, (9) выполняется для всех y и всех $1 < k < s$. Лемма 1 доказана.

Для приведения модели (4) к форме (6) далее будем рассматривать постоянное возмущение $\delta(t) = \bar{C} \cdot 1(t)$. (11)

Рассмотрим закон управления

$$u(t) = -(\mu + \kappa) \frac{\alpha(p)(p+1)}{p} \hat{y}(t), \quad (12)$$

где $\alpha(p)$ – гурвицев полином степени $p-1$, $\kappa > 0$, константа $\mu > 0$ выбрана такой, что передаточная функция

$$H(p) = \frac{\alpha(p)b(p)(p+1)}{\alpha(p)p + \mu\alpha(p)b(p)(p+1)} \quad (13)$$

является строго вещественно положительной (СВП). Сигнал $\hat{y}(t)$ формируется следующим образом:

$$\begin{cases} \dot{\xi}_1 = \sigma \xi_2, \\ \dot{\xi}_2 = \sigma \xi_3, \\ \dots \\ \dot{\xi}_{p-1} = \sigma(-k_1 \xi_1 \dots - k_{p-1} \xi_{p-1} + k_1 y), \\ \hat{y} = \xi_1, \end{cases} \quad (14)$$

где $\sigma > (\mu + \kappa)$ и параметры k_1, \dots, k_{p-1} выбираются так, что система (14) устойчива.

Прежде, чем представить основной результат работы, проведем некоторые предварительные преобразования, иллюстрирующие компенсацию возмущения и приводящие систему к форме вход–состояние–выход. Подстановка (12) в (6) приводит к

$$y(t) = (\mu + \kappa) \frac{b(p)\alpha(p)(p+1)}{a(p)p} (\varepsilon(t) - y(t)) + \frac{c(p)}{a(p)} \varphi(y) + \frac{e(p)}{a(p)} \delta(t),$$

где $\varepsilon(t) = y(t) - \hat{y}(t)$. Это выражение может быть приведено к форме

$$[a(p)p + \mu b(p)\alpha(p)(p+1)]y(t) = b(p)\alpha(p)(p+1)[(\mu + \kappa)\varepsilon(t) - \kappa y(t)] + c(p)p \varphi(y) + e(p)p \delta(t)$$

или

$$y(t) = H(p)[(\mu + \kappa)\varepsilon(t) - \kappa y(t)] + \frac{c(p)p}{a(p)p + \mu b(p)\alpha(p)(p+1)} \varphi(y) + \delta_\varepsilon(t), \quad (15)$$

где передаточная функция $H(p)$ определена в (13), а сигнал $\delta_\varepsilon(t)$ задан как

$$\delta_\varepsilon(t) = \bar{C} \frac{e(p)p}{a(p)p + \mu b(p)\alpha(p)(p+1)} \cdot 1(t). \quad (16)$$

Так как передаточная функция $H(p)$ устойчива и числитель передаточной функции (16) имеет нулевой корень, сигнал $\delta_\varepsilon(t)$ является экспоненциально затухающим. Пренебрегая экспоненциально затухающим членом $\delta_\varepsilon(t)$, систему (15) можно переписать в виде

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{b}((\mu + \kappa)\varepsilon - \kappa y(t)) + \mathbf{q} \varphi(y), \\ y(t) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}(t), \end{cases} \quad (17)$$

где вектор $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ является вектором состояния системы (17), \mathbf{A} , \mathbf{b} , \mathbf{c} и \mathbf{q} – вектора и матрицы соответствующих размерностей, полученные при переходе от системы (15) к системе (17). Представим выражение (14) также в форме вход–состояние–выход:

$$\begin{cases} \dot{\xi}(t) = \sigma(\mathbf{\Gamma}\xi(t) + \mathbf{d}y(t)), \\ \hat{y}(t) = \mathbf{h}^T \xi(t), \\ \varepsilon = y(t) - \hat{y}(t) = y(t) - \mathbf{h}^T \xi(t), \end{cases} \quad (18)$$

где $\mathbf{d}^T = [0 \ \dots \ 0 \ k_1]$, $\mathbf{h}^T = [1 \ 0 \ \dots \ 0]$ и

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -k_1 & -k_2 & -k_3 & \dots & -k_{p-1} \end{bmatrix}.$$

Основной результат работы представлен в следующей теореме.

Теорема 1. Пусть выполняется (8). Тогда для любых $\mu > 0$, таких, что передаточная функция (13) строго вещественно положительна, и для любых $\bar{x} > 0$ существует такое $\kappa > 0$, что в замкнутой системе (17), (18) положение равновесия $y = 0$ асимптотически устойчиво для всех начальных условий $\|x_0\| \leq \bar{x}$.

Прежде чем представить доказательство теоремы 1, приведем некоторые вспомогательные результаты. Введем в рассмотрение сигнал $\eta(t) = \mathbf{h}y(t) - \xi(t)$. Так как для системы (18) справедливо $\mathbf{h}^T \mathbf{h} = 1$, то $\varepsilon(t) = \mathbf{h}^T \mathbf{h} y(t) - \mathbf{h}^T \xi(t) = \mathbf{h}^T \eta(t)$. Продифференцировав сигнал $\eta(t)$, получим

$$\dot{\eta}(t) = \mathbf{h}\dot{y}(t) - \sigma(\Gamma(\mathbf{h}y(t) - \eta(t)) + \mathbf{d}k_1 y(t)) = \mathbf{h}\dot{y}(t) + \sigma\Gamma\eta(t) - \sigma(\mathbf{d} + \Gamma\mathbf{h})y(t).$$

С учетом $\mathbf{d} = -\Gamma\mathbf{h}$ система (18) может быть представлена в виде

$$\begin{cases} \dot{\eta}(t) = \mathbf{h}\dot{y}(t) + \sigma\Gamma\eta(t), \\ \varepsilon(t) = \mathbf{h}^T \eta(t). \end{cases}$$

Так как матрица Γ – гурвицева в силу выбора параметров k_1, \dots, k_{p-1} , то существуют такие $\mathbf{N} = \mathbf{N}^T > 0$ и $\mathbf{M} = \mathbf{M}^T > 0$, что

$$\Gamma^T \mathbf{N} + \mathbf{N} \Gamma = -\mathbf{M}. \tag{19}$$

Так как передаточная функция $H(p)$ – СВП, то существуют такие $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T > 0$ и $\mathbf{R} = \mathbf{R}^T > 0$, что

$$\mathbf{A}^T \mathbf{P} + \mathbf{P} \mathbf{A} = -\mathbf{R}, \quad \mathbf{P} \mathbf{b} = \mathbf{c}, \tag{20}$$

где матрица \mathbf{R} зависит от параметра μ , но не зависит от параметра κ .

Доказательство теоремы 1. Введем функцию Ляпунова

$$V(t) = \mathbf{x}^T(t) \mathbf{P} \mathbf{x}(t) + \eta^T(t) \mathbf{N} \eta(t). \tag{21}$$

В работах [6, 7] показано, что с учетом свойств (19) и (20) для производной от функции Ляпунова (21) справедливо следующее неравенство

$$\dot{V}(t) \leq -\lambda_0 V(t) - 2\kappa y^2(t) + (l^{-1} + \kappa^{-1})[\varphi(y)]^2, \tag{22}$$

где $0 < l < 0,5$ – константа. С учетом (8) и используя неравенство Юнга $2ab \leq \frac{1}{c}a^2 + cb^2$, запишем:

$$\begin{aligned} |\varphi(y)|^2 &\leq C_1^2 |y|^2 + 2C_1 C_2 |y|^s |y| + C_2^2 |y|^{2s} \leq (C_1^2 + C_1^2 C_2^2) |y|^2 + (1 + C_2^2) |y|^{2s}, \\ (l^{-1} + \kappa^{-1})(1 + C_2^2) |y| |y|^{2s-1} &\leq \psi_0 (l^{-1} + \kappa^{-1})^2 (1 + C_2^2)^2 |y|^2 + \psi_0^{-1} |y|^{4s-2}. \end{aligned}$$

Таким образом, неравенство (22) принимает вид

$$\dot{V}(t) \leq -\lambda_0 V(t) - 2\kappa y^2(t) + \psi^{-1} |y(t)|^{4s-2} + (l^{-1} + \kappa^{-1}) [C_1^2 + C_1^2 C_2^2 + \psi(l^{-1} + \kappa^{-1})(1 + C_2^2)^2] |y(t)|^2.$$

Несложно показать, что существует такое κ_0 , что для всех $\kappa \geq \kappa_0$ выполняется

$$2\kappa > (l^{-1} + \kappa^{-1}) [C_1^2 + C_1^2 C_2^2 + \psi(l^{-1} + \kappa^{-1})(1 + C_2^2)^2],$$

и, следовательно,

$$\dot{V}(t) \leq -\lambda_0 V(t) + \psi^{-1} |y(t)|^{4s-2}.$$

Выберем λ_1 такое, что

$$\lambda_1 (\mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x})^{2s-1} \geq (\mathbf{x}^T \mathbf{c} \mathbf{c}^T \mathbf{x})^{2s-1} = y^{4s-2}.$$

Тогда

$$\dot{V}(t) \leq -\lambda_0 V(t) + \psi^{-1} |y(t)|^{4s-2} \leq -\lambda_0 V(t) + \psi^{-1} \lambda_1 (\mathbf{x}^T(t) \mathbf{P} \mathbf{x}(t))^{2s-1} \leq -\lambda_0 V(t) + \psi^{-1} \lambda_1 V^{2s-1}(t).$$

Выберем ψ такое, что

$$\psi^{-1} \leq \frac{\lambda_0}{\lambda_1 (V^{2s-2}(t_0) + \varepsilon_\nu)}, \tag{23}$$

где $\varepsilon_\nu > 0$ – некоторая малая константа. Тогда

$$\dot{V}(t) \leq -\lambda_0 V(t) + \lambda_0 \frac{V^{2s-1}(t)}{V^{2s-2}(t_0) + \varepsilon_V} \leq -\lambda_0 V(t) \left(1 - \frac{V^{2s-2}(t)}{V^{2s-2}(t_0) + \varepsilon_V} \right) < 0, \quad (24)$$

где последнее строгое неравенство справедливо при $V(t) \neq 0$. Из (24) следует асимптотическая устойчивость $V = 0$ и, следовательно, $y = 0$. Отметим, что параметр ψ в (23), а следовательно, и параметр κ_0 , зависят от значения функции Ляпунова (21) в момент времени t_0 и являются функцией начальных условий $\|x_0\| \leq \bar{x}$. Теорема 1 доказана.

Численное моделирование

Представим систему (4) в форме (6):

$$\Delta \dot{T}(t) = \frac{b}{p+a_0} u(t) + \frac{1}{p+a_0} \delta(t) + \frac{1}{p+a_0} \varphi(\Delta T), \quad (25)$$

где $\delta(t)$ определено в (11), а $\varphi(\Delta T)$ в (5). Относительная степень системы равна единице, следовательно, вместо (14) запишем $\Delta \hat{T}(t) = \Delta T(t)$. Выберем полином $\alpha(p)$ в (12) в виде $\alpha(p) = \alpha_0 = 1$. Закон управления (12) примет вид

$$u(t) = -(\mu + \kappa) \frac{(p+1)}{p} \Delta T(t), \quad (26)$$

а передаточная функция (13)

$$H(p) = \frac{b(p+1)}{p + \mu b(p+1)} = \frac{b(p+1)}{(1 + \mu b)p + \mu b}. \quad (27)$$

Передаточная функция (27) является СВП для всех $\mu > 0$. Выберем $\mu = 0,01$ и $\kappa = 0,1$.

Для моделирования системы (2) выберем следующие значения параметров:

$$a_r = 1 \cdot 10^{-12}, \quad a_c = 4,75 \cdot 10^{-3}, \quad b = 4,37, \quad C = 4,49.$$

Эти параметры соответствуют лабораторной установке Eriquir [12]. Сигнал управления нормализован в диапазоне от нуля до единицы. Целевая температура составляет $T^* = 1273$ К. Начальная температура $T(t_0 = 0) = 1243$ К, выход в окрестность рабочей температуры на практике осуществляется в специальном режиме работы системы управления и здесь не рассматривается. Измерение температуры осуществляется оптическим пирометром с частотой 10 Гц, шум измерений представляет собой нормально распределенный сигнал с нулевым математическим ожиданием и дисперсией $0,02$ К². График переходного процесса в системе представлен на рисунке. Установившееся значение равно 1273 К, среднеквадратичное отклонение составляет 0,33 К.

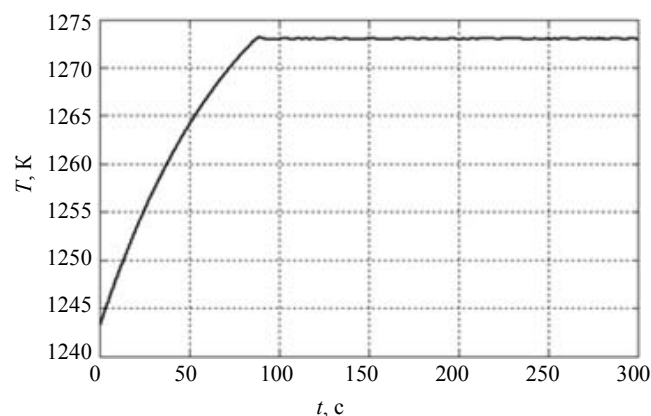


Рисунок. Переходный процесс в системе (25) с законом управления (26) при $\mu = 0,01$ и $\kappa = 0,1$.

Заключение

Рассмотрена задача построения робастного закона управления по выходу для системы с нелинейностью, удовлетворяющей неравенству (8). Решение задачи получено с использованием метода последовательного компенсатора. С использованием метода функций Ляпунова доказывается асимптотическая устойчивость замкнутой системы для указанного типа нелинейности, что усиливает ранее известные результаты [6, 7]. Полученный закон управления предлагается использовать для построения системы регулирования температуры в процессе газофазной эпитаксии. Приведена математическая модель термического процесса и показано, что задача поддержания постоянной температуры может быть сведена к задаче стабилизации нулевого положения с сопутствующим переходом от степенной нелинейности к поли-

номиальной. Показано, что полиномиальная нелинейность удовлетворяет неравенству (8), следовательно, предложенный в работе метод может быть использован для решения задачи регулирования температуры.

Численное моделирование процесса газофазной эпитаксии показало, что с применением предложенного метода удастся обеспечить следующие точностные характеристики: нулевое математическое ожидание ошибки слежения и среднеквадратичную ошибку, не превышающую 1 К, что сопоставимо с промышленными установками.

Литература

1. Kokotović P., Arcak M. Constructive nonlinear control: a historical perspective // *Automatica*. 2001. V. 37. N 5. P. 637–662.
2. Мирошник И.В., Никифоров В.О., Фрадков А.Л. Нелинейное и адаптивное управление сложными динамическими системами. СПб: Наука, 2000. 549 с.
3. Astolfi A., Ortega R. Immersion and invariance: a new tool for stabilization and adaptive control of nonlinear systems // *IEEE Transactions on Automatic Control*. 2003. V. 48. N 4. P. 590–606.
4. Бобцов А.А., Никифоров В.О. Адаптивное управление по выходу: проблематика, прикладные задачи и решения // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2013. № 1 (83). С. 1–14.
5. Фуртат И.Б., Цыкунов А.М. Адаптивное управление объектами с неизвестной относительной степенью // *Автоматика и телемеханика*. 2010. № 6. С. 109–118.
6. Pyrkin A.A., Bobtsov A.A., Kolyubin S.A., Faronov M.V., Shavetov S.V., Kapitanyuk Y.A., Kapitonov A.A. Output control approach ‘consecutive compensator’ providing exponential and L_∞ -stability for nonlinear systems with delay and disturbance // *Proc. IEEE International Conference on Control Applications, CCA 2011. Denver, USA, 2011. P. 1499–1504.*
7. Pyrkin A. A., Bobtsov A. A., Kolyubin S. A. Simple output controller for nonlinear systems with multisinusoidal disturbance // *Proc. 21st Mediterranean Conference on Control and Automation, MED 2013. Plataniias-Chania, Crete, Greece, 2013. P. 1087–1091.*
8. Бобцов А.А., Капитонов А.А., Николаев Н.А. Управление по выходу нелинейными системами с неучтенной динамикой // *Автоматика и телемеханика*. 2010. № 12. С. 3–10.
9. Бобцов А.А., Пыркин А.А. Алгоритм управления по выходной переменной для линейного объекта с неизвестными параметрами и динамической размерностью // *Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО*. 2011. № 4 (74). С. 160–161.
10. Бобцов А.А. Робастное управление по выходу линейной системой с неопределенными коэффициентами // *Автоматика и телемеханика*. 2002. № 11. С. 108–117.
11. Новиков В.А., Преображенский В.В., Ивонин И.В. Влияние температуры роста на статистические параметры морфологии поверхности GaN // *Физика и техника полупроводников*. 2014. Т. 48. № 7. С. 898–901.
12. Лундин В.В., Сахаров А.В., Цацульников А.Ф., Заварин Е.Е., Бесюлькин А.И., Фомин А.В., Сизов Д.С. Выращивание эпитаксиальных слоев AlGaIn и сверхрешеток AlGaIn/GaN методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений // *Физика и техника полупроводников*. 2004. Т. 38. № 6. С. 705–709.
13. Schaper C.D., Cho Y.M., Park P., Norman S.A., Gyugyi P., Hoffmann G., Balemi S., Boyd S.P., Franklin G., Kailath T., Saraswat K.C. Modeling and control of rapid thermal processing // *Proc. SPIE – The International Society for Optical Engineering*. 1992. V. 1595. P. 2–17.
14. Schaper C.D., Moslehi M.M., Saraswat K.C., Kailath T. Modeling, identification, and control of rapid thermal processing systems // *Journal of the Electrochemical Society*. 1994. V. 141. N 11. P. 3200–3209.
15. Ebert J., De Roover D., Porter L.L., Lisiewicz V.A., Ghosal S., Kosut R.L., Emami-Naeini A. Model-based control of rapid thermal processing for semiconductor wafers // *Proceedings of the American Control Conference*. 2004. V 5. P. 3910–3921.

Капитонов Александр Александрович	– аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, kap2fox@gmail.com
Арановский Станислав Владимирович	– кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, s.aranovskiy@gmail.com
Ортега Ромео	– PhD, директор по исследованиям, Национальный центр научных исследований, Париж, Франция, ortega@lss.supelec.fr
Alexander A. Kapitonov	– postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, kap2fox@gmail.com
Stanislav V. Aranovskiy	– PhD, Senior researcher, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, s.aranovskiy@gmail.com
Romeo Ortega	– PhD, Directeur de Recherche, Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, France, ortega@lss.supelec.fr

Принято к печати 28.05.14

Accepted 28.05.14

УДК 621.362; 621.315.562

НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ

ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕРМОЭЛЕКТРИКОВ

Л.П. Булат^a, Л.В. Бочков^a, И.А. Нефедова^a, Р. Ахыска^b^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, bulat@irbt-itmo.ru^b Университет Гази, Анкара, Турция

Аннотация. Обоснована актуальность термоэлектрического преобразования энергии. Показана перспективность использования наноструктур в качестве термоэлектрических материалов. Систематизированы и обобщены методы и результаты исследования объемных наноструктурных термоэлектриков на основе твердых растворов Bi-Sb-Te. Продемонстрированы способы получения наночастиц и их последующего спекания в объемный образец, результаты исследования структуры полученных материалов методами электронной микроскопии и рентгеновской спектроскопии, исследования механических свойств. Обсуждаются предложенные с участием авторов методы изготовления и свойства термоэлектрических нанокompозитов, полученных с добавлением фуллерена, термически расщепленного графита, графена и дисульфида молибдена. Рассмотрены методы предотвращения рекристаллизации, методы измерения термоэлектрических свойств данных нанотермоэлектриков: электро-, теплопроводности, термоэдс и добротности. Теоретически исследованы факторы, влияющие на термоэлектрическую добротность, в том числе туннелирование носителей через зазор между нанозернами, дополнительное рассеяние фононов на границах нанозерен и энергетическая фильтрация носителей через барьеры. Установлены механизмы и пути увеличения добротности. Экспериментально подтвержден рост термоэлектрической добротности. Показаны физические механизмы увеличения термоэлектрической добротности за счет использования наноструктур. Увеличение термоэлектрической добротности означает расширение областей рационального применения термоэлектрической генерации энергии и термоэлектрического охлаждения.

Ключевые слова: термоэлектричество, термоэлектрики, наноструктуры, термоэлектрическое преобразование энергии, термоэлектрическая добротность, нанокompозиты, теплопроводность, туннелирование, рассеяние фононов на границах, энергетическая фильтрация.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-08-00283-а) и при поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

NANOSTRUCTURING AS A WAY FOR THERMOELECTRIC EFFICIENCY IMPROVEMENT

L.P. Bulat^a, L.V. Bochkov^a, I.A. Nefedova^a, R. Ahiska^b^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia, bulat@irbt-itmo.ru^b Gazi University, Ankara, Turkey, rahiska@rambler.ru

Abstract. The urgency of thermoelectric energy conversion is proved. Perspectives of nanostructures usage as thermoelectric materials are shown. The authors have systematized and generalized the methods and investigation results of bulk nanostructure thermoelectrics based on Bi-Sb-Te solid solutions. Ways of nanoparticles fabrication and their subsequent sintering into a bulk sample, results of structure study of the received materials are shown by methods of electronic microscopy and X-ray spectroscopy, results of mechanical properties investigation. Methods of manufacturing suggested with the authors' participation and properties of thermoelectric nanocomposites, fabricated with addition of fullerene, thermally split graphite, graphene and molybdenum disulphide are discussed. Methods for prevention of recrystallization, measurement methods of thermoelectric properties of studied nanothermoelectrics are considered, including electric and thermal conductivities, thermoemf and the figure of merit. Factors that influence on thermoelectric figure of merit, including the tunneling of carriers through interfaces between nanograins, the additional phonon scattering on nanograin borders and the energy filtration of carriers through barriers have been theoretically investigated. Mechanisms and ways for improvement of the figure of merit are determined. Experimental confirmation for thermoelectric figure of merit increase is received. Physical mechanisms of thermoelectric figure of merit increase are shown by perceptivity of nanostructures utilization. The growth of thermoelectric figure of merit means an expansion of areas for rational application of thermoelectric energy generation and thermoelectric cooling.

Keywords: thermoelectricity, thermoelectrics, nanostructures, direct energy conversion, thermoelectric figure of merit, nanocomposites, thermal conductivity, tunneling, phonon scattering on borders, energy filtration.

Acknowledgements. The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant №12-08-00283-а) and partially by the Government of the Russian Federation (grant 074-U01).

Введение

Энергопотребление в мире ежегодно возрастает, быстро растет и спрос на органическое топливо. К росту цен на нефть приводит не только истощение ископаемых ресурсов, но и выявившиеся проблемы с безопасностью атомной энергетики. Так, авария на АЭС «Фукусима» вызвала активное неприятие атомной энергетики на уровне мировой общественности и заставила ряд правительств пересмотреть вопрос

об использовании атомной энергии. В сложившейся ситуации рост цен на нефть уже приводит к экономической и политической нестабильности. Особое значение имеет и опасное изменение климата в результате неограниченного сжигания углеводородного топлива. Все это остро ставит вопрос о поиске альтернативных и возобновляемых источников энергии. Одним из решений этой проблемы является использование термоэлектрического преобразования энергии [1, 2]. Даже для утилизации солнечной энергии могут быть использованы гибридные фото-термоэлектрические генераторы [3–5].

С другой стороны, объектом все более пристального внимания разработчиков систем охлаждения и термостабилизации становятся альтернативные методы охлаждения. Такой интерес объясняется в первую очередь существенными трудностями, возникшими в области традиционной (парокомпрессионной) холодильной техники. Монреальский протокол, подписанный правительствами многих стран, запретил использование большинства хладагентов, разрушающих озоновый слой и играющих значительную роль в формировании парникового эффекта, ответственного за глобальное потепление. Ряд других хладагентов, основу которых также составляют фторхлоруглеводороды, подлежит поэтапному выводу из эксплуатации в соответствии с жестким графиком. По этой причине все более востребованным становится термоэлектрическое охлаждение. Термоэлектрическое охлаждение – это лучшее техническое решение для задач понижения температуры и термостабилизации элементов микроэлектроники, оптоэлектроники и светотехники. Исключительно термоэлектрический метод охлаждения может обеспечить локальный отвод тепла от конкретных точек чипов [1, 6].

Таким образом, термоэлектрическая генерация энергии и термоэлектрическое охлаждение [7, 8] могут обеспечить существенное уменьшение нагрузки на окружающую среду.

Основной проблемой в решении задач термоэлектричества является поиск соответствующих термоэлектрических материалов (термоэлектриков), которые должны иметь относительно высокую термоэлектрическую добротность [1]

$$Z = \frac{\sigma \alpha^2}{\kappa}, \quad (1)$$

где σ , α , κ – коэффициенты электропроводности, термоэдс и теплопроводности термоэлектрика.

С середины XX и до начала XXI в.в., несмотря на активные усилия различных исследователей, добротность лучших материалов возросла не более чем на 25%. Но, благодаря использованию нанотехнологий, за последнее десятилетие безразмерную термоэлектрическую добротность ZT , по-видимому, удалось увеличить в лучших образцах с 1,0 до 2,5, где T – абсолютная температура (см., например, [9–12]). К сожалению, эксперименты, демонстрирующие высокую добротность в упорядоченных низкоразмерных наноструктурах, являются уникальными и исключительно дорогостоящими. Видимо, поэтому за 10 лет ни одна из лабораторий мира не смогла воспроизвести лучшие результаты по добротности термоэлектриков с квантовыми ямами (2D), квантовыми нитями (1D) и квантовыми точками (0D). В связи с этим необходимо найти общедоступные и дешевые технологии создания эффективных термоэлектриков.

Относительно дешевой технологией наноструктурирования является метод, состоящий в механоактивационной обработке исходного материала с последующим горячим прессованием [13–17] или искровым плазменным спеканием (SPS – spark plasma sintering) [18–20]. При этом получают объемные поликристаллические наноструктуры [13–20].

Известно, что наибольшей термоэлектрической добротностью при не очень высоких температурах обладают термоэлектрики на основе твердых растворов Bi-Sb-Te, которые в настоящее время производятся серийно в различных странах. Исходя из этого, эти материалы наиболее интересны с точки зрения возможного повышения их термоэлектрической добротности при наноструктурировании. Целью настоящей работы является систематизация и обобщение основных результатов по созданию и исследованию термоэлектрических свойств объемных наноструктурных материалов на основе теллурида висмута, причем в первую очередь анализируются результаты, в получении которых авторы данной работы принимали активное участие.

Создание объемных нанокристаллических термоэлектриков

В настоящее время в качестве основного материала для положительной ветви термоэлементов эффективно используется твердый раствор на основе тройной системы $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$. При этом наибольший интерес представляют составы, обогащенные теллуридом сурьмы, среди которых самый распространенный состав, соответствующий формуле $\text{Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_3$, содержит 25 мол.% Bi_2Te_3 и 75 мол.% Sb_2Te_3 . Избранная схема изготовления объемных термоэлектрических материалов с нанокристаллической структурой предполагает использование методов порошковой металлургии, а именно, последовательное осуществление в едином технологическом цикле операций получения нанопорошка исходного синтезированного материала и превращение его путем горячего прессования или искрового плазменного спекания в компактный материал с заданными геометрическими размерами и структурой [14, 16, 17, 21].

Итак, в качестве исходного кристаллического материала используется термоэлектрик $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Te}_3$ p -типа, полученный методом зонной плавки и имеющий термоэлектрическую добротность $ZT \approx 1,0$ при

комнатной температуре. После измельчения в атмосфере аргона и очистки образцы подвергаются механоактивационной обработке в высокоскоростной планетарной шаровой мельнице (рис. 1). Ускорение при соударении стальных шаров достигает 90 g. Размеры полученных наночастиц составляли около 8–10 нм.

Далее проводилось спекание порошковых смесей под давлением для создания объемного наноструктурного термоэлектрика. Для горячего прессования нанопорошков использовалось давление в диапазоне от 35 МПа до 3,3 ГПа при температуре от 250°C до 500°C.



Рис. 1. Контейнер планетарной шаровой мельницы (а) и схема движения в ней (б). Внешний диаметр цилиндра на рис. 1, а, составляет 50 мм

Структура, механические и термоэлектрические свойства

Применимость того или иного материала в качестве термоэлектрика зависит от целого ряда факторов, в первую очередь – от его термоэлектрических и механических свойств, а также особенностей структуры.

Для определения упругих модулей был применен модифицированный эхоимпульсный метод с применением фокусирующей системы акустического микроскопа [13, 21]. Был использован режим ультракоротких зондирующих импульсов, что позволило регистрировать отдельные сигналы, обусловленные отражением импульса от стенок образца, и в конечном итоге рассчитать для каждого образца полный набор упругих характеристик – объемный модуль, модуль сдвига, модуль Юнга и коэффициент Пуассона.

Микроструктура образцов исследовалась на шлифах, изготовленных на шлифовально-полировальном приборе фирмы «Struers» [21]. Для измерения предела прочности при растяжении использовался метод диаметрального сжатия дисковых образцов. Оказалось, что прочность при растяжении объемных наноструктур, полученных методом горячего прессования, достигает 40 МПа, и их механические свойства в 3 раза лучше, чем у исходных термоэлектриков, полученных зонной плавкой [13, 21]. Плотность полученных материалов составила 6,70–6,72 г/см³.

Структура порошков и компактных образцов исследовалась методами растровой электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии [13, 21]. Рентгенодифрактометрические измерения включали фазовый анализ методом дифракции рентгеновских лучей, определение параметров решетки путем съемки дифрактограмм, определение размера областей когерентного рассеяния микродеформаций, а также анализ текстуры с помощью построения обратных полюсных фигур [13, 21].

На рис. 2 представлена структура наночастиц порошков состава $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$. Средний размер частиц – около 8–10 нм, минимальный составляет 2 нм, а максимальный иногда достигает значений 40 нм [13, 21].

В результате горячего прессования были получены компактные наноструктурированные образцы состава $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ [13, 21]. Примеры изображения поверхности образцов во вторичных электронах, полученные после прессования, показаны на рис. 3. На поверхности образцов видны следы полировки. Поры и границы зерен не просматриваются, и структура является однородной и изотропной. После травления видны структурные элементы размером 50–200 нм, которые, в свою очередь, состоят из более мелких образований [21].

Измерительная методика, позволяющая исследовать термоэлектрические свойства наноструктурированных и нанокompозитных материалов, должна обеспечивать измерение термоэлектрических параметров на образцах относительно небольших размеров (около 1 мм). Наибольшую трудность на малых образцах представляет измерение теплопроводности, потому что все традиционные методики основаны на пропускании через образец калиброванного теплового потока, измерить который с достаточной точностью и учесть все его потери на малых образцах невозможно. В связи с этим был использован метод Хармана [22], который позволяет определять непосредственно термоэлектрическую добротность (1) пу-

тем измерения только электрических величин, не затрагивая тепловые потоки. Кроме того, методика позволяет в одном цикле измерений получать также значения коэффициента термоэдс α и коэффициента электропроводности σ . Значение коэффициента теплопроводности κ определяется расчетом по известной величине термоэлектрической добротности Z . Следует учесть, что реальные условия измерения никогда не являются строго адиабатическими, поэтому в результате расчетов получается не истинное значение Z , а некоторое эффективное значение Z_{eff} , которое должно быть пересчитано в Z с учетом всех тепловых потерь [22]. Кроме того, необходимо учесть вклад от джоулева тепла, выделяющегося в проводах, подводящих электрический ток. Все эти проблемы нетривиальны. Отметим работы [23, 24], в которых обсуждаются вопросы измерения энергетических параметров термоэлектрических батарей.

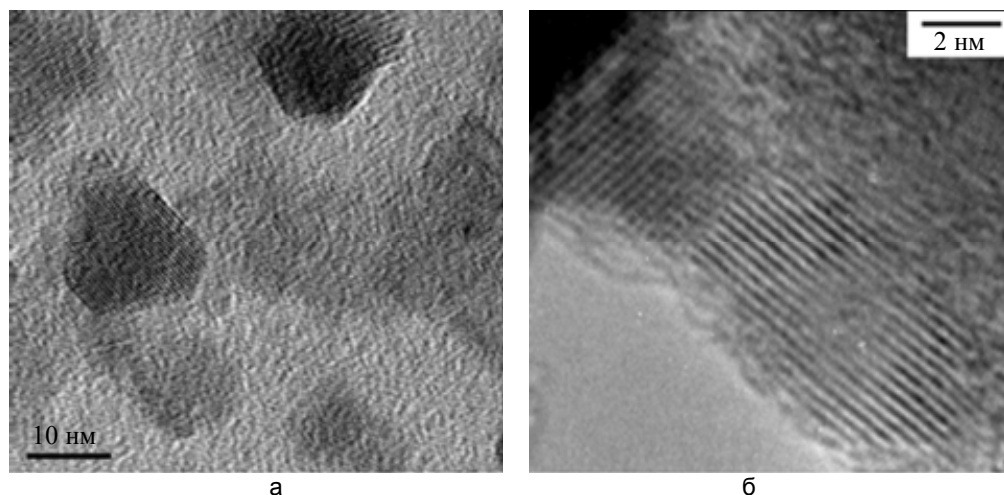


Рис. 2. Изображение частиц порошка в просвечивающем электронном микроскопе в различных масштабах

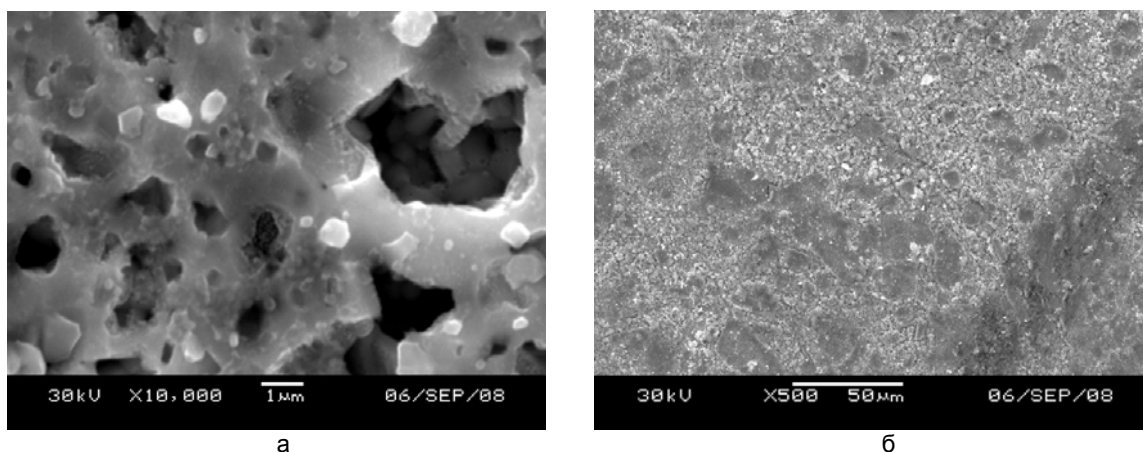


Рис. 3. Примеры поверхности образцов, полученных во вторичных электронах в различных масштабах

Подчеркнем следующее важное обстоятельство. Как правило, в современных лабораториях измерение теплопроводности производят посредством измерения температуропроводности методом лазерной вспышки (flash-метод). Было проведено сравнение погрешностей определения термоэлектрических параметров материала методом Хармана и раздельным измерением электропроводности, термоэдс и теплопроводности на разных образцах (с измерением температуропроводности методом лазерной вспышки) [18, 19, 25]. Установлено, что в последнем случае имеет место систематическая ошибка, приводящая к завышенным значениям ZT вследствие специфики измерения температуропроводности методом лазерной вспышки.

Предотвращение процессов рекристаллизации

Серьезной проблемой, связанной с получением компактных объемных нанокристаллических образцов, является рекристаллизация, препятствующая сохранению наноструктурного состояния материала [13]. Рекристаллизация увеличивает размеры зерен с 10–20 нм, которые имеют наночастицы до процесса спекания, до 100–300 нм после спекания. Для предотвращения этого эффекта использовались два метода [13, 17–21]:

1. Создание нанокомпозитов, т.е. включение в исходную матрицу из нанопорошка Bi-Sb-Te малых добавок фуллерена или наночастиц со слоистой структурой (типа дисульфида молибдена MoS_2 , терми-

чески расщепленного графита, графена). После горячего прессования инородные частицы располагались по границам частиц основного твердого раствора, препятствуя рекристаллизации [13]. Структура такого обволакивания частиц [21] представлена на рис. 4, 5.

2. Использование SPS-метода для компактирования нанопорошков [17–21, 25].

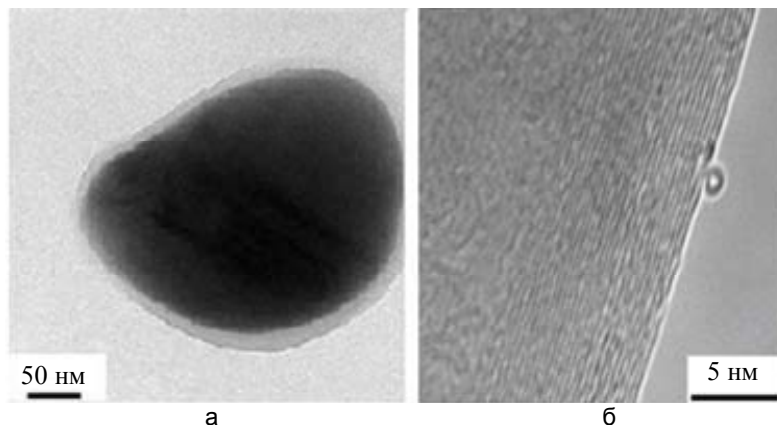


Рис. 4. Углеродное покрытие наночастиц состава $\text{Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_3$: графен (а); неупорядоченная структура на основе углерода (б)

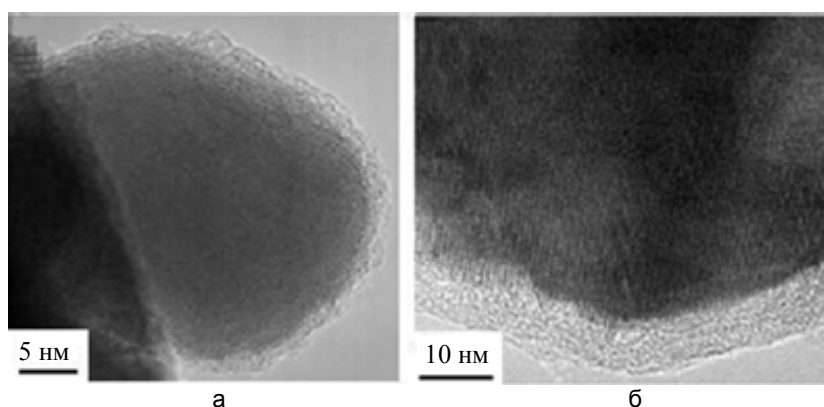


Рис. 5. Наночастицы полупроводника в оболочке из фуллерена C_{60} : состав $\text{Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_3$ (а); состав $\text{Bi}_{0,4}\text{Sb}_{1,6}\text{Te}_3$ (б)

Оба метода – обволакивание исходных наночастиц и SPS – приводят к уменьшению размеров зерен в несколько раз. Таким образом, оба метода позволяют сохранить наноструктуру объемного образца, что в итоге вызывает рост термоэлектрической добротности. Максимальная безразмерная добротность наноструктурных образцов $\text{Bi}_{0,4}\text{Sb}_{1,6}\text{Te}_3$ достигалась при 90°C и составляла $ZT = 1,2$ (подробнее см. [18, 25]).

Механизмы влияния наноструктурирования на термоэлектрическую добротность объемных термоэлектриков

Ясно, что наноструктурирование термоэлектриков позволяет использовать новый управляемый параметр – размеры наноструктурных элементов – как дополнительный фактор воздействия на добротность. Это означает существование новых механизмов, которые могут привести к увеличению термоэлектрической добротности в объемных нанокристаллических термоэлектрических материалах. Рассмотрим подробнее эти механизмы.

Туннелирование носителей заряда через межзеренные границы. Для исследования влияния туннелирования носителей заряда на термоэлектрическую добротность в объемных наноструктурированных образцах была построена модель кристаллических зерен в виде двух усеченных конусов с общим основанием, разделенных друг от друга туннельными барьерами [26, 27]. При расчете теплопереноса при наличии вакуумного зазора, когда фононы не могут туннелировать через зазор, было принято во внимание рассогласование температур электронов и фононов. Прямоугольная форма потенциального барьера является хорошим приближением для материалов на основе теллурида висмута. В этом случае вероятность туннелирования была рассчитана точно (без использования квазиклассического приближения) [26, 27]. Для туннельного барьера были вычислены коэффициент термоэдс, коэффициент электропроводности и число Лоренца, после чего были определены тепловой поток и эффективные кинетические коэф-

фициенты нанозерен. Для исследования распределения электронной и фононной температур использовались уравнения энергетического баланса электронов и фононов, а также уравнение непрерывности для электрического тока. Оказалось [26], что безразмерная добротность ZT при наличии вакуумных зазоров довольно велика и при некоторых условиях может достигать значений 2,5–4,0. Это обусловлено малой теплопроводностью барьеров и их высокой термоэдс. При расчетах [26] рассматривался предельный случай вакуумного зазора между наночастицами, когда фононы не могут туннелировать через барьерный слой. Иначе говоря, эти результаты следует рассматривать как предельные, причем при вычислениях были использованы минимальные значения размеров наночастиц 10–20 нм. По-видимому, использование плотных материалов с ультранизкой теплопроводностью [27] в принципе позволяет достигать существенного увеличения термоэлектрической добротности и без вакуумных зазоров [27].

Дополнительное рассеяние фононов и носителей заряда. Известно, что рассеяние фононов на границах зерен и других неоднородностей в твердых телах приводит к уменьшению решеточной теплопроводности, следовательно, при этом будет возрастать термоэлектрическая добротность (1), в знаменатель которой входит коэффициент теплопроводности, включающий электронную и фононную составляющие, $\kappa = \kappa_e + \kappa_{ph}$. В наноструктурированном объемном материале имеется гигантское число границ между наночастицами, поэтому в термоэлектрических наноструктурах естественно ожидать существенного уменьшения фононной теплопроводности по сравнению с исходными кристаллическими материалами. Именно этот механизм, по-видимому, является основным фактором увеличения термоэлектрической добротности в объемных наноструктурах на основе теллурида висмута. В работах [28, 29] было учтено рассеяние фононов на примесях, изотопах и на границах нанозерен при расчете решеточной теплопроводности в модели Дебая. Показано, что рассеяние фононов на границах нанозерен с размерами в диапазоне 10–20 нм в объеме наноструктурного твердого раствора на основе Bi_2Te_3 может уменьшить теплопроводность кристаллической решетки на 20–30% по сравнению с исходным материалом.

В работе [30] теоретически исследованы кинетические коэффициенты и термоэлектрическая добротность объемных наноструктурированных материалов на основе $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$, содержащих как аморфные, так и нанокристаллические области с различным размером частиц. Оценки термоэлектрической добротности аморфной фазы показали, что добротность может превысить ZT исходного твердого раствора в 2–3 раза в основном за счет сильного снижения теплопроводности. Исследованы также эффективные кинетические коэффициенты среды в целом в зависимости от параметров каждой фазы, и указана область концентрации аморфной фазы, позволяющая получить эффективное значение ZT , превышающее единицу. Представляет интерес изменение решеточной теплопроводности объемных наноструктурированных материалов на основе твердых растворов $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ в зависимости от распределения зерен по размерам [31]. Эти материалы имеют поликристаллическую структуру с размерами зерен от нескольких десятков нанометров до нескольких микрометров. Крупные зерна могут иметь включения или состоять из нескольких более мелких частей, соответствующих областям когерентного рассеяния при дифракции рентгеновских лучей. В работе [31] выполнен расчет изменения решеточной теплопроводности за счет дополнительного рассеяния на включениях и межзеренных границах и проведено сравнение величины решеточной теплопроводности при рассеянии на межзеренных границах. Использовались три различных подхода: постоянная длина свободного пробега, метод эффективной среды и метод Монте-Карло. Последние два метода дают очень близкие результаты для снижения решеточной теплопроводности при рассеянии на границах. Показано, что уменьшение разброса размеров наночастиц способствует повышению термоэлектрической добротности [31].

Энергетическая фильтрация носителей. Наличие потенциальных барьеров между различными фазами структуры с резкими неоднородностями может проявиться в сильной зависимости длины свободного пробега носителей заряда от энергии вблизи уровня химического потенциала [32]. Тогда в наноструктуре может реализоваться селективное рассеяние носителей заряда вследствие наличия потенциальных барьеров между нанозернами (energy filtering) [32, 33]. Суть селективного рассеяния состоит в том, что носители с энергией выше энергии Ферми проходят через границу между нанозернами, практически не рассеиваясь, тем самым увеличивается термоэдс, которая определяется разностью между энергией носителя заряда и энергией Ферми.

Сепарация носителей заряда по энергиям сильно зависит от высоты потенциального барьера между нанозернами. Соответственно, электропроводность и коэффициент термоэдс также зависят от высоты потенциальных барьеров, а также от размеров нанозерен. Из [33] следует, что сепарация носителей тока по энергиям приводит к росту коэффициента термоэдс и к уменьшению электропроводности с уменьшением размеров нанозерен материала по сравнению с неструктурированным исходным кристаллом. В итоге фактор мощности $\sigma\alpha^2$ в наноструктурированном материале на основе Bi_2Te_3 существенно не изменяется. Для типичных параметров твердых растворов на основе теллурида висмута максимальное увеличение фактора мощности составляет примерно 10% при высоте потенциального барьера $1,4k_0T$ (k_0 – постоянная Больцмана).

С другой стороны, рост термоэдс с уменьшением размеров нанозерен подтверждается теоретическими расчетами в различных моделях и экспериментальными результатами. Так, при уменьшении размеров нанозерен от нескольких сотен нанометров до 50 нм термоэдс возрастает на 10%. Поскольку уменьшение электропроводности с уменьшением размеров нанозерен приведет к пропорциональному уменьшению электронной теплопроводности, сепарация носителей по энергиям даст увеличение термоэлектрической добротности на 20% даже при размерах зерен около 50 нм. Дальнейшее уменьшение размеров зерен приведет к еще большему росту добротности за счет данного механизма [13, 33].

В таблице систематизированы теоретические результаты исследования возможных механизмов увеличения термоэлектрической добротности и приведены условия реализации этих механизмов. Из таблицы видно, что для реализации всех трех механизмов увеличения добротности необходимо обеспечить малость нанозерен $L \sim 10\text{--}20$ нм. Это требование вызывает ряд технологических трудностей [13], поэтому, как отмечалось выше, необходимо обеспечить предотвращение рекристаллизации. Создание вакуумных зазоров между нанозернами, составляющих 1–2 нм для реализации механизма увеличения добротности, связанного с туннелированием носителей и отсечением транспорта фононов, трудно осуществить технологически, тем более что электронно-микроскопическое исследование не обнаружило никаких зазоров между нанозернами. Выполнение всех указанных в таблице требований к структуре нанотермоэлектриков на основе Bi_2Te_3 привело бы к увеличению безразмерной термоэлектрической добротности ZT до 3,0–3,5 при комнатных температурах. Если же создать структуру с нанозернами 10–20 нм, но без вакуумных зазоров 1–2 нм, можно добиться увеличения эффективности ZT до значений 1,3–1,5.

Механизм увеличения добротности	Условия реализации	Возможная величина увеличения эффективности
Дополнительное рассеяние фононов	$L < 10\text{--}20$ нм	Рост ZT на 15–25%
Туннелирование носителей	1. $L < 10\text{--}20$ нм 2. Вакуумные зазоры между нанозернами 1–2 нм	Рост ZT в 3,0–3,5 раза
Сепарация носителей по энергиям	1. $L < 10\text{--}20$ нм 2. Уменьшение σ и κ_{ph} компенсируют друг друга	Рост фактора мощности $\sigma\alpha^2$ на 10%

Таблица. Механизмы увеличения термоэлектрической добротности

Отметим, что при размерах наноструктурных элементов менее 1 нм вопрос о применимости обычных теоретических методов вычисления кинетических коэффициентов в полупроводниках не является бесспорным. Действительно, в таких условиях характерные длины, свойственные полупроводнику, а также длины нелинейности и нелокальности температуры и ее градиента становятся сопоставимыми с размерами неоднородностей [34–36]. В таких условиях применимость кинетического уравнения Больцмана и правомочность использования самого понятия температуры должны обосновываться в каждом конкретном случае.

Заключение

Можно констатировать, что достигнуты существенные успехи в увеличении термоэлектрической добротности в наноструктурах. Изготовление объемных наноструктурированных термоэлектриков на основе твердых растворов $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{--Sb}_2\text{Te}_3$ путем механоактивационной обработки исходных кристаллических материалов с последующим горячим прессованием или искровым плазменным спеканием представляет собой достаточно дешевый способ получения материалов с улучшенной термоэлектрической добротностью. Экспериментальные и теоретические результаты, в первую очередь полученные авторами, подтверждают, что в наноструктурированных объемных термоэлектриках добротность действительно возрастает по сравнению с добротностью исходных кристаллических материалов. Экспериментальное подтверждение роста термоэлектрической добротности и наглядные физические механизмы ее увеличения также свидетельствуют в пользу перспективности использования наноструктур.

Увеличение термоэлектрической добротности означает расширение областей рационального применения термоэлектрической генерации энергии и термоэлектрического охлаждения, что в конечном итоге приведет к уменьшению техногенной нагрузки на окружающую среду.

Литература

1. Thermoelectric Handbook: Macro to Nano / Ed. D.M. Row. CRC Press, 2006. 1014 p.
2. Булат Л.П. Термоэлектрическое преобразование: состояние и перспективы // Автономная энергетика. 2009. № 26. С. 54–57.

3. Vorobiev Yu., Gonzalez-Hernandez J., Vorobiev P., Bulat L. Thermal-photovoltaic solar hybrid system for efficient solar energy conversion // *Solar Energy*. 2006. V. 80. N 2. P. 170–176.
4. Vorobiev Y.V., Gonzalez-Hernandez J., Gorley P., Horley P., Bulat L. A new approach to hybrid systems of renewable energy utilization / *Leading Edge Research in Solar Energy*. NY: Nova Science Publishers, 2008. P. 147–164.
5. Chavez-Urbiola E.A., Vorobiev Y., Bulat L.P. Solar hybrid systems with thermoelectric generators // *Solar Energy*. 2012. V. 86. N 1. P. 369–378.
6. Булат Л.П., Ведерников М.В., Вялов А.П. и др. Термоэлектрическое охлаждение / Под ред. Л.П. Булата. СПб: СПбГУНиПТ, 2002. 147 с.
7. Sergienko O.I., Bulat L.P., Kopyltsova S.E., Shestopalova A.I., Guzhva M.E., Vinogradov A.S. Environmental aspects of thermoelectric cooling // *Journal of Thermoelectricity*. 2010. N 4. P. 5–10.
8. Bulat L., Nefedova I., Ahiska R. Thermoelectricity based on novel materials: effective and environmentally safety method of direct energy conversion / *Proc. 10th International Conference on Sustainable Energy Technologies*. Istanbul, 2011. P. 1–5.
9. Dresselhaus M.S., Chen G., Tang M.Y., Yang R., Lee H., Wang D., Ren Z., Fleurial J.-P., Gogna P. New directions for low-dimensional thermoelectric materials // *Advanced Materials*. 2007. V. 19. N 8. P. 1043–1053.
10. Minnich A.J., Dresselhaus M.S., Ren Z.F., Chen G. Bulk nanostructured thermoelectric materials: current research and future prospects // *Energy and Environmental Science*. 2009. V. 2. N 5. P. 466–479.
11. Lan Y., Minnich A.J., Chen G., Ren Z. Enhancement of thermoelectric figure-of-merit by a bulk nanostructuring approach // *Advanced Functional Materials*. 2010. V. 20. N 3. P. 357–376.
12. Дмитриев А.В., Звягин И.П. Современные тенденции развития физики термоэлектрических материалов // *Успехи физических наук*. 2010. Т. 180. № 8. С. 821–838.
13. Bulat L., Pshenai-Severin D., Karatayev V., Osvenskii V., Parkhomenko Y., Lavrentev M., Sorokin A., Blank V., Pivovarov G., Bublik V., Tabachkova N. Bulk nanocrystalline thermoelectrics based on Bi-Sb-Te solid solution. In: Hashim A.A. (ed.) *The Delivery of Nanoparticles*. InTech, 2012. P. 454–486.
14. Bulat L.P., Osvensky V.B., Pivovarov G.I., Snarskii A.A., Tatyainin E.V., Tay A.A.O. On the effective kinetic coefficients of thermoelectric nanocomposites // *Proc. 6th European Conference on Thermoelectrics*. Paris, 2008. P. I2-1–I2-6.
15. Bulat L.P., Drabkin I.A., Pivovarov G.I., Osvensky V.B. On thermoelectric properties of materials with nanocrystalline structure // *Journal of Thermoelectricity*. 2008. N 4. P. 26–31.
16. Bulat L.P., Bublik V.T., Drabkin I.A., Karatayev V.V., Osvensky V.B., Pivovarov G.I., Pshenai-Severin D.A., Tatyainin E.V., Tabachkova N.Yu. Bulk nanostructured thermoelectrics based on bismuth telluride // *Journal of Thermoelectricity*. 2009. N 3. P. 67–72.
17. Bulat L.P., Bublik V.T., Drabkin I.A., Karataev V.V., Osvenskii V.B., Parkhomenko Yu.N., Pivovarov G.I., Pshenai-Severin D.A., Tabachkova N.Yu. Bulk nanostructured polycrystalline p-Bi-Sb-Te thermoelectrics obtained by mechanical activation method with hot pressing // *Journal of Electronic Materials*. 2010. V. 39. N 9. P. 1650–1653.
18. Bulat L.P., Drabkin I.A., Karatayev V.V., Osvenskii V.B., Parkhomenko Yu.N., Lavrentev M.G., Sorokin A.I., Pshenai-Severin D.A., Blank V.D., Pivovarov G.I., Bublik V.T., Tabachkova N.Yu. Structure and transport properties of bulk nanothermoelectrics based on $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Te}_3$ fabricated by SPS method // *Journal of Electronic Materials*. 2013. V. 42. N 7. P. 2110–2113.
19. Драбкин И.А., Освенский В.Б., Сорокин А.И., Булат Л.П., Пивоваров Г.И. Анизотропия термоэлектрических свойств объемного наноструктурированного материала на основе $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$, полученного методом искрового плазменного спекания (SPS) / *Труды межгосударственного семинара «Термоэлектрики и их применения»*. Санкт-Петербург, 2013. С. 29–34.
20. Бублик В.Т., Драбкин И.А., Каратаев В.В., Лаврентьев М.Г., Освенский В.Б., Булат Л.П., Пивоваров Г.И., Сорокин А.И., Табачкова Н.Ю. Объемный наноструктурированный термоэлектрический материал на основе $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$, полученный методом искрового плазменного спекания (SPS) / *Труды межгосударственного семинара «Термоэлектрики и их применения»*. Санкт-Петербург, 2013. С. 23–28.
21. Bulat L.P., Pshenai-Severin D.A., Drabkin I.A., Karataev V.V., Osvenskii V.B., Parkhomenko Yu.N., Blank V.D., Pivovarov G.I., Bublik V.T., Tabachkova N.Yu. Mechanisms of improvement of thermoelectric efficiency in bulk nanostructured polycrystals // *Journal of Thermoelectricity*. 2011. N 1. P. 13–18.
22. Абрютин В.Н., Драбкин И.А., Марончук И.И., Освенский В.Б. Измерение термоэлектрических образцов методом Хармана / *Труды межгосударственного семинара «Термоэлектрики и их применения»*. Санкт-Петербург, 2004. С. 303–306.
23. Ahiska R., Dislitas S. Computer controlled test system for measuring the parameters of the real thermoelectric module // *Energy Conversion and Management*. 2011. V. 52. N 1. P. 27–36.

24. Булат Л.П., Ахыска Р. Новый метод и прибор TEPAS для измерения параметров реальной термобатареи / Труды XII межгосударственного семинара «Термоэлектрики и их применения». Санкт-Петербург, 2010. С. 373–378.
25. Drabkin I.A., Osvenskii V.B., Parkhomenko Yu.N., Sorokin A.I., Pivovarov G.I., Bulat L.P. Anisotropy of thermoelectric properties of p-type nanostructured material based on $(\text{Bi}, \text{Sb})_2\text{Te}_3$ // Journal of Thermoelectricity. 2013. N 3. P. 35–46.
26. Булат Л.П., Пшенай-Северин Д.А. Влияние туннелирования на термоэлектрическую эффективность объемных наноструктурированных материалов // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. № 3. С. 452–458.
27. Bulat L.P., Kossakovski D., Pshenai-Severin D.A. The influence of phonon thermal conductivity on thermoelectric figure of merit of bulk nanostructured materials with tunneling contacts // Journal of Thermoelectricity. 2013. N 2. P. 30–41.
28. Булат Л.П., Драбкин И.А., Каратаев В.В., Освенский В.Б., Пшенай-Северин Д.А. Влияние рассеяния на границах на теплопроводность наноструктурированного полупроводникового материала на основе твердого раствора $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Te}_3$ // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. № 9. С. 1712–1716.
29. Bulat L.P., Osvenskii V.B., Parkhomenko Y.N., Pshenay-Severin D.A. Influence of nano-inclusions on scattering of holes and phonons and transport coefficients in $\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x}\text{Te}_3$ bulk nanostructures // Journal of Solid State Chemistry. 2012. V. 193. P. 122–126.
30. Булат Л.П., Освенский В.Б., Пархоменко Ю.Н., Пшенай-Северин Д.А. Исследование возможностей увеличения термоэлектрической эффективности в наноструктурированных материалах на основе $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ // Физика твердого тела. 2012. Т. 54. № 11. С. 2036–2042.
31. Булат Л.П., Освенский В.Б., Пшенай-Северин Д.А. Влияние распределения зерен по размерам на решеточную теплопроводность наноструктурированных материалов на основе $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. № 12. С. 2323–2330.
32. Handbook of Thermoelectrics / Ed. D.M. Rowe. CRC-Press, 1995. 720 p.
33. Булат Л.П., Драбкин И.А., Каратаев В.В., Освенский В.Б., Пархоменко Ю.Н., Пшенай-Северин Д.А., Пивоваров Г.И., Табачкова Н.Ю. Энергетическая фильтрация носителей тока в наноструктурированном материале на основе теллурида висмута // Физика твердого тела. 2011. Т. 53. № 1. С. 29–34.
34. Анатычук Л.И., Булат Л.П. Полупроводники в экстремальных температурных условиях. СПб: Наука, 2001. 224 с.
35. Булат Л.П., Нефедова И.А. О нелинейных термоэлектрических явлениях // Вестник Международной академии холода. 2012. № 4. С. 54–56.
36. Bulat L.P., Nefedova I.A. Nonlocal transport phenomena in semiconductors // Journal of Thermoelectricity. 2013. N 2. P. 5–11.

Булат Лев Петрович	—	доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, bulat@irbt-itmo.ru
Бочков Леонид Викторович	—	ведущий электроник, ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия; аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, boch245@rambler.ru
Нефедова Ирина Александровна	—	аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, nefedosita@rambler.ru
Ахыска Рашиит	—	PhD, профессор, Университет Гази, Анкара, Турция, rahiska@rambler.ru
Lev P. Bulat	—	D.Sc., Professor, Department Head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, bulat@irbt-itmo.ru
Leonid V. Bochkov	—	leading electronic, Ioffe Physical Technical Institute; postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, boch245@rambler.ru
Irina A. Nefedova	—	postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, nefedosita@rambler.ru
Rashit Ahiska	—	PhD, Professor, Gazi University, Ankara, Turkey, rahiska@rambler.ru

Принято к печати 31.03.14
Accepted 31.03.14

УДК 535.37

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ИОНОВ ХРОМА В НАНОСТЕКЛОКЕРАМИКАХ НА ОСНОВЕ ФОРСТЕРИТА

В.А. Асеев^а, С.Н. Жуков^а, Н.В. Кулешов^б, С.В. Курильчик^б, А.В. Мудрый^с,
Н.В. Никоноров^а, А.С. Рохмин^а, А.С. Ясюкевич^б

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Aseev@oi.ifmo.ru

^б НИЦ оптических материалов и технологий БНТУ, Минск, Беларусь

^с ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь

Аннотация. Представлены сравнительные результаты исследования спектрально-люминесцентных свойств стекол и форстеритовой наностеклокерамики системы $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-K}_2\text{O-TiO}_2$, легированных ионами хрома. Образцы исходных стекол получены методом высокотемпературного синтеза. Стеклокерамики получались путем двухступенчатой вторичной термообработки исходных стекол. На первом этапе термообработки при 700 °С формировались центры нуклеации, на втором – происходил рост кристаллической фазы состава $\text{Mg}_2\text{SiO}_4\text{:Cr}$. Состав кристаллической фазы и размер кристаллов определялись на рентгеновском дифрактометре. Показано, что в процессе термообработки выделяется кристаллическая фаза, которая представляет собой соединение состава Mg_2SiO_4 (форстерит). По спектрам люминесценции и поглощения определены валентные состояния и положение иона хрома в форстерите или стеклообразной матрице. Проведена идентификация полос поглощения и люминесценции в исходных и термообработанных образцах. Исследована зависимость спектрально-люминесцентных свойств хрома от режимов термообработки. Определено, что при термообработке ионы трех- и четырехвалентного хрома входят в форстеритовую кристаллическую фазу, а часть из них остается в стеклообразной фазе. Результаты представленного исследования могут быть использованы при разработке и создании стекол и наноразмерной стеклокерамики для волоконных перестраиваемых лазеров и широкополосных оптических усилителей ближнего инфракрасного диапазона, используемых в информационно-телекоммуникационных технологиях.

Ключевые слова: спектрально-люминесцентные свойства хрома, форстеритовая наностеклокерамика, активированные ионами хрома алюмосиликатные стекла.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

SPECTRAL AND LUMINESCENT PROPERTIES OF CHROMIUM IONS IN FORSTERITE-LIKE NANO-GLASS CERAMICS

V.A. Aseev^а, S.N. Zhukov^а, N.V. Kuleshov^б, S.V. Kurilchik^б, A.V. Mudryi^с, N.V. Nikonorov^а,
A.S. Rokhmin^а, A.S. Yasyukevich^б

^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Aseev@oi.ifmo.ru

^б Scientific Research Centre for Optical Materials and Technologies, Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus

^с SSPA Scientific and Practical Material Research Center of NAS of Belarus, Minsk, Belarus

Abstract. Comparative analysis of spectral and luminescent properties for glasses $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-K}_2\text{O-TiO}_2$ doped with chromium ions and forsterite nano-glass ceramic have been done. Initial glasses were obtained by using a conventional melt quenching method. Glass ceramics were produced by the two-stage secondary heat treatment of initial glasses. At the first step of the heat treatment nucleation centers were formed at 700° C. At the second step there was an increase of $\text{Mg}_2\text{SiO}_4\text{:Cr}$ crystalline phase. Crystalline phase composition and the crystals size were determined by X-ray diffractometer. It is shown that the crystalline phase of Mg_2SiO_4 (forsterite) is precipitated during the heat treatment. Valency state and the chromium ion position in a forsterite or a glassy matrix are determined according to luminescence and absorption spectra. Identification of absorption and luminescence bands in initial and heat-treated samples is carried out. The dependence between spectral and luminescent properties of chromium and heat treatment modes is examined. The results demonstrate that ions of the trivalent and tetravalent chromium are transforming to the forsterite crystalline phase during the heat treatment, and a part of them remains in the glassy phase. Presented research results can be used for the development of glasses and nanoscale glassceramic for fiber tunable lasers and broadband optical amplifiers of a near infrared range which are used in information and telecommunication technologies.

Keywords: chromium ions spectral and luminescent properties, forsterite nano-glassceramic doped with chromium ions, alumino-silicate glasses.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation, Grant 074-U01.

Введение

Лазеры на основе четырехвалентного хрома находят широкое применение в различных областях науки и техники. К достоинствам данного иона-активатора относится широкая полоса люминесценции (1–1,3 мкм) и высокие ($2 \times 10^{-19} \text{ см}^2$) сечения вынужденного излучения в ближней инфракрасной области спектра по сравнению с редкоземельными ионами – например, эрбием и иттербием с полосой люминесценции 20–40 нм и сечениями $0,07 \times 10^{-19} \text{ см}^2$ для эрбия [1] и $0,3 \times 10^{-19} \text{ см}^2$ для иттербия [2] соответственно. Однако к особенностям хрома относится то, что он может находиться в нескольких валентных и координационных состояниях в одной кристаллической матрице, что сильно влияет на спектрально-люминесцентные свойства, и поэтому выбор матрицы для ионов является актуальной задачей. Активной

средой в лазерах на четырехвалентном хrome чаще всего являются монокристаллы ИАГ:Сг [3] и $Mg_2SiO_4:Cr$ [4–6], поскольку данные среды демонстрируют наилучшие показатели по эффективности генерации. По сравнению с монокристаллами в стеклах с Cr^{4+} люминесценция и лазерная генерация соответственно практически отсутствуют. Это связано с сильными безызлучательными потерями в стеклах. По сравнению с традиционными, волоконные лазеры обладают рядом достоинств, например, компактными размерами и простотой эксплуатации. Разработка активных сред для таких лазеров – актуальная задача.

Одним из перспективных материалов является стеклокерамика, т.е. материал, где в объеме стекла распределены кристаллы. Данный материал объединяет в себе достоинства кристаллов (относительно высокий квантовый выход) и стекол (технологии вытяжки волокна). Существует ограниченное число работ, которые посвящены разработке и созданию стеклокерамик, активированных хромом [7–10]. Следует отметить, что вопросы, связанные с исследованием влияния режимов термообработки на спектрально-люминесцентные свойства стеклокерамики, пока еще недостаточно изучены. Исходя из этого, в настоящей работе проведены сравнительные спектрально-люминесцентные исследования свойств ионов хрома в стекле и форстеритовой стеклокерамике.

Эксперимент

Методом высокотемпературного синтеза были получены образцы алюмосиликатных стекол (таблица). Исходное стекло было синтезировано при температуре 1610 °С в платиновых тиглях и отожжено при температуре 590 °С. Дополнительно в стекло вводился оксид титана TiO_2 , который является нуклеатором, т.е. способствует образованию центров кристаллизации. При этом в исходном стекле происходит разделение на две фазы – в одной емкости имеется два стекловых расплава, не смешивающихся между собой, т.е. не растворяющихся один в другом [11]. При охлаждении такой системы получатся застывшие капли одной жидкости внутри другой – сферолиты. Если при последующей термообработке одна из подвергнутых расслоению фаз имеет большую склонность к кристаллизации, а другая – к стеклообразованию, то легко получится стеклокристаллический материал. Таким образом, при вторичной термообработке стекла были получены стеклокерамики. Различное время термообработки позволяет получать кристаллы с различными размерами и объемной долей кристаллической фазы.

Образцы	Режим термической обработки	Вес.% компонентов стекла	Вес.% Cr_2O_3
У0	Исходное стекло	SiO_2 – 43,4 Al_2O_3 – 17,8 MgO – 17,5 K_2O – 16,5 TiO_2 – 4,8	0,85
У1	Стеклокерамика 700 °С (8 ч), 800 °С (2 ч)		
У2	Стеклокерамика 700 °С (8 ч), 850 °С (2 ч)		
У3	Стеклокерамика 700 °С (8 ч), 900 °С (2 ч)		

Таблица. Состав образцов и режимы термообработки

Спектры поглощения регистрировались при помощи спектрофотометра «Cary 500» в диапазоне 400–1300 нм с шагом 0,1 нм и временем интеграции 0,1 с. Люминесценция в образцах возбуждалась второй гармоникой неодимового лазера Spectra physics millennia Xs и регистрировалась на монохроматоре (модель Acton-500, Acton Research Corporation) с приемником InGaAs (модель ID-441 фирмы «Acton Research Corporation»).

Рентгенограммы были получены с помощью многоцелевого рентгеновского дифрактометра высокого разрешения Rigaku Ultima IV (Япония). Использовалось излучение медного анода с $\lambda_{(CuK\alpha)} = 0,15418$ нм. Напряжение на трубке составляло 40 кВ, ток – 40 мА, выходная мощность – 1,6 кВт. Радиус гониометра – 285 мм. Рентгенограмма снималась в диапазоне углов 2θ от 20° до 60° в геометрии съемки по Бреггу–Брентано. Время экспозиции с шагом 0,4 °/мин составило 100 мин.

Для расчета рентгенограммы образца были определены положения дифракционных пиков и вычислена относительная интегральная интенсивность. Расчет межплоскостных расстояний производился по формуле Вульфа–Брэгга. Размер частиц определялся по формуле Шеррера на основе положения и интенсивности на полуширине (FWHM) дифракционных максимумов.

Результаты и обсуждения

Дифрактограммы исходного (У0) и термообработанного стекла (У3) представлены на графике (рис. 1). В график добавлена дифрактограмма форстерита из ICDD PDF2008, номер карточки 00-001-1290.

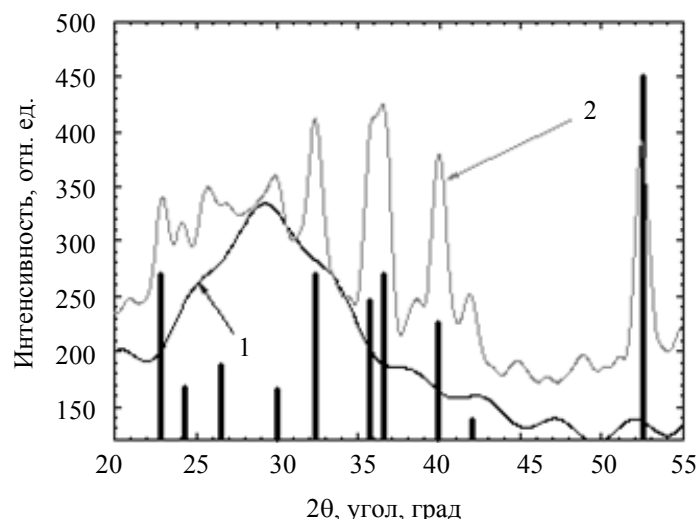


Рис. 1. Диффрактограммы исходного образца У0 (кривая 1) и образца после термообработки У3 (кривая 2). Сплошные вертикальные линии – диффрактограмма форстерита из ICDD PDF2008

В диффрактограмме исходного образца наблюдается только широкая полоса, связанная с взаимодействием рентгеновского излучения со структурой стекла, после термообработки появляются пики, которые соответствуют кристаллической фазе – форстериту Mg_2SiO_4 . Размер нанокристаллов для термообработки при $850\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 2 ч составил 15 нм, а при $900\text{ }^\circ\text{C}$ – около 20 нм.

На рис. 2, а, представлены спектры поглощения образцов стеклокерамики и исходного стекла.

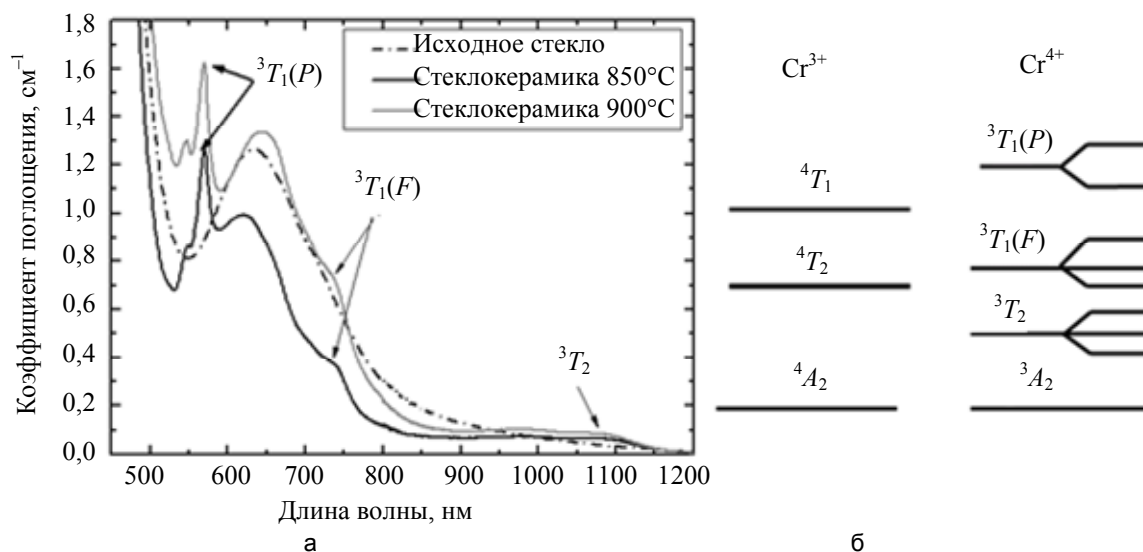


Рис. 2. Спектры поглощения ионов Cr^{3+} и Cr^{4+} в стекле и стеклокерамике (а) и диаграмма энергетических уровней ионов Cr^{3+} и Cr^{4+} (б)

Из графиков (рис. 2, а) видно, что вторичная термообработка приводит к появлению дополнительных полос поглощения, и они являются характерными для определенной валентной формы иона хрома. В отличие от стекла, в стеклокерамике могут присутствовать как ион Cr^{3+} , так и Cr^{4+} , которые могут располагаться и в стекле, и в нанокристаллической фазе.

Термообработка образцов приводит к появлению в их спектрах поглощения линий, характерных для кристаллов форстерита с четырехвалентным хромом. Отчетливо идентифицируются полосы поглощения в видимой области спектра с максимумами 570 нм, 660 нм и 740 нм, которые относятся к разрешенным электродипольным переходам ${}^3A_2 \rightarrow {}^3T_{1a}$, а слабые полосы поглощения в области 1 мкм – к запрещенным по симметрии переходам ${}^3A_2 \rightarrow {}^3T_2$, характерным для Cr^{4+} в кристалле форстерита [12–14].

Широкие полосы поглощения, присущие Cr^{3+} -форстериту в областях 480 нм и 670 нм (${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_1, {}^2T_2, {}^4A_2 \rightarrow {}^2T_1, {}^4T_2, {}^2E$), в спектрах поглощения перекрываются с полосами поглощения стеклянной матрицы (не более 500 нм), ионов Cr^{3+} в стекле и Cr^{4+} -форстерита.

Рассмотрим спектры люминесценции стекол и наностеклокерамик (рис. 3) и сравним их с аналогичными спектрами кристалла форстерита, активированного хромом.

В спектре люминесценции исходного образца проявляется одна полоса с максимумом в области 970 нм при возбуждении излучением лазерного диода на 532 нм. Это характерно для люминесценции ионов Cr^{3+} в стекле [8, 14]. Появление в образцах, прошедших термообработку, ионов Cr^{4+} в окружении форстеритовой кристаллической матрицы подтверждается и спектрами люминесценции, которые были получены при возбуждении исследуемых образцов излучением лазерных диодов с длиной волны 532 нм. В этих спектрах люминесценции присутствует полоса с максимумом 1150 нм, что характерно для Cr^{4+} -форстерита [13, 14]. Одновременно с этим проявляется и широкая полоса с максимумом 970 нм (при возбуждении на длине волны 532 нм), наличие которой указывает на присутствие ионов Cr^{3+} в стеклянной матрице [14, 15] и в кристаллической фазе форстерита [13].

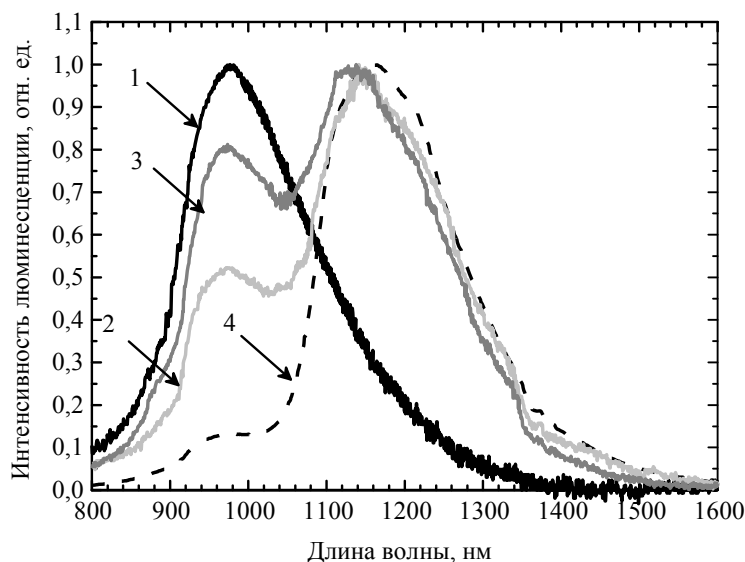


Рис. 3. Спектры люминесценции образцов стекол (кривая 1) и стеклокерамик: Y2 (кривая 2) и Y3 (кривая 3) соответственно) в сравнении со спектрами монокристалла $\text{Mg}_2\text{SiO}_4:\text{Cr}$ (кривая 4). Длина волны возбуждения 532 нм

Заключение

Проведены сравнительные исследования спектрально-люминесцентных свойств форстеритовой наностеклокерамики и стекла, активированных ионами хрома. Показано, что в процессе термообработки выделяется кристаллическая фаза, которая представляет собой соединение состава Mg_2SiO_4 (форстерит), куда входят ионы хрома. Исследования спектров поглощения и люминесценции позволили сделать вывод о том, что при термообработке трех- и четырехвалентные ионы хрома входят в форстеритовую кристаллическую фазу. Следует также отметить, что при термообработке не все ионы хрома переходят в кристаллическую фазу, часть из них остается в стеклообразной фазе, но увеличение длительности термообработки приводит к росту количества ионов хрома, вошедших в кристаллическую фазу. Результаты, полученные при выполнении данных исследований, могут быть использованы при разработке и создании стекла и наноразмерной стеклокерамики для волоконных перестраиваемых лазеров и широкополосных оптических усилителей ближнего инфракрасного диапазона, используемых в информационно-телекоммуникационных технологиях.

Литература

1. Асеев В.А., Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К., Фёдоров Ю.К., Уляшенко А.М. Спектрально-люминесцентные свойства высококонцентрированных иттербий-эрбиевых фосфатных стекол для микролазеров // Оптический журнал. 2006. Т. 73. № 3. С. 20–25.
2. Jaque D., Lagomacini J., Jacinto C., Catunda T. Continuous-wave diode-pumped Yb: glass laser with near 90% slope efficiency // Applied Physics Letters. 2006. V. 89. N 12. Art. N 121101.
3. Angert N.B., Borodin N.I., Garmash V.M., Zhitnyuk V.A., Okhrimchuk A.G., Siyuchenko O.G., Shestakov A.V. Lasing due to impurity color centers in yttrium aluminum garnet crystals at wavelengths in the range 1.35–1.45 μm // Sov. J. Quantum Electron. 1988. V. 18. P. 73–74.
4. Petricevic V., Gayen S.K., Alfano R.R., Yamagishi K., Anzai H., Yamaguchi Y. Laser action in chromium-doped forsterite // Applied Physics Letters. 1988. V. 52. N 13. P. 1040–1042.
5. Verdun H.R., Thomas L.M. et al. Chromium-doped forsterite laser pumped with 1.06 μm radiation // Applied Physics Letters. 1988. V. 53. N 26. P. 2593–2595.
6. Carrig T.J., Pollock C.R. Performance of a continuous-wave forsterite laser with krypton ion, Ti: sapphire, and Nd: YAF pump lasers // IEEE Journal of Quantum Electron. 1993. V. 29. N 11. P. 2835–2844.

7. Beall G.N. Glass-ceramics for photonic applications // Glass Science and Technology: Glastechnische Berichte. 2000. V. 73. N 1 suppl C. P. 3–11.
8. Ульяшенко А.М., Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К. Форстеритовая наностеклокерамика, активированная ионами Cr^{4+} , для волоконных лазеров и усилителей // Известия РАН. Серия физическая. 2007. Т. 71. № 2. С. 171–174.
9. Subbotin K.A., Smirnov V.A., Zharikov E.V., Iskhakova L.D., Senin V.G., Voronov V.V., Shcherbakov I.A. Nano-glass-ceramics containing chromium-doped LiGaSiO₄ crystalline phases // Optical Materials. 2010. V. 32. N 9. P. 896–902.
10. Sharonov M.Yu., Bykov A.B., Owen S., Petricevic V., Alfano R.R., Beall G.H., Borelli N. Spectroscopic study of transparent forsterite nanocrystalline glass–ceramics doped with chromium // Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics. 2004. V. 21. N 11. P. 2046–2052.
11. Stookey S.D. Ceramic body and method of making it. Patent US 2971853, 1961.
12. Jia W., Liu H., Jaffe S., Yen W.M., Denker B. Spectroscopy of Cr³⁺ and Cr⁴⁺ ions in forsterite // Physical Review B. 1991. V. 43. N 7. P. 5234–5242.
13. Petricevic V. Laser and spectroscopic properties of chromium-doped forsterite. PhD Dissertation. The City University of New-York, 1990. 137 p.
14. Koepeke C., Wishniewski K., Grinberg M., Russell D.L., Holliday K. Optical spectroscopy and excited state absorption of the ZAS (ZrO₂-Al₂O₃-SiO₂) glass doped with chromium // Journal of Luminescence. 1999. V. 81. N 4. P. 301–312.
15. Hommerich U., Eilers H., Yen W.M., Hayben J.S., Aston M.K. Near infrared emission at 1.35 μm in Cr doped glass // Journal of Luminescence. 1994. V. 60-61. P. 119–122.

<i>Асеев Владимир Анатольевич</i>	– кандидат физико-математических наук, ассистент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Aseev@oi.ifmo.ru
<i>Жуков Сергей Николаевич</i>	– аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, sergzhukov@gmail.com
<i>Кулешов Николай Васильевич</i>	– доктор физико-математических наук, профессор, профессор, НИЦ оптических материалов и технологий БНТУ, Минск, Беларусь, nkuleshov@bntu.by
<i>Курильчик Сергей Владимирович</i>	– аспирант, НИЦ оптических материалов и технологий БНТУ, Минск, Беларусь, kurilchik@bntu.by
<i>Мудрый Александр Викторович</i>	– кандидат физико-математических наук, главный научный сотрудник, ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь, a_mudryi@iftfp.bas-net.by
<i>Никоноров Николай Валентинович</i>	– доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, nikonorov@oi.ifmo.ru
<i>Рохмин Алексей Сергеевич</i>	– ассистент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Rokhmin@oi.ifmo.ru
<i>Ясюкевич Анатолий Сергеевич</i>	– кандидат физико-математических наук, доцент, доцент, НИЦ оптических материалов и технологий БНТУ, Минск, Беларусь, anatol@bntu.by
<i>Vladimir A. Aseev</i>	– PhD, assistant, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Aseev@oi.ifmo.ru
<i>Sergei N. Zhukov</i>	– postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, sergzhukov@gmail.com
<i>Nikolai V. Kuleshov</i>	– D.Sc., Professor, Scientific Research Centre for Optical Materials and Technologies, Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus, nkuleshov@bntu.by
<i>Sergei V. Kurilchik</i>	– postgraduate, Scientific Research Centre for Optical Materials and Technologies, Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus, kurilchik@bntu.by
<i>Alexander V. Mudryi</i>	– PhD, Principal researcher, SSPA Scientific and Practical Material Research Center of NAS of Belarus, Minsk, Belarus, a_mudryi@iftfp.bas-net.by
<i>Nikolai V. Nikonorov</i>	– D.Sc., Professor, Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, nikonorov@oi.ifmo.ru
<i>Alexei S. Rokhmin</i>	– assistant, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Rokhmin@oi.ifmo.ru
<i>Anatoly S. Yasyukevich</i>	– PhD, Associate professor, Associate professor, Scientific Research Centre for Optical Materials and Technologies, Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus, anatol@bntu.by

Принято к печати 12.05.14
Accepted 12.05.14

УДК 535.37

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ФТОРОФОСФАТНЫХ СТЕКОЛ, АКТИВИРОВАННЫХ ИТТЕРБИЕМ И ЭРБИЕМ

С.В. Зайцева^{a, b}, В.А. Асеев^a, Е.В. Колобкова^a, Н.В. Никоноров^a^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Aseev@oi.ifmo.ru^b Университет Заарбрюкен, Заарбрюкен, Федеративная Республика Германия, Loony92@mail.ru

Аннотация. Фторофосфатные стекла являются одними из перспективных матриц для создания иттербий-эрбиевых лазеров. Это связано с высокой технологичностью синтеза стекол и низким содержанием снижающих эффективность люминесценции ОН-групп, а также возможностью синтеза стекол с высокими концентрациями редкоземельных ионов (до 15 вес.%). Целью работы являлось комплексное исследование спектрально-люминесцентных свойств фторофосфатных стекол с различным содержанием иттербия и эрбия. Стекла серии $\text{Ba}(\text{PO}_3)_2\text{-BaF}_2\text{-CaF}_2\text{-MgF}_2\text{-AlF}_3\text{-SrF}_2\text{-YF}_3$ получены методом высокотемпературного синтеза. Концентрация фторида эрбия изменялась в пределах 1–12,5 мол.%. Измерены спектры поглощения. На основании полученных данных определены сечения поглощения и параметры Джадда–Офельта. Спектры люминесценции записывались при возбуждении титан-сапфировым лазером с длиной волны 975 нм. Методом МакКамбера были рассчитаны сечения вынужденного излучения. Для расчета радиационного времени затухания люминесценции ионов эрбия использована формула Фюхтбауэра–Ланденбурга. Интегральные сечения поглощения и вынужденного излучения составили $\sigma_{abs} = 1,37 \times 10^{-18} \text{ см}^{-2}$ и $\sigma_{em} = 1,39 \times 10^{-18} \text{ см}^{-2}$. Это превышает значения, получаемые в обычных фосфатных стеклах. Максимальное значение квантового выхода люминесценции составило 85% для образца с концентрацией эрбия $N_{Er} = 1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$. При увеличении концентрации эрбия от $1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ до $12,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ квантовый выход снижется на 7%, что обусловлено малым содержанием гидроксильных групп во фторофосфатных стеклах. Исследованные стекла являются перспективным материалом для создания лазеров и усилителей, работающих на длине волны 1,5 мкм.

Ключевые слова: фторофосфатное стекло, лазерные стекла, спектрально-люминесцентные свойства эрбия, иттербий-эрбиевые стекла.

SPECTRAL AND LUMINESCENT PROPERTIES OF FLUOROPHOSPHATE GLASSES DOPED WITH YTTERBIUM AND ERBIUM

S.V. Zaytseva^{a, b}, V. A. Aseev^a, E.V. Kolobkova^a, N.V. Nikonorov^a^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Aseev@oi.ifmo.ru^b Saarland University, Saarbrücken, Germany

Abstract. Fluorophosphate glasses are among the most promising media for ytterbium erbium lasers. The following advantages of this glasses are low OH-content, simple glass synthesis process and the possibility for a relatively high dope concentration of rare-earth ions (up to 15 wt %). The paper deals with complex investigation of the spectral and luminescent properties of fluorophosphate glasses doped with different concentration of ytterbium and erbium ions. Glass compositions based on $\text{Ba}(\text{PO}_3)_2\text{-BaF}_2\text{-CaF}_2\text{-MgF}_2\text{-AlF}_3\text{-SrF}_2\text{-YF}_3$ with different erbium fluoride concentration (from 1 to 12.5 mol%) were synthesized by conventional high temperature method. Absorption cross-sections and Judd-Ofelt parameters were determined based on the measured absorption spectra data. Erbium ions luminescence was excited by titanium-sapphire laser at 975 nm. Stimulated emission cross section was calculated by McCumber method. Fuchtbauer-Landenburg formula is used to calculate erbium ions radiation lifetime. Calculated integral values of the absorption cross section are greater than of conventional phosphate glasses and reach $\sigma_{abs} = 1,37 \times 10^{-18} \text{ cm}^{-2}$ and $\sigma_{em} = 1,39 \times 10^{-18} \text{ cm}^{-2}$. The maximum value of quantum yield was equal to 85% and was obtained for sample with the erbium concentration of $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Increasing of erbium ion concentration from 1 to $12,9 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ results in reducing of quantum yield by 7%, due to the low content of hydroxyl groups in fluorophosphate glasses. These glasses are a promising material for lasers and amplifiers design operating at 1.5 μm wavelength.

Keywords: fluorophosphate glass, laser glasses, spectral and luminescent properties of erbium, ytterbium-erbium glasses.

Введение

Стекла, активированные ионами эрбия и иттербия, являются перспективными материалами для создания оптических усилителей, волокон и твердотельных лазеров, а также для использования в телекоммуникационных системах, медицине и в военной сфере. Это обусловлено тем, что длина волны генерации иона эрбия – 1,5 мкм – оптимальна для передачи информации по волоконно-оптическим линиям связи, а также лежит в диапазоне длин волн, безопасном для глаз. Ион иттербия является сенситизатором для иона эрбия и вводится в матрицу стекла для повышения эффективности накачки, так как имеет интенсивную полосу поглощения в области 1 мкм. На спектрально-люминесцентные свойства иона эрбия в значительной мере влияет состав стекла. Так, в силикатных стеклах ширина линии люминесценции на полувысоте составляет порядка 40 нм, а в теллуридных стеклах достигает 100 нм [1, 2]. Таким образом, исследования, направленные на поиск новых материалов для матрицы стекла, активированного эрбием, являются актуальными [3–6]. К достоинствам фторофосфатных стекол можно отнести относительную простоту синтеза, большую способность растворять в себе редкоземельные ионы, а также более низкофонный колебательный спектр, чем у традиционных фосфатных стекол. На основе фторосодержащих систем возможно создание стекол, обладающих особыми термооптическими

характеристиками, пониженным показателем преломления и высокими значениями коэффициента дисперсии, широким диапазоном спектральной прозрачности и люминесцентными характеристиками [7]. Исходя из этого, при наличии уникальных оптических параметров и высокой технологичности фторофосфатных систем наибольший интерес представляет получение на их основе материалов для матрицы стекла, активированной эрбием.

Объект исследования и методика эксперимента

В работе исследованы фторофосфатные стекла в системе $m\text{Ba}(\text{PO}_3)_2-10\text{BaF}_2-18,5\text{CaF}_2-10\text{MgF}_2-30\text{AlF}_3-18,5\text{SrF}_2-\text{YF}_3-n\text{ErF}_3-\text{YbF}_3$ (мол.%), где $m = 4,25; 5$, $n = 1; 2; 3; 8; 12,5$. С целью сохранения максимальной концентрации фторидов в стекле шихту помещают в закрытый стеклоглеродный тигель и устанавливают в предварительно разогретую электрическую печь на 20 мин при постоянной температуре 950 °С. Синтез стекол проводится в электрической лабораторной печи с нагревом рабочей зоны до 1450 °С. Расплав стекломассы отливается на охлажденную стеклоглеродную пластину. После того, как стекла перешли в твердое состояние, их помещают в муфельную печь отжига.

Для всех стекол измерялся показатель преломления (n_d). Полученные данные представлены в табл. 1.

Номер образца	ErF ₃ , вес.%	YbF ₃ , вес.%	n_D	$N_{\text{Er}} \times 10^{20}$, см ⁻³	$N_{\text{Yb}} \times 10^{20}$, см ⁻³
1	1	10	1,516	1	10
2	2	0	1,514	2	0
3	3		1,513	3,1	
4	8		1,512	8,2	
5	12,5		1,51	12,9	

Таблица 1. Составы образцов

В исследуемой системе получают гомогенные стекла, обладающие высокой прозрачностью в видимой и инфракрасной (ИК) областях спектра (рис. 1). Активированные фторофосфатные стекла обладают хорошими оптическими параметрами [7]. Область прозрачности матрицы находится в пределах 300–3520 нм.

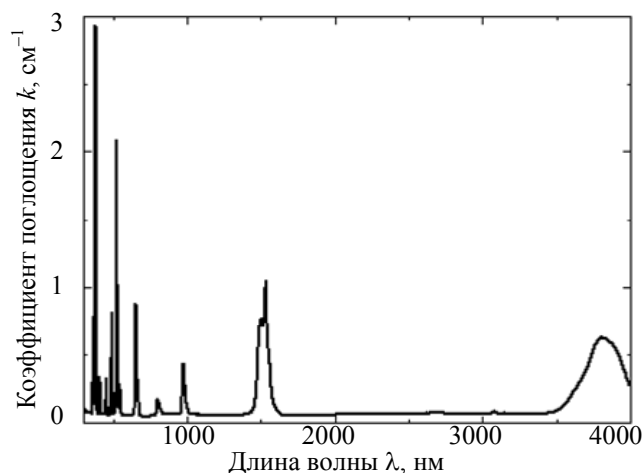


Рис. 1. Спектр поглощения видимой и ИК областей спектра (образец 5)

В работе определены:

- сечения поглощения из основного состояния;
- параметры Джадда–Офельта [8];
- сечения вынужденного излучения
- время затухания люминесценции ионов эрбия для перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ (1535 нм);
- квантовый выход люминесценции (q) ионов Er³⁺.

Спектры поглощения стекол измерены с помощью спектрофотометра (Cary 500 фирмы Varian) в спектральном диапазоне 300–1700 нм с разрешением 1 нм (оптическая плотность $D = 0-10$; время интеграции 0,5 с).

ИК спектры поглощения измерялись с помощью ИК Фурье-спектрометра Perkin-Elmer Spectrum 100 в спектральном диапазоне 1700–4000 нм с разрешением 1 нм. Все измерения проводились при комнатной температуре.

В случае лазерных материалов актуально поглощение света локальными оптическими центрами, типичными примерами которых являются редкоземельные ионы. Сечение поглощения было определено по формуле

$$\sigma(\nu) = \frac{k(\nu)}{N},$$

где $k(\nu)$ – коэффициент поглощения; N – число локальных оптических центров эрбия [см^{-3}].

Анализ Джадда–Офельта проведен следующим образом: для полосы поглощения, соответствующей электрическому дипольному переходу эрбия ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$, рассчитывалось интегральное сечение поглощения, вычислялась сила линии и составлялась система из i уравнений с тремя неизвестными параметрами Джадда Ω_t ($t = 2, 4, 6$).

Спектры люминесценции возбуждались излучением $\lambda_{\text{pump}} = 975$ нм непрерывного титан-сапфирового лазера (модель 3900 фирмы Spectra Physics). Спектры люминесценции были записаны с использованием монохроматора (модель Acton-300 фирмы Acton Research Corporation) и приемника (модель ID-441 фирмы Acton Research Corporation) для ИК области, а для видимой области использовалось ФЭУ R928 фирмы Hamamatsu. Сигналы от приемника усиливались и обрабатывались при помощи цифрового синхронного усилителя (модель SR850 фирмы Stanford Research Systems). Сечения вынужденного излучения рассчитывались по методу МакКамбера из спектров поглощения [9].

Во всех исследованных образцах кинетика затухания люминесценции измерялась с использованием излучения импульсного лазера LQ 129 фирмы Solar Laser system ($\lambda_{\text{pump}} = 975$ нм), возбуждающего люминесценцию, которая регистрируется приемником ID-441 фирмы Acton Research Corporation. На цифровом запоминающем осциллографе модели Infinium HP54830 фирмы Agilent Technologies наблюдается кривая распада люминесценции. Время жизни определялось через отношение площади под кривой затухания к ее амплитуде.

Для расчета радиационного времени затухания люминесценции ионов эрбия используется формула Фюхтбауэра–Ланденбурга:

$$\tau_{\text{рад}}^{-1} = 8 \times \pi \times c \times n^2 \times \tilde{\nu}^2 \times \frac{8}{7} \times \int \sigma_{\text{abs}}(\nu) d\nu,$$

где c – скорость света; n – показатель преломления стекла, $\tilde{\nu}$ – средняя частота полосы, $\int \sigma_{\text{abs}}(\nu) d\nu$ – интегральное сечение поглощения основного резонансного перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$.

Квантовый выход люминесценции был определен косвенным способом по формуле

$$q = \left(\frac{\tau_{\text{эксп}}}{\tau_{\text{рад}}} \right) \times 100\%,$$

где $\tau_{\text{эксп}}$ – экспериментально определенное время жизни люминесценции перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$, $\tau_{\text{рад}}$ – радиационное время жизни люминесценции перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$.

Результаты и обсуждение

Спектр поглощения эрбия представлен несколькими полосами относительно слабой интенсивности с максимумами около 408, 450 и 800 нм в видимой и ближней ИК областях спектра (рис. 2).

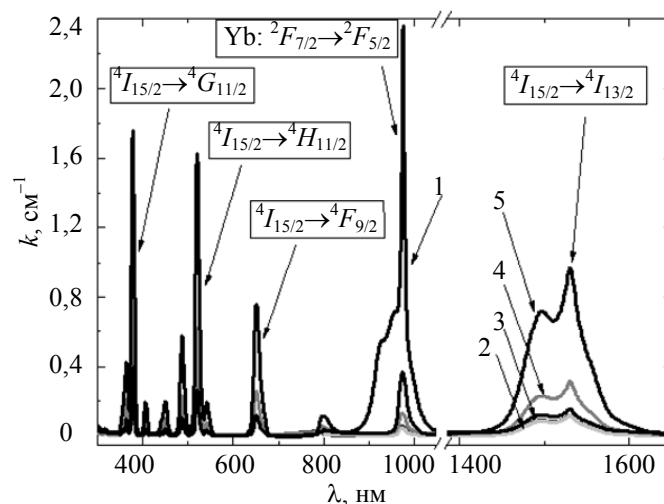


Рис. 2. Спектр поглощения образцов фторофосфатных стекол: 1 – $N_{\text{Er}} = 1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{\text{Yb}} = 10 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 2 – $N_{\text{Er}} = 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 3 – $N_{\text{Er}} = 3,1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 4 – $N_{\text{Er}} = 8,2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 5 – $N_{\text{Er}} = 12,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$

К самым интенсивным полосам поглощения относятся полосы с максимумами при 522 нм (соответствует переходу ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$) и 378 нм (соответствует переходу ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4G_{11/2}$). Значения интенсивностей остальных полос меньше примерно на порядок. С учетом их относительной узости обеспечить инверсную населенность уровня ${}^4I_{13/2}$ при ламповой накачке очень сложно.

Введение в состав стекла иттербия приводит к появлению интенсивной полосы поглощения на длине волны 980 нм, соответствующей переходу иттербия ${}^2F_{7/2} \rightarrow {}^2F_{5/2}$. Из-за того, что ширина полосы поглощения иттербия составляет примерно 1000 см^{-1} , излучение накачки практически полностью поглощается в диапазоне 870–1100 нм [10]. По сравнению с остальными образцами, у образца 1 фторофосфатного стекла существует очень сильная полоса поглощения, расположенная на 980 нм, вызванная наложением переходов Er^{3+} и Yb^{3+} . Повышение эффективности поглощения на 980 нм позволяет использовать волоконные устройства с гораздо меньшей длиной волокна, например, при создании оптоволоконных лазеров с длиной всего в несколько сантиметров [11].

На рис. 3 представлены характерные зависимости сечения поглощения (σ_{abs}) и вынужденного излучения (σ_{em}) от длины волны (λ), полученные методом МакКамбера. Максимальные значения сечений составили $\sigma_{abs} = 6,80 \times 10^{-21} \text{ см}^{-2}$ и $\sigma_{em} = 6,83 \times 10^{-21} \text{ см}^{-2}$ соответственно.

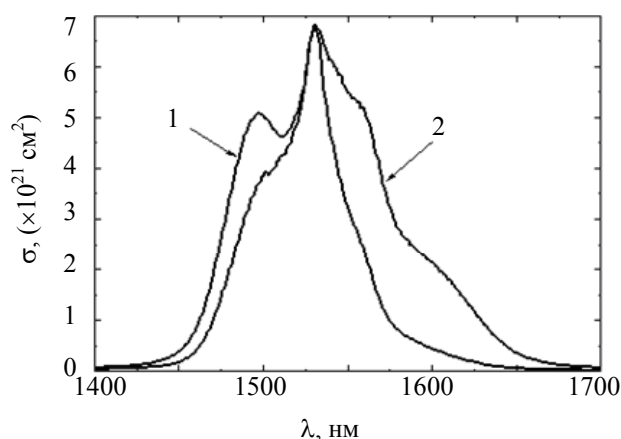


Рис. 3. Спектр сечения поглощения и вынужденного излучения иона эрбия.

1 – сечение поглощения; 2 – сечение вынужденного излучения, образец 1

В табл. 2 приведены значения параметров Джадда–Офельта и рассчитанные значения радиационного времени затухания и интегральных сечений поглощения и вынужденного излучения.

Номер образца	$N_{\text{Er}} \times 10^{20}, \text{ см}^{-3}$	$N_{\text{Yb}} \times 10^{20}, \text{ см}^{-3}$	Параметры Джадда–Офельта, 10^{-20} см^{-2}			$\tau_{\text{рад}}, \text{ мс}$	$\int \sigma_{abs}, 10^{-18} \text{ см}$	$\int \sigma_{em}, 10^{-18} \text{ см}$
			Ω_2	Ω_4	Ω_6			
1	1	10	2,969	1,128	0,41	7,99	1,37	1,39
2	2	0	2,807	1,111	0,36	7,84	1,34	1,38
3	3,1		2,916	1,17	0,47	7,62	1,33	1,38
4	8,2		2,81	1,19	0,38	6,85	1,35	1,38
5	12,9		2,849	1,123	0,506	6,63	1,36	1,38

Таблица 2. Параметры Джадда–Офельта

Спектры видимой люминесценции стекол, содержащих Er^{3+} , имеют в диапазоне 500–700 нм две группы полос, соответствующие переходам ${}^4H_{11/2}, {}^4S_{3/2}, {}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ (рис. 4). В образце 1, дополнительно активированном ионами Yb^{3+} , интенсивность красной полосы люминесценции в красной области спектра (650–675 нм) больше, чем интенсивность полос в зеленой области (515–550 нм). Концентрация эрбия определяет изменение соотношения интенсивностей полос. В образцах 2 и 3 достаточно низкое содержание эрбия, поэтому полоса 515–550 нм превалирует над полосой 650–675 нм. В образце 4 концентрация эрбия увеличилась, соответственно, увеличилась интенсивность полосы в красной области спектра.

Спектры ИК люминесценции стекол, соответствующие переходу ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ионов Er^{3+} , наблюдаются в диапазоне 1400–1700 нм (рис. 5). Образцы фторофосфатных стекол отличаются большими значениями полуширины полосы люминесценции основного эрбиевого перехода: она составляет примерно 88 нм, что намного больше, чем, например, у силикатного стекла (40 нм) или у фосфатного (37 нм) [1, 2].

Исследование кинетики затухания люминесценции образцов фторофосфатных стекол показало, что распад люминесценции происходит по экспоненциальному закону.

При увеличении концентрации ионов эрбия квантовый выход снижается (рис. 6). При концентрации эрбия $2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ квантовый выход люминесценции образца 2 составляет 83%, а при концентрации ионов эрбия $12,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ образца 5 – 78%. Значения квантового выхода люминесценции перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ представлены в табл. 3.

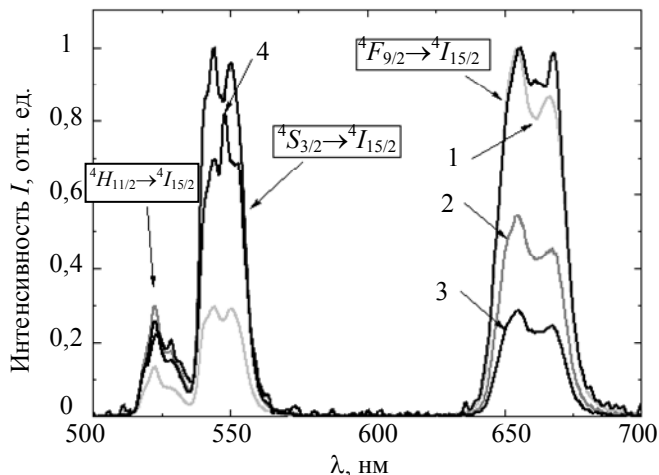


Рис. 4. Спектры видимой люминесценции образцов фторофосфатных стекол. 1 – $N_{Er} = 1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{Yb} = 10 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 2 – $N_{Er} = 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 3 – $N_{Er} = 3,1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 4 – $N_{Er} = 8,2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$

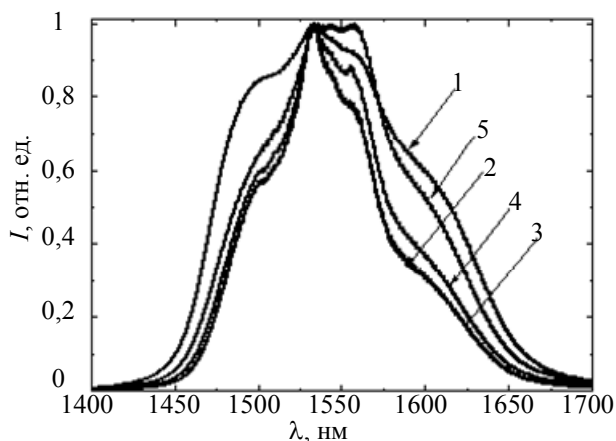


Рис. 5. Спектры ИК люминесценции образцов фторофосфатных стекол. 1 – $N_{Er} = 1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{Yb} = 10 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 2 – $N_{Er} = 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 3 – $N_{Er} = 3,1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 4 – $N_{Er} = 8,2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 5 – $N_{Er} = 12,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$

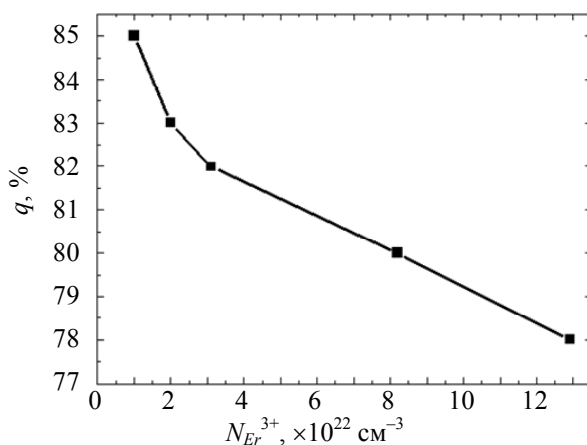


Рис. 6. Зависимость квантового выхода люминесценции (q) для лазерного перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ от концентрации эрбия

Номер образца	$q, \%$
1	85
2	83
3	82
4	80
5	78

Таблица 3. Квантовый выход

Также с увеличением концентрации Er^{3+} уменьшается время жизни люминесценции (τ) перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$. Для ионов эрбия одним из основных тушителей люминесценции являются гидроксильные (ОН-) группы [12–14]. Наличие этих групп в стекле можно оценить по полосе поглощения в районе 3300 нм, т.е. чем больше коэффициент поглощения, тем больше ОН-групп содержит образец. Образцы фторофосфатного стекла характеризуются крайне малым числом гидроксильных групп. В образце 5 коэффициент поглощения составляет около $0,0094 \text{ см}^{-1}$, а в образце 3 – около $0,108 \text{ см}^{-1}$. Это означает, что содержание ОН-групп значительно больше в образце 3, чем в образце 5 (рис. 7), а концентрация при этом отличается в 4 раза.

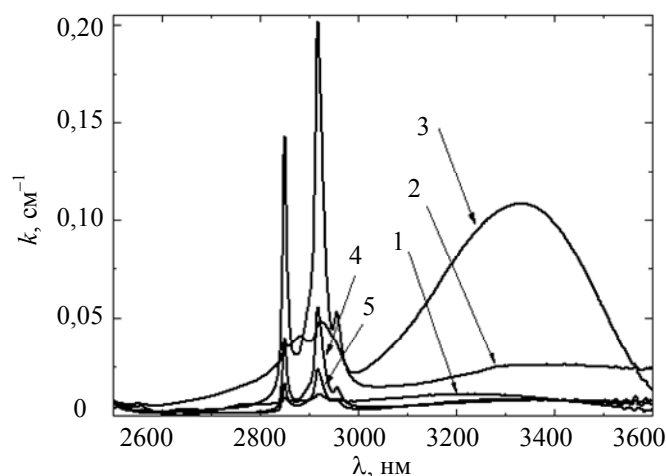


Рис. 7. Полосы поглощения ОН-групп. 1 – $N_{\text{Er}} = 1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{\text{Yb}} = 10 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 2 – $N_{\text{Er}} = 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 3 – $N_{\text{Er}} = 3,1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 4 – $N_{\text{Er}} = 8,2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 5 – $N_{\text{Er}} = 12,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$

Еще одним фактором уменьшения квантового выхода и времени затухания люминесценции основного эрбиевого перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ является нелинейное ап-конверсионное тушение люминесценции [15–17]. Этот процесс можно охарактеризовать следующим образом: два иона эрбия в начальном состоянии находятся на метастабильном уровне ${}^4I_{13/2}$, далее в последующем состоянии один из ионов возвращается на основной уровень ${}^4I_{15/2}$, при этом второй ион переходит на высоко возбужденный уровень ${}^4I_{9/2}$. Впоследствии ион, находящийся на возбужденном уровне ${}^4I_{9/2}$, как правило, безызлучательно релаксирует обратно на метастабильный уровень ${}^4I_{13/2}$ [15]. Доказательством наличия ап-конверсионных процессов служит видимая люминесценция эрбия, наблюдаемая при ИК накачке (рис. 4). При введении в состав стекла ионов иттербия время жизни ионов эрбия и квантовый выход увеличиваются и достигают максимальных значений – 7,65 мс и 85% соответственно. Далее за счет концентрационного тушения и ап-конверсии наблюдается снижение квантового выхода и времени затухания люминесценции. При максимальной концентрации эрбия квантовый выход составляет 78%. Видно, что увеличение концентрации в 4 раза снизило квантовый выход на 7%, т.е. концентрационное тушение незначительно.

Заключение

Проведены комплексные исследования спектрально-люминесцентных свойств фторофосфатного стекла, активированного $\text{Yb}^{3+}/\text{Er}^{3+}$. Данные стекла обладают малым содержанием гидроксильных групп и могут быть активированы большими концентрациями редкоземельных ионов, вплоть до $12,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Рассчитанные значения максимума сечения поглощения и вынужденного излучения составили $\sigma_{\text{abs}} = 6,80 \times 10^{-21} \text{ см}^2$ и $\sigma_{\text{em}} = 6,83 \times 10^{-21} \text{ см}^2$, что больше, чем в обычных фосфатных стеклах. Максимальная полуширина полосы люминесценции, соответствующей переходу ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$, составила 141 нм, что также превосходит эти значения в фосфатных стеклах. Максимальное значение квантового выхода люминесценции равно 85% для образца с концентрацией эрбия $N_{\text{Er}} = 1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Полученные данные позволяют сделать вывод, что эти стекла могут в дальнейшем применяться в качестве материала для создания оптических усилителей, волокон и твердотельных лазеров.

Литература

1. Condon N.J., Bowman S.R., O'Connor S.P., Myers M.J. Heat loads in erbium-doped laser materials // *Optical Materials*. 2010. V. 32. N 9. P. 1050–1054.
2. Babu S.S., Babu P., Jayasankar C.K., Sievers W., Troster Th., Wortmann G. Optical absorption and photoluminescence studies of Eu^{3+} -doped phosphate and fluorophosphate glasses // *Journal of Luminescence*. 2007. V. 126. N 1. P. 109–120.
3. Zheng T., Qin J.-M., Jiang D.-Y., Xiao S.-C. Spectroscopic properties in $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ co-doped fluorophosphate glass // *Chinese Physics B*. 2012. V. 21. N 4. Art. N 043302.
4. Liao M.-S., Fang Y.-Z., Hu L.-L., Zhang L.-Y., Xu S.-Q. Effects of Yb^{3+} in $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ codoped fluorophosphate glasses // *Chinese Physics Letters*. 2007. V. 24. N 4. P. 1062–1065.
5. Laporta P., Taccheo S., Longhi S., Svelto O., Svelto C. Erbium-ytterbium microlasers: optical properties and lasing characteristics // *Optical Materials*. 1999. V. 11. N 2-3. P. 269–288.
6. Reddy B.S., Buddhudu S., Rao K.S.R.K., Babu P.N., Annapurna K. Optical analysis of Er^{3+} : boro-fluorophosphate glasses // *Spectroscopy Letters*. 2008. V. 41. N 8. P. 376–384.
7. Liao M., Duan Z., Hu L., Fang Y., Wen L. Spectroscopic properties of $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ codoped fluorophosphate glasses // *Journal of Luminescence*. 2007. V. 126. N 1. P. 139–144.
8. Aseev V.A., Burdaev P.A., Kolobkova E.V., Nikonorov N.V. Fluorophosphate glasses activated by rare-earth ions and AgBr // *Glass Physics and Chemistry*. 2012. V. 38. N 4. P. 366–372.
9. Ofelt G.S. Intensities of crystal spectra of rare earth ion // *The Journal of Chemical Physics*. 1962. V. 37. N 3. P. 511–520.
10. McCumber D.E. Theory of photon-terminated Optical Masers // *Physical Review*. 1964. V. 134. P. 299–306.
11. Bocharova T.V., Vlasova A.N., Karapetyan G.O., Maslennikova O.N., Sirotkin S.A., Tagil'tseva N.O. Influence of small additives of rare-earth elements on the structure of fluorophosphate glasses // *Glass Physics and Chemistry*. 2010. V. 36. N 3. P. 286–293.
12. Асеев В.А., Ульященко А.М., Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К., Федоров Ю.К. Спектрально-люминесцентные свойства метафосфата иттербия, активированного ионами эрбия // *Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО*. 2005. № 18. С. 180–185.
13. Balakrishnaiah R., Vijaya R., Babu P., Jayasankar C.K., Reddy M.L.P. Characterization of Eu^{3+} -doped fluorophosphate glasses for red emission // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2007. V. 353. N 13-15 spec. P. 1397–1401.
14. Aseev V.A., Nikonorov N.V., Chukharev A.V., Rokhmin A.S., Przhhevuskii A.K. Measuring the gain/loss spectra in high-concentration ytterbium-erbium-doped laser glasses // *Journal of Optical Technology*. 2003. V. 70. N 11. P. 778–781.
15. Lai B., Feng L., Wang J., Su Q. Optical transition and upconversion luminescence in Er^{3+} doped and $\text{Er}^{3+}-\text{Yb}^{3+}$ co-doped fluorophosphate glasses // *Optical Materials*. 2010. V. 32. N 9. P. 1154–1160.
16. Xu W., Li C.-R., Cao B.-S., Dong B. Optical temperature sensor based on up-conversion fluorescence emission in $\text{Yb}^{3+}:\text{Er}^{3+}$ co-doped ceramics glass // *Chinese Physics B*. 2010. V. 19. N 12. P. 804–808.
17. Liao M., Hu L., Fang Y., Zhang J., Sun H., Xu S., Zhang L. Upconversion properties of Er^{3+} , Yb^{3+} and Tm^{3+} codoped fluorophosphate glasses // *Spectrochimica Acta – Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2007. V. 68. N 3. P. 531–535.

Зайцева Софья Викторовна	– студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; студент, Университет Заарбрюкен, Заарбрюкен, Федеративная Республика Германия, Loony92@mail.ru
Асеев Владимир Анатольевич	– кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Aseev@oi.ifmo.ru
Колобкова Елена Вячеславовна	– доктор химических наук, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Kolobok106@rambler.ru
Никоноров Николай Валентинович	– доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, nikonorov@oi.ifmo.ru
Sofia V. Zaytseva	– student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; student, Saarland University, Saarbrücken, Germany, Loony92@mail.ru
Vladimir A. Aseev	– PhD, assistant, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Aseev@oi.ifmo.ru
Elena V. Kolobkova	– D.Sc., Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Kolobok106@rambler.ru
Nikolai V. Nikonorov	– D.Sc., Professor, Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, nikonorov@oi.ifmo.ru

Принято к печати 21.03.14

Accepted 21.03.14

УДК 535.8

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ

В.И. Егоров^a, И.В. Звягин^a, Е.Д. Карпенко^{b, c}, Д.А. Клюкин^a, А.И. Сидоров^{a, d}

^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, egorovvl@gmail.com

^b Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия;

^c Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

^d Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия

Аннотация. Представлены результаты расчета оптических характеристик наночастиц серебра с диэлектрической оболочкой для использования в химических и биосенсорах. Расчет сечения поглощения сферических наночастиц серебра с диэлектрической оболочкой проводился в дипольном квазистатическом приближении. Показано, что оптимальными для металл-диэлектрических наноструктур являются толщина диэлектрической оболочки 2–3 нм и показатель преломления оболочки 1,5–1,75. Выполнено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными. Проведено экспериментальное исследование чувствительности металл-диэлектрических наноструктур к изменению показателя преломления внешней среды. Синтез наноструктур, состоящих из наночастиц серебра с оболочкой на поверхности стекла, содержащего ионы серебра, проводился методом лазерной абляции приповерхностного слоя стекла наносекундными импульсами лазера с длиной волны 1,06 мкм (Solar LQ129), при этом из лазерного факела на поверхность стекла оседают наночастицы серебра и покрываются оболочкой из диэлектрических компонент стекла. Синтез наночастиц серебра без оболочки на поверхности стекла, содержащего ионы серебра, проводился методом термообработки стекла в парах воды. Измерение спектров оптической плотности образцов проводилось с помощью спектрофотометра Cary 500 (Varyan). В случае синтеза наноструктур методом лазерной абляции при изменении показателя преломления от 1 (воздух) до 1,33 (вода) происходит сдвиг плазмонной полосы поглощения на 6 нм. В случае синтеза наночастиц серебра без оболочки на поверхности стекла при тех же условиях зарегистрирован сдвиг плазмонной полосы, составляющий 13 нм, но при этом частицы легко удаляются с поверхности подложки. Полученные результаты могут найти применение при разработке химических и биологических сенсоров на основе спектрального сдвига плазмонных резонансов.

Ключевые слова: наночастица серебра, металл-диэлектрическая наноструктура, плазмонный резонанс, биосенсор, абляция.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01). Использовано оборудование регионального ЦКП «Материаловедение и диагностика в передовых технологиях» при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации.

PARAMETERS OPTIMIZATION OF METAL-DIELECTRIC NANOSTRUCTURES FOR SENSOR APPLICATIONS

V.I. Egorov^a, I.V. Zvyagin^a, E.D. Karpenko^{b, c}, D.A. Klyukin^a, A.I. Sidorov^{a, d}

^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia, egorovvl@gmail.com

^b Saint Petersburg State Polytechnic University, Saint Petersburg, Russia

^c Ioffe Physical Technical Institute RAS, Saint Petersburg, Russia

^d Saint Petersburg Electrotechnical State University (“LETI”), Saint Petersburg, Russia

Abstract. We present calculation results of optical properties of silver nanoparticles with dielectric shell in relation to their applications in chemical and biosensors. Absorption cross-section calculation for spherical silver nanoparticles was performed by quasi static dipole approximation. It is shown that dielectric shell thickness equal to 2-3 nm and its refraction index equal to 1,5-1,75 are optimal. Calculation results were compared to experimental data. Experimental investigation of metal-dielectric nanostructures sensitivity to external refraction index was performed. Synthesis of silver nanoparticles with dielectric shell on glass surface was performed by nanosecond laser ablation method in near-surface glass layer at 1,06 μm wavelength (Solar LQ129). Synthesis of silver nanoparticles without a shell on the glass surface with silver ions was performed using thermal treatment in wet atmosphere. Spectrophotometer Cary 500 (Varyan) was used for spectral measurements. In case of laser ablation method application, external refraction index changes from 1 (the air) to 1,33 (water) and plasmon resonance band shift for 6 nm occurs. In case of another method application at the same conditions the registered shift was equal to 13 nm. However, in the latter case the particles can be easily removed from the substrate surface. Obtained results will be useful for developing chemical and biological sensors based on plasmon resonance band shift.

Keywords: silver nanoparticle, nanostructure, metal-dielectric, plasmon resonance, biosensor, ablation.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation (grant 074-U01). Equipment of the regional Multiple Users' Center “Material science and diagnostics in innovative technologies” was used under financial support of the Russian Federation Ministry of Education and Science.

Введение

Наночастицы благородных металлов (Au, Ag, Pt) и меди, обладающие плазмонными резонансами [1, 2], находят применение при создании химических и биосенсоров на основе усиления люминесценции [3, 4], рамановского рассеяния [5, 6], а также на основе спектрального сдвига плазмонных резонансов при изменении показателя преломления среды [7, 8]. Наночастицы металла при этом либо вводят в раствор аналита, либо формируют их на поверхности диэлектрической подложки, контактирующей с аналитом. Второй метод с практической точки зрения является более удобным. Однако из-за плохой адгезии нано-

частиц к стеклам и полимерам они легко удаляются механически или смываются потоком жидкости (аналита). Кроме того, так как наночастицы некоторых металлов, например, серебра, обладают высокой химической активностью, их необходимо защитить от химического взаимодействия с аналитом. Исходя из этого, наночастицы необходимо фиксировать на поверхности подложки слоем диэлектрика, который будет выполнять и защитную функцию. Таким образом, для практических применений оптимальным подходом является формирование на поверхности подложки металл-диэлектрических сенсорных наноструктур, состоящих из металлических наночастиц, покрытых диэлектрической оболочкой. Но очевидно, что при увеличении толщины диэлектрика влияние аналита на оптические характеристики наночастиц, например, на спектральное положение плазмонного резонанса, уменьшается. Спектральное разрешение серийных спектрометров, используемых для лабораторных измерений, составляет 0,5–1 нм. В связи с этим возникает задача оптимизировать толщину слоя диэлектрика таким образом, чтобы величина сдвига плазмонного резонанса наночастиц при изменении показателя преломления аналита превышала спектральное разрешение серийных спектрометров.

Целью настоящей работы была оптимизация толщины диэлектрической оболочки на наночастицах серебра на поверхности стекла и ее показателя преломления с точки зрения обеспечения чувствительности спектрального сдвига плазмонного резонанса наночастиц при изменении показателя преломления окружающей среды.

Методики расчетов и экспериментов

Расчет сечения поглощения сферических наночастиц серебра с диэлектрической оболочкой проводился в дипольном квазистатическом приближении по известной методике [1, 9]. При расчете использовались дисперсионные зависимости оптических констант серебра из [10]. Для синтеза наночастиц серебра на поверхности стекла использовались силикатные стекла, в которые ионы серебра были введены методом ионного обмена [11]. Синтез наноструктур, состоящих из наночастиц серебра с диэлектрической оболочкой на поверхности стекла, содержащего ионы серебра, проводился методом лазерной абляции приповерхностного слоя стекла наносекундными импульсами лазера с длиной волны 1,06 мкм (Solar LQ129). Как было показано нами ранее [12, 13] при этом из лазерного факела на поверхность стекла оседают наночастицы серебра и покрываются оболочкой из диэлектрических компонент стекла. После этого наночастицы серебра могут быть удалены с поверхности только после растворения оболочки в плавиковой кислоте. Синтез наночастиц серебра без оболочки на поверхности стекла, содержащего ионы серебра, проводился методом термообработки стекла в парах воды [14, 15]. Измерение спектров оптической плотности образцов выполнялось с помощью спектрофотометра Cary 500 (Varian). Измерения проводились в кювете из кварцевого стекла.

Результаты и обсуждение

На рис. 1 показаны расчетные спектральные зависимости сечения поглощения сферической наночастицы серебра с диэлектрической оболочкой для различного показателя преломления окружающей среды. Диаметр наночастицы равен 5 нм, толщина оболочки – 1 нм, показатель преломления оболочки – 1,5. Из рисунка видно, что при увеличении показателя преломления среды происходит длинноволновый сдвиг плазмонного резонанса и увеличение его амплитуды. При изменении показателя преломления среды от 1 до 1,5 величина сдвига составляет 16 нм.

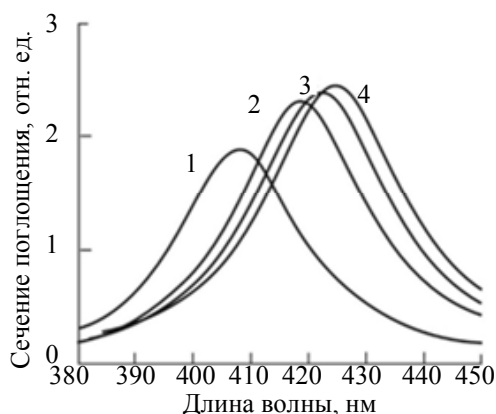


Рис. 1. Спектральный сдвиг плазмонной полосы поглощения наноструктуры «ядро–оболочка» при изменении показателя преломления окружающей среды n : $n = 1$ (1); $n = 1,3$ (2); $n = 1,4$ (3); $n = 1,5$ (4). Диаметр ядра – 5 нм, толщина оболочки – 1 нм, показатель преломления оболочки – 1,5

На рис. 2 показаны расчетные зависимости спектрального сдвига максимума плазмонной полосы поглощения от показателя преломления среды для различной толщины диэлектрической оболочки. Пока-

затель преломления оболочки равен 1,5. Из рисунка видно, что при увеличении толщины оболочки величина сдвига максимума плазмонной полосы уменьшается. Исходя из этого, с точки зрения повышения чувствительности выгодно использовать наночастицы с минимальной толщиной оболочки. Однако можно предположить, что диэлектрический слой толщиной 1 нм вряд ли обеспечит прочную фиксацию наночастиц на поверхности подложки. В связи с этим необходимо выбирать компромиссное решение – увеличение толщины оболочки и уменьшение чувствительности. Так, при толщине оболочки 3 нм и спектральном разрешении спектрометра 0,5 нм может быть обеспечена регистрация изменения показателя преломления среды Δn на величину 0,02. Ниже будет показано, что при такой толщине оболочки наночастицы надежно фиксируются на поверхности подложки.

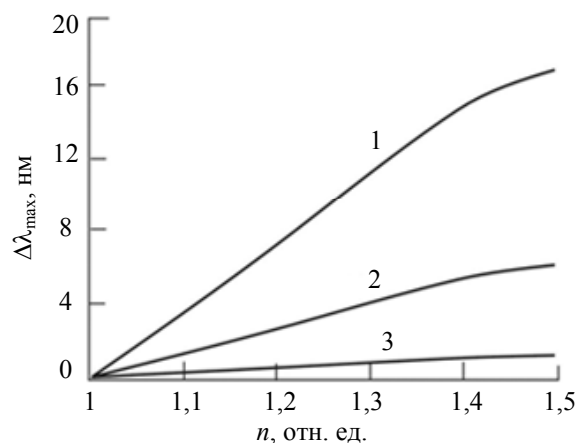


Рис. 2. Зависимость спектрального сдвига максимума плазмонной полосы поглощения от показателя преломления среды. 1 – толщина оболочки 1 нм; 2 – 3 нм; 3 – 6 нм

На рис. 3 показана расчетная зависимость спектрального сдвига максимума плазмонной полосы поглощения от показателя преломления оболочки. Толщина оболочки 1 нм. Изменение показателя преломления среды $\Delta n = 0,5$. Из рисунка видно, что при увеличении показателя преломления оболочки от 1,4 до 1,7 величина спектрального сдвига плазмонной полосы увеличивается. При $n > 1,7$ происходит уменьшение сдвига плазмонной полосы. Исходя из этого, с точки зрения повышения чувствительности выгодно использовать оболочки с относительно высоким показателем преломления, например, из стекла, содержащего свинец (тяжелые флинт).

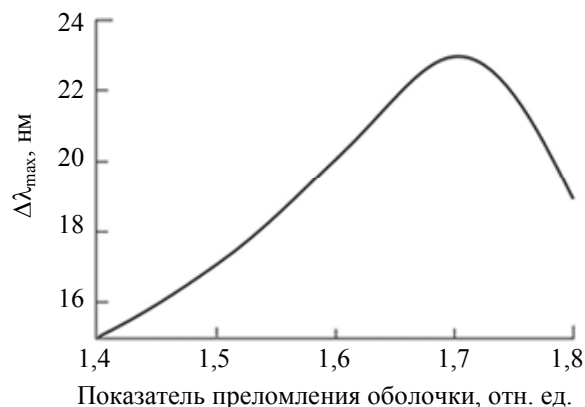


Рис. 3. Зависимость спектрального сдвига максимума плазмонной полосы поглощения от показателя преломления оболочки. Толщина оболочки 1 нм. Изменение показателя преломления среды $\Delta n = 0,5$

На рис. 4, а, показаны разностные спектры оптической плотности стекла с наночастицами серебра, покрытыми оболочками из стекла ($n = 1,52$), синтезированными методом лазерной абляции. Спектры получены путем вычитания из спектра стекла с наночастицами спектра чистого стекла. Из рисунка видно, что при изменении показателя преломления от 1 (воздух) до 1,33 (вода) происходит сдвиг плазмонной полосы поглощения на 6 нм. Сопоставляя этот результат с рис. 2, можно сделать вывод, что толщина оболочки равна примерно 3 нм. Для сравнения на рис. 4, б, показаны спектры поглощения с наночастицами серебра без оболочки, полученные методом восстановления в парах воды. Видно, что в этом случае при изменении показателя преломления от 1 до 1,33 происходит сдвиг плазмонной полосы поглощения на 13 нм. Однако в данном случае наночастицы серебра легко удаляются с поверхности стекла механически или струей воды.

Известно, что серебро растворяется в азотной кислоте. Травление в азотной кислоте образца с наночастицами серебра, полученными методом лазерной абляции, не привело к исчезновению плазмонной полосы поглощения и наночастиц серебра. В то же время травление в 5% растворе плавиковой кислоты в течение 2 с привело к полному исчезновению плазмонной полосы поглощения. Это указывает на то, что наночастицы серебра, полученные данным методом, действительно защищены тонкой диэлектрической оболочкой из компонентов стекла.

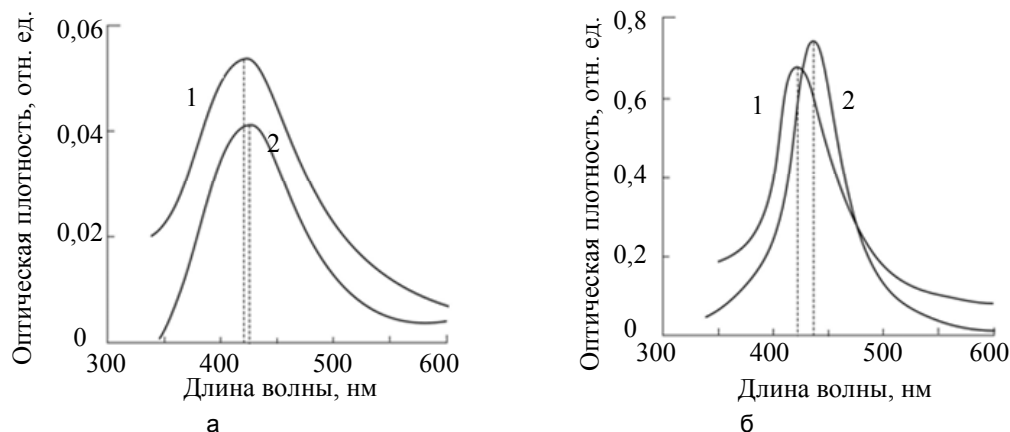


Рис. 4. Разностные спектры оптической плотности образца стекла со слоем наночастиц серебра с диэлектрической оболочкой на воздухе (1) и в воде (2) (а); спектры оптической плотности образца стекла со слоем наночастиц серебра на воздухе (1) и в воде (2) (б)

Заключение

Проведена оптимизация наноструктур вида «ядро–оболочка» с точки зрения толщины и показателя преломления оболочки для их применения в химических и биосенсорах, основанных на спектральном сдвиге плазмонной полосы поглощения серебра при изменении показателя преломления окружающей среды. Показано, что оптимальными являются толщина диэлектрической оболочки 2–3 нм и показатель преломления оболочки 1,5–1,75.

Литература

1. Климов В.В. Наноплазмоника. М.: Физматлит, 2009. 480 с.
2. Zayats A.V., Smolyaninov I.I., Maradudin A.A. Nano-optics of surface plasmon polaritons // *Physics Reports*. 2005. V. 408. N 3-4. P. 131–314.
3. Eichelbaum M., Rademann K. Plasmonic enhancement or energy transfer? On the luminescence of gold-, silver-, and lanthanide-doped silicate glasses and its potential for light-emitting devices // *Advanced Functional Materials*. 2009. V. 19. N 13. P. 2045–2052.
4. Pugh V.J., Szmecinski H., Moore W.E., Geddes C.D., Lakowicz J.R. Submicrometer spatial resolution of metal-enhanced fluorescence // *Applied Spectroscopy*. 2003. V. 57. N 12. P. 1592–1598.
5. Chen Y., Jaakola J.J., Saynatjoki A., Tervonen A., Honkanen S. Glass-embedded silver nanoparticle patterns by masked ion-exchange process for surface-enhanced Raman scattering // *Journal of Raman Spectroscopy*. 2011. V. 42. N 5. P. 936–940.
6. Kneipp K., Wang Y., Kneipp H., Perelman L.T., Itzkan I., Dasari R.R., Feld M.S. Single molecule detection using surface-enhanced Raman scattering (SERS) // *Physical Review Letters*. 1997. V. 78. N 9. P. 1667–1670.
7. Silver nanoparticles. Ed. by D.P. Perez. Vukovar, Croatia: In-Tech, 2010. 342 p.
8. Lee K.S., El-Sayed M.A. Gold and silver nanoparticles in sensing and imaging: sensitivity of plasmon response to size, shape, and metal composition // *Journal of Physical Chemistry B*. 2006. V. 110. N 39. P. 19220–19225.
9. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. М.: Мир, 1986. 664 с.
10. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. Л.: Химия, 1984. 216 с.
11. Tervonen A., West B.R., Honkanen S. Ion-exchanged glass waveguide technology: a review // *Optical Engineering*. 2011. V. 50. N 7. Art. N 071107.
12. Egorov V.I., Naschekin A.V., Sidorov A.I. Plasmonic nanostructures formation on surface of glasses using pulsed laser exposure // *Proc. of VI Finn.-Russ. Photonics and Lasers Symposium (PALS'13)*. Kuopio, Finland, 2013. P. 13.

13. Egorov V.I., Nасhekin A.V., Nikonorov N.V., Sidorov A.I. Silver nanoparticles and films formation on the surface of silver-containing glasses by laser ablation // Proc. of International Symposium Fundamentals of Laser Assisted Micro- and Nanotechnologies (FLAMN-13). St. Petersburg, 2013. P. 117–118.
14. Образцов П.А., Нащекин А.В., Никоноров Н.В., Сидоров А.И., Панфилова А.В., Брунков П.Н. Формирование наночастиц серебра на поверхности силикатных стекол после ионного обмена // ФТТ. 2013. Т.55. № 6. С. 1180–1186.
15. Kaganovskii Yu., Mogilko E., Lipovskii A.A., Rosenbluh M. Formation of nanoclusters in silver-doped glasses in wet atmosphere // Journal of Physics: Conference Series. 2007. V. 61. N 1. P. 508–512.

- Егоров Владимир Ильич** – аспирант, инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; egorovvl@gmail.com
- Звягин Илья Вячеславович** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; zvyagin.i.v@yandex.ru
- Карпенко Елена Драгановна** – студент, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия; лаборант, Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия, ele62461401@yandex.ru
- Ключин Дмитрий Александрович** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, smith24@mail.ru
- Сидоров Александр Иванович** – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; профессор, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия
- Vladimir I. Egorov** – postgraduate, engineer, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, egorovvl@gmail.com
- Илья V. Zvyagin** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, zvyagin.i.v@yandex.ru
- Elena D. Karpenko** – student, Saint Petersburg State Polytechnic University; Laboratory assistant, Ioffe Physical Technical Institute RAS, Saint Petersburg, Russia, ele62461401@yandex.ru
- Dmitry A. Klyukin** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, smith24@mail.ru
- Alexander I. Sidorov** – D.Sc., Senior scientific worker, Professor, ITMO University; Professor, Saint Petersburg Electrotechnical State University (“LETI”), Saint Petersburg, Russia, aisidorov@qip.ru

Принято к печати 18.03.14
Accepted 18.03.14

УДК 004.2

ПРИМЕНЕНИЕ HLD-МЕТОДОЛОГИИ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ
РЕКОНФИГУРИРУЕМЫХ ВСТРАИВАЕМЫХ СИСТЕМ

А.О. Ключев^а, П.В. Кустарев^а, Т.Т. Палташев^{б, в, с}, А.Е. Платунов^а

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, platonov@lmt.ifmo.ru

^б Северо-Западный политехнический университет, Фримонт, Калифорния, США

^сАМД, Калифорния, США

Аннотация. Представлена HLD-методология проектирования встраиваемых систем, созданная и развиваемая специалистами Университета ИТМО и научно-производственной фирмы «ЛМТ». Актуальность темы обусловлена постоянным ростом архитектурной сложности реконфигурируемых встраиваемых вычислительных систем, повышением значимости вопросов системного проектирования. Показано применение HLD-методологии в ряде прикладных проектов. Ее использование повысило качество архитектурного и микроархитектурного проектирования. В основу методологии положены: система архитектурных абстракций; процесс проектирования архитектурной модели вычислительной системы, независимой от аппаратно-программной реализации; аспектная модель процесса проектирования вычислительной системы; модель актуализации вычислительного процесса на основе понятия унифицированного транслятора. Практическое применение предложенной HLD-методологии решает важные задачи проектирования. Обоснованно распределяются компоненты вычислительного процесса по различным фазам жизненного цикла системы (проектирования, исполнения), обеспечивается расширение пространства поиска проектных решений. Осуществляется синтез архитектуры на основе обобщающего взгляда на механизмы конфигурирования и программирования на базе модели актуализации вычислительного процесса. Обеспечивается возможность позднего закрепления конкретного способа реализации архитектурных решений. Применяются вертикальные архитектурные нотации. Гибко изменяются свойства встраиваемой системы посредством конфигурирования в рамках выбранного подмножества проектных аспектов. Это позволяет управлять затратами ресурсов на различных фазах ее жизненного цикла (разработки, производства, использования, поддержки). Предлагаемая HLD-методология проектирования рассматривает реконфигурируемую встраиваемую систему прежде всего через призму организации ее целевого вычислительного процесса на фазах проектирования, конфигурирования, исполнения в едином ключе. Разработчикам предоставлена возможность поиска эффективного распределения элементов вычислительного процесса по различным фазам. Методология включает в себя группы абстракций для работы с компонентами вычислительной системы и вычислительной системой в целом, с процессом проектирования встраиваемой системы и метриками архитектурных решений. В работе приведены основные положения предлагаемой авторами HLD-методологии. Демонстрируется ряд реконфигурируемых встраиваемых систем, разработанных с использованием элементов HLD-методологии.

Ключевые слова: встраиваемая система, реконфигурируемая система, вычислительная архитектура, процесс проектирования, системное проектирование, высокоуровневое проектирование.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

HLD-METHODOLOGY APPLICATION FOR RECONFIGURABLE EMBEDDED
SYSTEMS DESIGN

A.O. Kluchev^а, P.V. Kustarev^а, T.T. Paltashev^{б, в, с}, A.E. Platonov^а

^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, platonov@lmt.ifmo.ru

^б Northwestern Polytechnic University, Fremont, California, USA

^с Advanced Micro Devices (AMD), California, USA

Abstract. The paper deals with HLD-methodology for embedded systems design (High Level Design Methodology for Embedded Systems), created and developed by specialists of ITMO University and "LMT" Research and Production Company. The currency of this topic is caused by constant growth of architectural complexity of reconfigurable embedded computing systems, by the importance increase of system design issues. Application of HLD-methodology in a number of applied projects is shown. Its usage has raised architectural and micro-architectural design quality. The methodology is based on: architectural abstractions system; architectural model design process of the computing system independent of hardware-software realization; aspect model of the computing system design process; actualization model of computational process on the basis of unified translator concept. Practical application of the proposed HLD-methodology solves important design problems. Computational process components are distributed reasonably on various phases of system life cycle (design, execution). Space expansion of design decisions search is provided. Architecture synthesis is implemented on the basis of a generalizing view at configuration and programming mechanisms based on computational process actualization model. Possibility of late fixing for concrete way of architectural decisions realization is provided. Vertical architectural notations are applied. Embedded system properties are flexibly changed by means of configuration within the framework of the chosen design aspects subset. It gives the possibility to control resources expenses for various phases of system life cycle (design, manufacture, usage, support). The proposed design HLD-methodology considers reconfigurable embedded system, first of all, through the prism of its target computational process organization at the design, configuration and execution phases in a unified key. De-

velopers have got possibility for effective distribution search of computational process elements on various phases. The methodology includes groups of abstractions for work with the computing system components and the computing system on the whole, with embedded system design process and architectural decisions metrics. Basic propositions of HLD-methodology suggested by the authors are given. A number of reconfigurable embedded systems developed with the usage of HLD-methodology elements is represented.

Keywords: embedded system, reconfigurable system, computational architecture, design process, system level design, high-level design.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation, Grant 074-U01.

Введение

Бурное развитие встраиваемых вычислительных систем (ВсС) определяется растущей степенью автоматизации и компьютеризации всех областей жизни человека. Это предполагает постоянный рост числа и сложности таких систем наряду с требованием кардинального увеличения их надежности, безопасности, производительности, мобильности при одновременном сокращении сроков проектирования и стоимости. По прогнозу ведущих специалистов, доминирующие сегодня вычислительные системы (ВС) с традиционными программируемыми архитектурами в обозримом будущем не смогут обеспечивать улучшение перечисленных показателей.

В качестве альтернативы рассматриваются ВС с реконфигурируемой архитектурой, известные с конца пятидесятих годов прошлого века, но по ряду серьезных причин находящиеся по-прежнему «в тени». Реконфигурируемые ВС в силу своей организации проблемно-ориентированы, что хорошо согласуется с задачами в сегменте ВсС. При этом они чрезвычайно разнообразны по архитектуре и требуют сложных технологий создания конфигурационного обеспечения (configware), что делает задачу их проектирования нетривиальной. Это подтверждается опытом создания большого числа как экспериментальных, так и серийных ВсС с реконфигурируемой архитектурой (РВсС) [1–3]. С помощью принципов реконфигурируемости специалисты решают различные задачи. На первом месте обычно стоит повышение производительности, функциональная гибкость и адаптивность, улучшение комплекса надежных характеристик, сокращение энергопотребления и размеров. Другие достоинства реконфигурируемости для понимания требуют анализа жизненного цикла изделия и возможных подходов к его проектированию: удовлетворение нужд потребителей, быстрая разработка и выведение на рынок, повышение качества продукта, дифференциация продуктовой линии, адаптация к новым стандартам, снижение стоимости разработки.

Широкое внедрение РВсС требует решения большого числа сложных проблем, среди которых на первом месте стоят вопросы системного (или высокоуровневого) проектирования [4, 5]. Перечислим основные проблемы в проектировании ВсС и РВсС [3–7]:

- доминирует шаблонное (особенно на уровне реализаций вычислительных платформ) проектирование в области аппаратно-программных систем, которое должно отойти на второй план, уступив в идеале место гибкому автоматизированному заказному проектированию;
- в большинстве проектов проявляется искусственное ограничение проектных требований, что приводит к сужению пространства поиска проектных решений архитектурного и микроархитектурного уровня в результате использования традиционных технологических и инструментальных цепочек, сложности их комплексного анализа и изменения (нет адекватных средств и методик);
- отсутствуют эффективные методики и средства проектирования подсистем с различными, в том числе изменяемыми, моделями вычислений и гетерогенной архитектурой.

Специалистами Университета ИТМО и научно-производственной фирмы (НПФ) «ЛМТ» [8, 9] создана и развивается HLD-методология проектирования встраиваемых систем (High Level Design Methodology for Embedded Systems) [6, 10]. Методология направлена на решение перечисленных проблем, одним из ее практических применений является проектирование гетерогенных РВсС с многоуровневой архитектурой. В настоящей работе рассматриваются основные положения HLD-методологии и опыт создания ряда РВсС с ее использованием.

HLD-методология проектирования встраиваемых систем

HLD-методология обеспечивает проектирование ВсС от уровня технического задания до спецификаций (в терминах, не выходящих из области известных технических решений), необходимых для реализации. Методология направляет проектировщика ВсС на создание спецификации, в минимальной степени фиксирующей конкретные элементы реализации, обеспечивая при этом максимальную детализацию применяемых известных технических решений.

Основу HLD-методологии проектирования ВсС составляют [6, 10, 11]:

- система архитектурных абстракций, связывающая воедино компоненты методологии;
- принцип и методы позднего закрепления конкретного способа реализации архитектурных решений;

- модель актуализации вычислительного процесса (ВП) на основе понятия унифицированного транслятора;
- аспектная модель процесса проектирования вычислительной системы;
- класс объектно-событийных моделей вычислений (наряду с иными моделями вычислений).

В рамках HLD-методологии проектировщику предлагается подход, при котором процесс проектирования архитектурной модели вычислительной системы выполняется на уровне, инвариантном к аппаратно-программному (HW/SW) разделению. Данный принцип в определенном объеме используется в современных методологиях проектирования на базе Hardware/Software Codesign [5]. Базовый процесс проектирования ВсС в рамках HLD-методологии представлен на рис. 1 [12].

Рассмотрим подробнее основные положения HLD-методологии. Предлагаемая нами система архитектурных абстракций включает группы для представления отдельных компонентов вычислительной системы и вычислительной системы в целом, для представления процессов проектирования вычислительной системы, для оценки и анализа архитектурных решений.

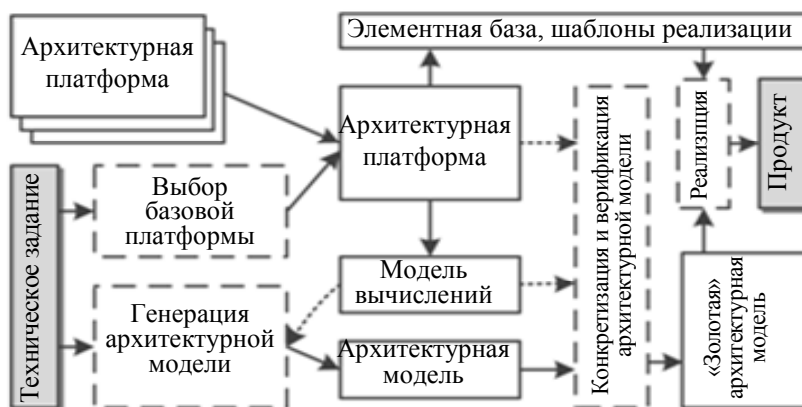


Рис. 1. Процесс проектирования ВсС в рамках HLD-методологии

HLD-методология проектирования в терминах данных абстракций рассматривает ВсС прежде всего через призму организации ее целевого ВП на фазах проектирования (design-time), конфигурирования (config-time), исполнения (run-time) в едином ключе, приглашая разработчика к поиску эффективного распределения элементов ВП по этим фазам. Термин config-time сегодня применяют как в контексте процессов подготовки и развертывания программных систем, так и применительно к РВсС, обозначая процедуры перенастройки.

Проектирование архитектурной модели выполняется по возможности без аппаратно-программного разделения до момента формирования спецификаций для последующей реализации. Технические решения закрепляются в требуемом для конкретной реализации виде с отражением в выделенных проектировщиком сегментах (аспектах). Это согласуется с базовыми принципами Hardware/Software Codesign второго (Platform-Based Design Methodology – PBD [4]) и третьего (Design Space Exploration – DSE) поколения по условной классификации из [5].

Предлагаемый методологией комплексный подход позволяет в полной мере использовать определение архитектуры системы по стандарту [13], которое, наряду с составом компонентов системы, принципами их взаимодействия между собой и с окружением, включает принципы ее проектирования и развития. Такая трактовка понятия вычислительной архитектуры приобретает все большую популярность среди специалистов, выводя инфраструктуру проекта ВсС, включая инструментарий, на один уровень значимости с создаваемой целевой системой.

В HLD-методологии процесс проектирования ВсС рассматривается как организация ВП в пространстве и времени от исходных спецификаций (технического задания) до их реализации на всем жизненном цикле системы.

Модель актуализации ВП (МABП) демонстрирует совокупность преобразователей (трансляторов), участвующих в его организации. Для базовых элементов модели – трансляторов – различаются конфигурирование и программирование, что естественным образом выстраивает отношение этих фундаментальных механизмов вычислительной техники между собой. Конфигурирование задает правила преобразования, а входная программа для транслятора является обрабатываемыми данными. МABП эффективно позволяет работать с трансляторами, которые функционируют на различных фазах жизненного цикла ВсС, и в первую очередь на фазах проектирования, конфигурирования, исполнения.

Используемый в HLD-методологии набор взаимодополняющих архитектурных спецификаций позволяет представлять:

- архитектурную платформу (горизонтальная архитектурная спецификация);

- модель актуализации ВП (граф актуализации);
- композицию уровней организации ВП в совокупности с вычислительными функциональными блоками (ФБ), включая фазы проектирования, конфигурирования, исполнения (вертикальная архитектурная спецификация).

В основе нашего понимания вычислительной иерархии во многом лежит модель уровней абстракции вычислительной системы, предложенная Эдвардом Ли [14]. Суть аспектного процесса проектирования (в отличие от [15]) состоит в выделении на начальном шаге проекта важных, по мнению разработчика, сегментов (аспектов) проектного пространства, каждый из которых отражает частную проблему проекта по ходу его выполнения. Наряду с функциональным (поведенческим) аспектом выделяются: аспект аппаратно-программной реализации, аспект этапов жизненного цикла проекта, аспект производительности, аспекты надежности, энергопотребления, временной (реального времени и (или) синхронизации) и другие. Это позволяет разработчику на всех шагах проекта концентрироваться в значительной мере формально на соблюдении функциональных и нефункциональных ограничений, в том числе, управляя текущими приоритетами ограничений (через аспекты). По усмотрению разработчика аспектная модель может быть распространена на различные фазы жизненного цикла системы, что особенно удобно для РВсС с многоуровневой статической и (или) динамической [ре]конфигурацией.

Формализмы, предлагаемые HLD-методологией, выступают инструментами поддержки в первую очередь для потенциально плохо автоматизируемых задач проектирования. Это задачи, лежащие в «проектных доменах» организации ВП, пространства поиска архитектурных и микроархитектурных решений (Design Space Exploration), выбора технологий разработки и реализации.

Поясним подробнее ряд новых абстракций, разработанных нами для HLD-методологии, которые необходимы для дальнейшего обсуждения механизма [ре]конфигурирования.

Вычислительный механизм (ВМх) – архитектурный шаблон, демонстрирующий принципы организации части ВП. В отличие от распространенного понятия «паттерн проектирования», для которого жестко не закреплены требования абстрактности описания и демонстрации внутреннего устройства, ВМх должен прозрачно предоставлять полезные «вычислительные» технические принципы без обязательного закрепления условий их конкретной реализации. Таким образом, ВМх следует рассматривать в качестве определенной категории шаблонов (паттернов) проектирования для вычислительной техники.

ВсС рассматривается в виде композиции ФБ. В состав каждого ФБ входит ряд ВМх, демонстрирующих принципы организации соответствующего ВП. ФБ представлен четверкой спецификаций: функциональной (поведенческой), компонентной (перечень используемых ВМх), интерфейсной (API, характеризующей ФБ как платформу), количественной (набор метрик). Сложность ФБ может меняться в широких пределах – от «покрытия» атомарных вычислительных операций до сколь угодно сложных виртуальных машин (ВМ). Таким образом, под ВМ понимается программируемый ФБ или программный интерпретатор (процессор) независимо от способа его реализации и временной фазы существования.

Унифицированное представление механизмов конфигурирования и программирования в архитектурном проектировании встраиваемых систем

К РВсС специалисты относят архитектуры от однородных вычислительных сред с различной granularity элементов (например, FPGA) до вычислительных сетей различного масштаба (как пространственно-распределенные конфигурации, так и сети на кристалле) [1, 2, 7]. При этом в литературе по-прежнему не дается четкое разделение механизмов программирования и [ре]конфигурирования.

Традиционное понимание реконфигурируемости как способности к изменению организации вычислительной системы и (или) способа ее функционирования, обязательно изменяющее ее аппаратное устройство, назовем реконфигурируемостью «в узком смысле» (это актуально в рамках традиционных процессов проектирования ВсС, когда элементы реализации закрепляются уже на ранних стадиях).

В рамках HLD-методологии мы стремимся к максимуму проектирования на абстрактных уровнях и возможно более позднему HW/SW разделению, в пределе – только на этапе реализации. Следовательно, реконфигурируемое проектное решение архитектурного и (или) микроархитектурного уровня при указанном выше подходе к процессу проектирования от программируемого решения отделить можно либо принудительно (закрепив априори HW/SW-реализацию), либо «волевым порядком» (например, по критерию значимости конфигурационных изменений). Примером второго варианта будет изменение платформы (в терминологии PBD) или системы команд (ISA) процессора (в терминах традиционной технологии последовательного проектирования).

Можно ввести следующие определения:

- программирование ВсС – задание кода приложения для одного или более процессоров или ВМ;
- конфигурирование ВсС – смена спецификации (правил функционирования, состава ФБ, системы команд и так далее) процессора, ВМ или вычислительной платформы в составе ВсС.

Потенциально можно распространить принцип реконфигурируемости ВсС на область программирования, рассматривая программирование в качестве варианта [ре]конфигурирования. При этом под про-

граммной реализацией понимается код приложения, последовательно интерпретируемый процессором. Пример такой обобщающей трактовки приведен в работах Р. Хартенштейна [3, 16].

Для процессов проектирования в парадигме Hardware/Software Codesign необходимо использовать «широкую трактовку» реконфигурируемости как способности к изменению спецификации ВМ, вычислительной платформы или программного кода приложения. В рамках HLD-методологии на основе «широкой трактовки» мы получаем модель механизмов реконфигурируемости для HW/SW-инвариантного процесса проектирования многоуровневой архитектурной модели PBC. Это также дает возможность классифицировать PBC по глубине конфигурирования и участвующим в конфигурировании архитектурным уровням в рамках вертикального представления архитектуры.

Таким образом, [re]конфигурируемость в обобщающей трактовке есть свойство вычислительной системы, выраженное в способности к изменению ее функциональности.

Одна из основных целей в рамках HLD-методологии – это расширение проектного пространства поиска решений, прежде всего, в части HW/SW-реализации и фаз проектирования, конфигурирования, исполнения жизненного цикла системы. Так как при этом формальными средствами на этапе проектирования процедуры конфигурирования и программирования становятся неразличимы, а логическая организация создаваемой ВС может включать в себя произвольное число иерархий ВМ, определение конкретного механизма в качестве конфигурирующего или программирующего отдается проектировщику.

Вопрос принадлежности конфигурационных изменений к временной фазе существования ВС требует дополнительного обсуждения и вынесен за рамки работы.

Реконфигурируемые встраиваемые системы, созданные с применением HLD-методологии

Принципы и положения HLD-методологии создавались и проверялись в течение ряда лет совместно специалистами Университета ИТМО и НПФ «ЛМТ» в ходе выполнения НИОКР в области ВС и систем на кристалле (СнК) с активным использованием механизмов реконфигурирования на разных уровнях архитектурной организации. Кратко рассмотрим наиболее показательные из таких проектов.

Реконфигурируемый вычислитель МЗМ [17] – ведущий процессорный модуль линейного пункта централизации систем железнодорожной автоматики – представляет собой вычислительное ядро, обладающее высокой безопасностью и надежностью функционирования. В архитектурной проработке проекта была использована новая система архитектурных абстракций и принцип максимально позднего разделения на аппаратную и программную составляющие.

МЗМ имеет многопроцессорную несимметричную структуру, включающую двоированный процессор x86, оперативную память с контролем и исправлением ошибок, программируемую логику контроля и диагностики, сервисный процессор, коммуникационные контроллеры штатного и инструментального режимов, традиционные средства поддержки реального масштаба времени. Реконфигурируемой частью является уровень вычислительной (или функциональной) платформы. Процесс реконфигурации затрагивает вычислительные механизмы, отвечающие за надежность в пределах платформы, но изменения не выходят за ее границы и затрагивают только состав и алгоритмы работы «непрограммируемых» функциональных блоков.

Средства программируемой логики и сервисный процессор в составе МЗМ позволили реализовать операционные, тестирующие, диагностирующие блоки различной сложности, обеспечивая требуемую глубину диагностики (в сочетании с программными средствами), перераспределение ресурсов, изменение правил функционирования интерфейсов и ряд других свойств по требованию заказчика. Результаты разработки показали перспективность выбранных подходов и стимулировали дальнейшее развитие HLD-методологии.

Реконфигурируемые вычислительные платформы LIC5091 [18] и MiniLab [19] ориентированы на создание ВС сложных аналитических приборов и инструментальных комплексов прототипирования СнК. В данных разработках была успешно опробована аспектная методика проектирования, применена на практике объектно-событийная модель вычислений и использована модель актуализации.

Основу первой платформы составляет одноплатный реконфигурируемый вычислитель MEC5091 (форм-фактор PC-104) с оригинальным soft-процессором в FPGA, коммуникационным микроконтроллером и системой программирования. Вторая платформа, MiniLab, предоставляет пользователю возможности реконфигурирования и программирования на трех уровнях – от уровня аппаратуры (FPGA) до библиотек управления экспериментом в консольном персональном компьютере. Основу составляет параллельный процессор с оригинальной архитектурой NL3, конфигурируемый на уровне топологий функциональных блоков (DPU – Data Processing Unit) и программируемый на языке Java. Процессор NL3 сочетает в себе элементы суперскалярной и VLIW-архитектуры, основной обрабатывающей единицей выступает DPU – реализация функционального блока объектно-событийной модели вычислений [19].

Организация вычислений производится посредством статического и динамического конфигурирования композиции DPU, для чего была разработана инструментальная система, включающая графиче-

скую систему подготовки net-листов, компилятор на основе системы темпоральных неравенств, библиотеки функциональных блоков, design-time и run-time библиотеки драйверов DPU.

Простой вариант реконфигурации заключается в доставке программного обеспечения в конфигурационную память. Более глубокий вариант конфигурации состоит в замене самих DPU и изменении их количества. В рамках архитектурной модели системы реконфигурация затрагивает уровни виртуальных машин (ВМ), вычислительной платформы и прикладной задачи.

Примерами успешного использования элементов HLD-методологии являются перспективная «Платформа автоматизированного проектирования реконфигурируемых аппаратных ускорителей» и проект «Инфраструктурные IP-ядра реконфигурируемых СнК». Оба проекта направлены на поддержку проектирования реконфигурируемых СнК (РСнК) различного назначения.

В первом проекте [20] создан прототип платформы автоматизированного проектирования реконфигурируемых аппаратных ускорителей (РАУ) на основе архитектурного шаблона крупногранулярного РАУ, специального маршрута подготовки конфигураций и программ для системы с ускорителем. Основным рабочим элементом шаблона РАУ является двумерный массив операционных элементов (ОЭ), соединенных посредством иерархической конфигурируемой коммутационной среды между собой и с сервисным процессором. ОЭ, в свою очередь, имеют трехуровневую организацию и набор алгоритмов для быстрых приближенных вычислений. Маршрут проектирования и инструментальные средства обеспечивают выбор параметров аппаратуры РАУ, оптимальное отображение целевой задачи на массив ОЭ и сервисный процессор.

РАУ представляет собой пример системы, аппаратное реконфигурирование которой проходит на верхнем, прикладном уровне. Суть реконфигурирования состоит в соединении крупнозернистых вычислительных элементов друг с другом и в настройке операционных блоков внутри каждого функционального блока посредством списка цепей, который получен в результате анализа работы приложения.

Второй проект направлен на создание набора soft IP-ядер для организации в FPGA и РСнК коммуникационной среды уровня ФБ, отладочной и диагностической исполнительской (run-time) инфраструктуры. Проект находится в активной фазе [21].

Одним из перспективных сегментов использования принципов реконфигурируемости вычислительной архитектуры являются графические процессоры [22]. Под графическим процессором понимается полностью функционально завершенное и программируемое устройство для генерирования изображений, которое может работать по собственной метапрограмме, формируемой специальной программой-драйвером, исполняемой на одном или нескольких сопряженных центральных процессорах или центральных процессорных ядрах. Функциональность графического процессора и его API, определенных каким-либо стандартом (к примеру, OpenGL1/2/3/4.x, OpenCL, CUDA или D3D 9/10/11.x), как правило, связаны между собой, и поддержка тех или иных стандартов на аппаратном уровне средствами графического процессора является одной из ведущих характеристик изделия.

Специалистами коллектива разворачиваются работы по использованию HLD-методологии для анализа и проектирования элементов СнК и соответствующего программного обеспечения для реконфигурируемых сигнальных и графических процессоров.

В представленных проектах ВсС механизмы реконфигурирования вычислительной архитектуры решают различные задачи. Для вычислителя МЗМ – это обеспечение требуемого уровня надежности и безопасности функционирования в соответствии с отраслевыми стандартами. Для приборных контроллеров LIC-5091 и MiniLab – обеспечение гибкости прикладного программирования эксперимента с возможностью выбора соотношения «прикладная производительность/требуемая квалификация программиста». Для ускорителя РАУ приоритетным является достижение максимальной производительности за счет эффективного отображения прикладной задачи на реконфигурируемый массив вычислительных элементов с помощью разработанных алгоритмов отображения. На рис. 2 показано, что разработанный эвристический метод отображения, основанный на алгоритме «разделения и выталкивания» вершин графа (OPB), для РАУ превосходит известные методы отображения Dynamically Reconfigurable Embedded System Compiler (DRESC), Split Push Kernel Mapping (SPKM) и Quantum-inspired Evolutionary Algorithm (QEA). Эксперименты производились на тестовом наборе приложений для цифровой обработки сигналов DSPStone на массиве РАУ 5×5 32-разрядных вычислительных элементов, объединенных каналами передачи данных и конфигурационной сетью.

Поясним для рассмотренных РВсС глубину и уровни реализованной реконфигурируемости на примере. Упрощенно уровневую организацию ВсС представим совокупностью двух подсистем: вычислительного устройства и приложения. Вычислительное устройство состоит из набора специализированных аппаратных блоков (ФБ) и ФБ программируемого процессора (ВМ). На рис. 3 представлена модель уровней реконфигурируемости в такой системе. Нижний уровень представляет собой платформу, верхний – исполняемое средствами платформы приложение. Изменения могут касаться приложения, состава ФБ, спецификации ВМ.

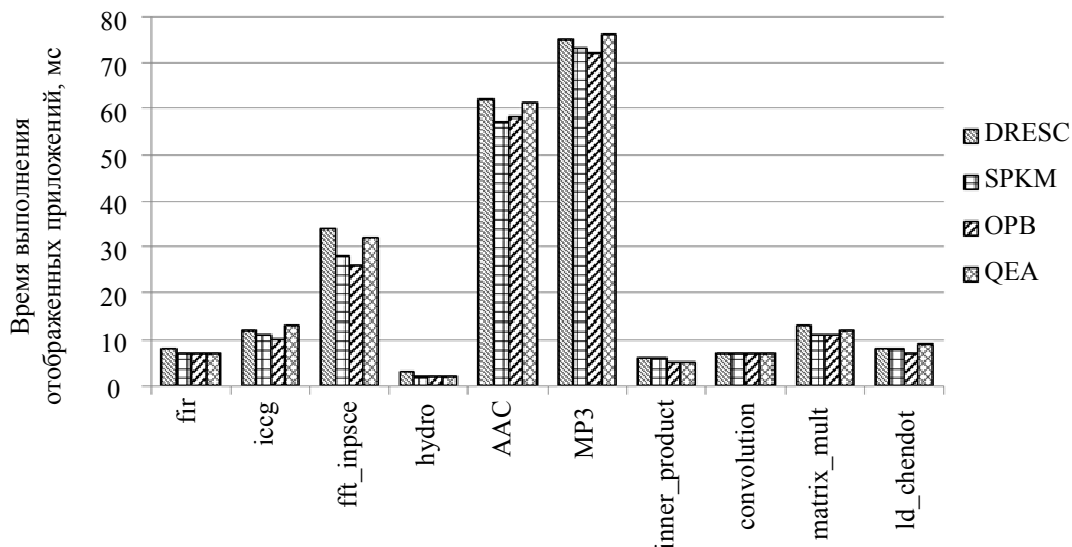


Рис. 2. Время выполнения приложений из тестового набора DSPStone на PAU. На оси абсцисс показаны названия приложений, входящих в тестовый набор DSPStone

Большинство реконфигурируемых систем работают в рамках верхнего, прикладного уровня. Проект реконфигурируемого аппаратного ускорителя, представленный выше, принадлежит к данной категории. Следующий вариант – реконфигурирование платформы (пример – вычислитель системы железнодорожной автоматизации МЗМ). Самый глубокий уровень реконфигурирования меняет средства организации прикладного уровня, т.е. ВМ (проекты LIC5091 и MiniLab). В системе MiniLab реконфигурирование реализовано на всех уровнях. Чем глубже уровень погружения, тем большее влияние он может оказать на все последующие уровни архитектуры и тем более фундаментальные изменения можно внести в результате реконфигурации в ВcC.

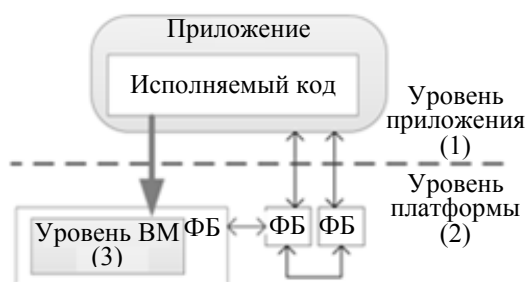


Рис. 3. Уровни вычислительной системы по степени «погружения»: приложение, платформа и виртуальная машина

На рис. 4 приведено сравнение РВсС из примеров по степени влияния реконфигурирования на ВП и на место вносимых изменений в рамках вертикальной архитектуры. Как мы видим, наибольшую гибкость и пространство решений обеспечивает система MiniLab. На втором месте оказывается МЗМ, на третьем – PAU.

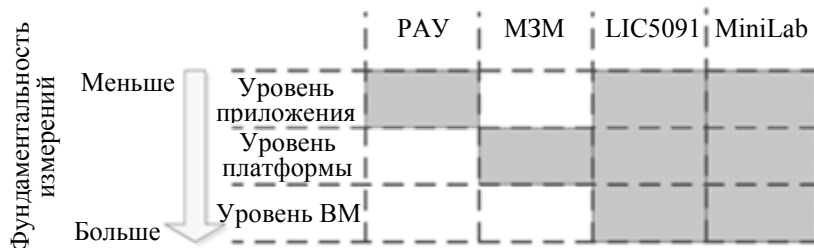


Рис. 4. Сравнение рассматриваемых примеров по уровню влияния изменений на вычислительный процесс и месту изменений в вертикальной архитектуре

В примере с упрощенной ВcC мы затронули случаи реконфигурирования только в пределах одного уровня ВМ, на практике ВcC представляют собой композиции ВМ и соответствующих платформ с элементами иерархии, что существенно расширяет границы и сложность процессов конфигурирования.

Заключение

Развитие HLD-методологии и практическое ее применение в проектировании реконфигурируемых встраиваемых систем различного назначения позволило решить целый ряд важных задач. Среди них в первую очередь следует отметить возросший уровень архитектурного и микроархитектурного проектирования, который позволил реализовать достаточно сложные проекты небольшим коллективам разработчиков в приемлемые сроки и с высоким качеством.

Разработанная HLD-методология позволяет на практике отказаться от шаблонного проектирования с изначальным закреплением аппаратной или аппаратно-программной платформы. Отказ от стандартных и шаблонных решений в проектировании ряда сложных встраиваемых систем позволил в большинстве случаев получить более эффективные, а значит, более конкурентоспособные продукты. Применение аспектного подхода позволило расширить пространство поиска проектных решений и улучшить учет требований заказчика, а также внутренних требований разработчиков на всех этапах проектирования.

Использование в проектах реконфигурируемых встраиваемых систем гетерогенных архитектур с необходимым количеством различных моделей вычислений позволило разработчикам успешно преодолеть в ряде случаев «взрыв сложности», преследующий разработчиков сложных гомогенных систем.

Коллектив развивает работы в контексте HLD-методологии в двух основных направлениях: создание архитектурных решений с широким использованием механизмов многоуровневого конфигурирования для применения в системах на кристалле и совершенствование системы архитектурного специфицирования с набором инструментальных утилит. На повестке стоит сложная и очень важная задача формализации различных этапов HLD-проектирования встраиваемых систем и создание инструментальных цепочек и технологий, позволяющих поддержать разработанную методологию проектирования.

Литература

1. Jozwiak L., Nedjah N. Modern architectures for embedded reconfigurable systems – a survey // *Journal of Circuits, Systems, and Computers*. 2009. V. 18. N 2. P. 209–254.
2. Chattopadhyay A. Ingredients of adaptability: a survey of reconfigurable processors // *User Modeling and User-Adapted Interaction*. 2013. V. 2013. Art. N 683615.
3. Hartenstein R. The relevance of reconfigurable computing / Eds J.M.P. Cardoso, M. Hübner. *Reconfigurable Computing*. Springer, 2011. P. 7–34.
4. Sangiovanni-Vincentelli A. Quo vadis, SLD? Reasoning about trends and challenges of system-level design // *Proceedings of the IEEE*. 2007. V. 95. N 3. P. 467–506.
5. Teich J. Hardware/Software codesign: the past, the present, and predicting the future // *Proceedings of the IEEE*. 2012. V. 100. P. 1411–1430.
6. Platonov A., Kustarev P. Problems of abstract representation of embedded systems at high-level stages design // *Proceedings of the 1st International Workshop - NESTER 2009 In Conjunction with ICINCO*. Milan, Italy, 2009, INSTICC PRESS. P. 100–107.
7. Jozwiak L., Nedjah N., Figueroa M. Modern development methods and tools for embedded reconfigurable systems: a survey // *Integration, the VLSI journal*. 2010. V. 43. N 1. P. 1–33.
8. НИУ ИТМО, кафедра ВТ, научно-образовательное направление «Встроенные вычислительные системы» [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://embedded.ifmo.ru>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 03.04.2014).
9. Научно-производственная фирма «ЛИМТ» [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://lmt.ifmo.ru>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 04.04.2014).
10. Platonov A., Nickolaenkov A., Penskoj A. Architectural representation of embedded systems // *Proc. of Mediterranean Conference on Embedded Computing, MECO 2012*. Montenegro, 2012. P. 80–83.
11. Platonov A., Nickolaenkov A. Aspects in the design of software-intensive systems // *Proc. of Mediterranean Conference on Embedded Computing, MECO 2012*. Montenegro, 2012. P. 84–87.
12. Платунов А.Е., Постников Н.П. Перспективы формализации методов проектирования встроенных систем // *Электронные компоненты*. 2005. № 1. С. 24–29.
13. ISO/IEC/IEEE 42010:2011, Systems and software engineering – Architecture description. 24.11.2011. Geneva, International Organization for Standardization. 37 p.
14. Lee E.A., Neuendorffer S., Wirthlin M.J. Actor-oriented design of embedded hardware and software systems // *Journal of Circuits, Systems, and Computers*. 2003. V. 12. N 3. P. 231–260.
15. Broman D., Lee E.A., Tripakis S., Toengren M. Viewpoints, formalisms, languages, and tools for cyber-physical systems // *Proc. of 6th International Workshop on Multi-Paradigm Modeling, MPM 2012*. Innsbruck, Austria, 2012. P. 49–54.
16. Becker J., Hartenstein R. Configware and morphware going mainstream // *Journal of Systems Architecture*. 2003. V. 49. P. 127–142.

17. Гавриков В.О., Платунов А.Е., Никифоров Н.Л. Комплекс технических средств для систем железнодорожной автоматики // Автоматика, телемеханика и связь на железных дорогах. 1998. № 11. С. 5–10.
18. Голубок А.О., Платунов А.Е., Сапожников И.Д. Система управления сканирующим зондовым микроскопом // Научное приборостроение. 2003. Т. 13. № 3. С. 25–31.
19. Болгаров И.С., Маковецкая Н.А., Платунов А.Е., Постников Н.П. Проектирование приборных контроллеров // Изв. вузов. Приборостроение. 2012. Т. 55. № 10. С. 73–78.
20. Румянцев А.С. Организация и инструментальные средства реконфигурируемых вычислительных систем // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2012. № 4 (80). С. 79–84.
21. Университет ИТМО, факультет КТиУ, кафедра вычислительной техники, научно-образовательное направление «Системы на кристалле» [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://soc.ifmo.ru>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 03.03.2014).
22. Paltashev T. New graphics API and GPU hardware architecture co-development / In: Graphicon 2005 proceedings [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.graphicon.ru/2005/proceedings/papers/Paltashev.pdf>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 03.03.2014).

<i>Ключев Аркадий Олегович</i>	– кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, kluchev@lmt.ifmo.ru
<i>Кустарев Павел Валерьевич</i>	– кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, kustarev@lmt.ifmo.ru
<i>Палташев Тимур Турсунович</i>	– доктор технических наук, профессор, профессор, Фримонт, Калифорния, США, Северо-Западный политехнический университет; старший менеджер, АМД, Калифорния, США, Timour.Paltashev@amd.com
<i>Платунов Алексей Евгеньевич</i>	– доктор технических наук, профессор, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, platonov@lmt.ifmo.ru
<i>Arkady O. Kluchev</i>	PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, kluchev@lmt.ifmo.ru
<i>Pavel V. Kustarev</i>	PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, kustarev@lmt.ifmo.ru
<i>Timur T. Paltashev</i>	D.Sc., Professor, Professor, Northwestern Polytechnic University, Fremont, California, USA; Senior Manager, Advanced Micro Devices (AMD), California, USA, Timour.Paltashev@amd.com
<i>Alexei E. Platonov</i>	D.Sc., Professor, Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, platonov@lmt.ifmo.ru

*Принято к печати 14.03.14
Accepted 14.03.14*

УДК 519.688

ТЕХНОЛОГИЯ СИНТЕЗА ЕСТЕСТВЕННОЙ РЕЧИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БАЗЫ ДАННЫХ НЕБОЛЬШОГО ОБЪЕМА

П.Г. Чистиков^а, А.О. Таланов^б, Д.С. Захаров^{а,б}, А.И. Соломенник^с

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, chistikov@speechpro.com

^б ООО «ЦРТ», Санкт-Петербург, Россия

^с ООО «Речевые технологии», Минск, Беларусь

Аннотация. Представлен подход к созданию голоса для системы синтеза естественной речи в условиях малого объема исходного речевого материала. Эффективное решение данной проблемы необходимо для задачи восстановления голоса (синтез потерянных фрагментов записи на основе доступного материала известного диктора, например актера). Представленная система синтеза речи является гибридной, так как комбинирует достоинства систем, основанных на скрытых марковских моделях и методе Unit Selection. Подход, описанный в работе, использует статистические модели интонационных параметров, что позволяет сохранять в синтезированной речи особенности произношения диктора. Описан процесс подготовки базы данных для синтеза, в том числе и решение проблемы нехватки исходного речевого материала для обучения модели. Специальные алгоритмы конкатенации и модификации звуковых элементов помогают корректировать их параметры в соответствии с требованиями, обеспечивают общую тональную гладкость и уменьшают искажения в спектральной области на границах объединяемых фрагментов. Аудитивные тесты показали эффективность предложенных решений и доказали, что синтез естественной речи возможен даже в условиях малой речевой базы (вплоть до одного часа речи).

Ключевые слова: синтез речи, восстановление голоса, скрытые марковские модели, метод Unit Selection, модификация речи.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

METHOD OF HIGH-QUALITY SPEECH SYNTHESIS WITH A SMALL DATABASE USAGE

P.G. Chistikov^а, A.O. Talanov^б, D.S. Zakharov^{а,б}, A.I. Solomennik^с

^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, chistikov@speechpro.com

^б Speech Technology Center Ltd., Saint Petersburg, Russia

^с Speech Technology Ltd., Minsk, Belarus

Abstract. We propose an approach to synthesizing high-quality speech in view of a small initial speech database. A robust method for solving this problem is vital for voice restoration (recovery of the lost fragments of recordings based on available speech material of a well-known person, e.g. an actor). The proposed TTS (text-to-speech) system is a hybrid one that combines the advantages of both HMM- and Unit Selection-based TTS systems. The paper deals with the approach based on statistical models of intonation parameters, which makes it possible to preserve the speaker's pronunciation in synthesized speech. We describe the preparation of the database and the solution to the problem of shortage of original speech material for model training. Special algorithms of speech element concatenation and modification are effective to correct parameters according to the requirements, provide overall tonal smoothness and reduce spectral distortion at the boundaries of concatenated elements. Listening tests showed the efficiency of the proposed methods and proved the possibility of high-quality speech synthesis even with a small speech database (right up to one hour of speech).

Keywords: speech synthesis, voice restoration, hidden Markov models, Unit Selection, speech modification.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation, Grant 074-U01.

Введение

В последнее время, благодаря активному проведению исследований, технология синтеза речи серьезно продвинулась вперед. В результате синтезированная речь сейчас воспринимается естественно, и мы можем услышать ее во многих местах. Самым популярным подходом для достижения высокого качества синтезированной речи является метод Unit Selection [1, 2]. Системы синтеза речи (Text to Speech – TTS), основанные на скрытых марковских моделях (СММ), звучат хуже, более «механически» из-за посторонних призвуков, таких как жужжание, звон [3]. Но платой за хорошее качество является необходимость наличия большой речевой базы (примерно 10 часов звукозаписей) [2, 4]. Усугубляет положение то, что каждый звуковой файл в базе данных должен быть размечен с высокой точностью. Это увеличивает стоимость и временные затраты на ее подготовку [2]. TTS-системы могут быть использованы для контакт-центров, чтения аудиокниг, систем голосовой помощи. В данных областях не принципиально, чей голос используется. Более приоритетными являются качество синтезированной речи и общие впечатления от голоса.

Несмотря на вышесказанное, существуют некоторые сферы, где очень важна специфичность голоса. В качестве примеров можно назвать клонирование голоса и восстановление голоса, т.е. воссоздание потерянных фрагментов записи на основе доступного речевого материала хорошо известной личности (актера, диктора). Сложность этой задачи заключается, главным образом, в небольшом количестве дос-

тупного речевого материала. К тому же существующие записи диктора зачастую акустически различны: они могут быть сделаны с разных микрофонов, в совершенно различных условиях и в течение большого периода времени. По этой причине удастся накопить лишь небольшую речевую базу с материалом достаточно хорошего для TTS качества.

Существует ряд исследований, посвященных синтезу речи в условиях недостаточного количества речевого материала [5–8]. Все они основаны на речевой базе неопределенного диктора и последующем получении целевого голоса с помощью адаптационных техник, приложенных к элементам речи или акустическим моделям, в качестве которых обычно используются СММ. Оба этих подхода генерируют недостаточно естественную речь из-за дополнительных эффектов, возникающих в результате применения адаптации в акустической области. Для решения этой проблемы предложена гибридная TTS-система [9], в которой интонация целевого диктора моделируется на основе речевой базы другого диктора путем применения методов адаптации. Синтез речи выполняется по речевой базе целевого диктора с применением методов Unit Selection и с использованием специальных методов модификации и конкатенации элементов речи. Это позволяет реализовывать синтез естественной речи даже с использованием малой речевой базы (вплоть до одного часа речи), что подтверждается результатами аудитивных тестов.

Описание гибридной системы синтеза речи

Структурно TTS можно разделить на две части: часть подготовки речевой базы и часть непосредственно синтеза речи (рис. 1). Основное назначение первой состоит в подготовке базы речевых элементов и создании модели целевого голоса на базе параметров речи диктора-донора.

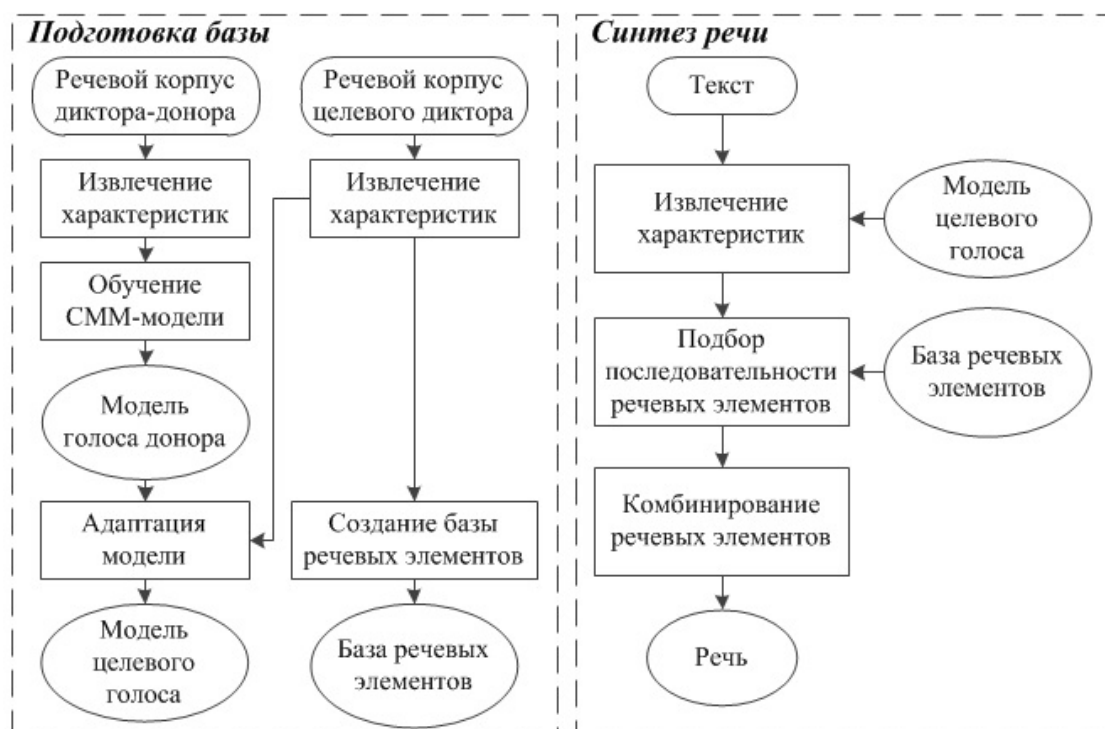


Рис. 1. Структура гибридной системы синтеза речи

Исходными данными для этапа подготовки служат два речевых корпуса (размеченные речевые базы данных): корпус диктора-донора, содержащий 8–10 часов речи, для обучения интонационной модели и корпус целевого диктора для подготовки базы речевых элементов. Каждый из них содержит набор звуковых файлов (каждый файл – одно записанное предложение) и набор меток для каждого файла. Эти метки содержат информацию об элементах речи [10–12], их лингвистические и акустические характеристики [9–14], вычисленные для двух корпусов. В первую очередь происходит обучение речевой модели целевого диктора. Эта модель является набором СММ, которые генерируют параметры речевых элементов для различного контекста. В качестве параметров используются мел-частотные кепстральные коэффициенты (Mel Frequency Cepstral Coefficients – MFCC), основной тон (ОТ), энергия и длительность сигнала. Более подробно создание модели голоса целевого диктора описывается в следующем разделе. Одновременно с обучением из речевого материала целевого диктора создается речевая база для синтеза. Она содержит проиндексированный набор элементов для выполнения быстрого поиска по необходимым признакам: имя фонемы, имена соседних фонем, MFCC на границах элементов, энергия, ОТ, длительность.

Синтез речи происходит путем выбора из речевой базы элементов в соответствии с моделью голоса диктора и последующего их объединения. На вход системы подается текст без какой-либо предварительной обработки. Из него формируется последовательность аллофонов, а также лингвистические и просодические параметры для каждого из них. С использованием этой информации и моделей голоса для каждого аллофона генерируются акустические параметры – MFCC, OT, энергия и длительность. Далее на основании этих параметров по методу Unit Selection [4] из базы выбирается последовательность наиболее подходящих звуковых элементов.

Подобранные элементы должны быть модифицированы в соответствии с предсказанными параметрами и объединены в единый звуковой поток. Эти финальные шаги очень важны с учетом малого объема материала целевого диктора. В таких условиях наиболее вероятна ситуация, когда невозможно найти в базе речевой элемент, соответствующий моделируемым параметрам. Для обеспечения нужной интонации и общей гладкости синтезированной речи необходимо применение специальных подходов, описанных ниже в разделе «Модификации речевых элементов».

Моделирование интонации

Моделирование интонационных параметров начинается с извлечения ряда характеристик из звукового файла. Для этого исходный сигнал разбивается на короткие участки (кадры) длительностью по 25 мс. Извлекаются следующие характеристики:

- последовательность $\{C_1, \dots, C_K\}$ MFCC-векторов [15]. Каждый вектор состоит из 25 коэффициентов и характеризует спектральное представление кадра. K – общее число кадров;
- последовательность $\{F0_1, \dots, F0_K\}$ значений OT;
- последовательность $\{E_1, \dots, E_K\}$ значений энергии.

После этого вычисляются лингвистические и просодические характеристики каждого аллофона для всех файлов обучающей базы данных [9, 14].

На следующем шаге создается СММ-прототип каждого аллофона речевой базы донора. Каждая СММ – однонаправленная (слева направо) без ветвлений, с числом состояний $N = 5$. Каждый выход наблюдаемого вектора \mathbf{o}^i для i -го кадра содержит 5 потоков $\mathbf{o}^i = [\mathbf{o}_1^{iT}, \mathbf{o}_2^{iT}, \mathbf{o}_3^{iT}, \mathbf{o}_4^{iT}, \mathbf{o}_5^{iT}]^T$. Их содержимое продемонстрировано на рис. 2. Поток 1 содержит вектор MFCC-коэффициентов, их первую и вторую производные (Δ MFCC и Δ^2 MFCC на рисунке). Поток 2 содержит вектор значений OT ($F0$), поток 3 содержит значения первой производной OT ($\Delta F0$), поток 4 – второй производной OT ($\Delta^2 F0$). Поток 5 содержит вектор значений энергии кадра E_n , его первой и второй производных (ΔE_n и $\Delta^2 E_n$ на рис. 2).

Для каждой k -й СММ длительность нахождения в N состояниях представляется в виде вектора $\mathbf{d}^k = [d_1^k, \dots, d_N^k]^T$, где d_n^k – длительность нахождения в n -ом состоянии. Кроме того, вектор длительности моделируется N -мерным гауссовым распределением. Далее выходные вероятности для состояний векторов длительностей переоцениваются с помощью алгоритма Баума–Уолша, тем же способом, что и вероятности параметров речи [15].



Рис. 2. Структура вектора наблюдения

На заключительном шаге интонационная модель диктора-донора адаптируется таким образом, чтобы быть максимально приближенной к параметрам целевого диктора. Адаптация выполняется с использованием процедуры, описанной в [16]. Во время построения модели к состояниям СММ для значений MFCC, F0, энергии и их производных применяется кластеризация, основанная на деревьях. Это же делается и для состояний модели длительности. При завершении процесса генерируется $5N + 1$ различных акустических деревьев решений: N – для MFCC-компонент и их первых и вторых производных, $3N$ – для значений OT, N – для характеристик энергии и одно дерево для состояний длительности. Выполне-

ние этого этапа дает возможность генерировать речевые параметры для элементов, отсутствующих в базе данных, и тем самым обеспечивать вывод необходимых параметров даже в условиях недостаточности обучающих данных. В итоге мы имеем интонационную модель целевого диктора, которая в дальнейшем будет использоваться для предсказания речевых параметров синтезируемых предложений.

Модификация речевых элементов

После того как из базы выбраны подходящие элементы, может потребоваться их модификация по длительности или ОТ согласно параметрам, предсказанным интонационной моделью. Этот шаг необходим для обеспечения свойственной диктору интонации в синтезируемом предложении. В описываемой системе используется модель линейного предсказания (Linear Prediction – LP) [17] для извлечения ошибки предсказания $e[n]$, ее модификации с помощью метода TD-PSOLA [17] и восстановления исходного сигнала с новым значением ОТ из модифицированной ошибки $e'[n]$.

Вычисление $e[n]$ происходит согласно следующему выражению:

$$e[n] = s[n] - \mathbf{a}^T \cdot \mathbf{s}'[n-1],$$

где $\mathbf{s}'[n-1] = [s[n-1], s[n-2], \dots, s[n-P]]^T$, $\mathbf{a} = [a_1, a_2, \dots, a_P]^T$, $P = 25$.

Вектор LP-коэффициентов вычисляется согласно выражению

$$\mathbf{a}_n = \mathbf{R}^{-1}[n-1] \cdot \mathbf{p}[n], \quad \mathbf{R}^{-1}[n-1] = \sum_{i=0}^n \mathbf{s}'[i-1] \cdot \mathbf{s}'^T[i-1], \quad \mathbf{p}[n] = \sum_{i=0}^n \mathbf{s}'[i-1] \cdot \mathbf{s}[i].$$

Значения $\mathbf{p}[n]$ могут быть вычислены рекурсивно, чтобы избежать больших вычислительных затрат: $\mathbf{p}[n] = \mathbf{s}[n-1] \cdot \mathbf{s}[n] + \mathbf{p}[n-1]$.

С использованием LP-коэффициентов, полученных в процессе анализа, LP-модель может применяться в процессе синтеза модифицированного сигнала $\mathbf{s}_m[n]$ с желаемой огибающей ОТ следующим образом: $\mathbf{s}_m[n] = e'[n] + \mathbf{a}^T \cdot \mathbf{s}_m[n-1]$. LP-модель определяется для каждого отсчета, что приводит к сглаживанию переходов между соседними моделями.

При условии, что границы периода ОТ $\mathbf{p}[n]$ определены метками $\mathbf{p}_m[n]$, огибающая ОТ может быть модифицирована желаемым образом. Для этого новые позиции меток $\mathbf{p}'_m[n]$ определяются в соответствии с новыми длительностями периодов ОТ $\mathbf{p}'[n]$, где $\mathbf{p}'[n] = \beta[n] \cdot \mathbf{p}[n]$, а $\beta[n]$ – коэффициент модификации периода ОТ. Значение этого коэффициента определяется в соответствии с требуемой просодической составляющей или при общей автоматической коррекции. Новая позиция метки ОТ $\mathbf{p}'_m[n]$ устанавливается путем вставки периода $\mathbf{p}'[n]$ между двумя последовательными метками. Таким образом, метка будет расположена на позиции $n + \mathbf{p}'[n]$, где n – предыдущая метка ОТ. На следующем шаге осуществляется связывание каждой новой метки $\mathbf{p}'_m[n]$ с ближайшим соответствующим пиком в оригинальном сигнале $\mathbf{p}_m[n]$. Это выполняется напрямую сравнением временных индексов $\mathbf{p}_m[n]$ и $\mathbf{p}'_m[n]$.

На последнем шаге генерации нового сигнала каждый пик в оригинальном сигнале взвешивается двумя полуокнами Хэннинга от предыдущей метки ОТ до текущей. Полученные сегменты складываются с перекрытием, в соответствии с рассчитанным ранее $\mathbf{p}'[n]$.

Конкатенация речевых элементов

На последнем шаге, когда элементы подобраны и откорректированы под желаемые интонационные параметры, они объединяются в единый звуковой поток. При этом решается проблема несовпадения спектра и ОТ на границах элементов. Для ее решения применяются алгоритмы оптимального объединения и сглаживания ОТ. Оптимальное объединение происходит путем коррекции границ элементов для минимизации спектрального искажения в позиции конкатенации. Этот процесс продемонстрирован на рис. 3. Пусть дифоны $a1_a2$ и $a2_a3$ были выбраны в качестве оптимальных. Оригинальная граница дифонов в исходном файле находится в точке B . Эта позиция сравнивается с соседними двумя – A и C , которые образованы сдвигом B на смещение Δ , обычно равное двум или трем периодам ОТ. Оптимальная позиция объединения речевых элементов P_{opt} рассчитывается согласно следующей формуле:

$$P_{opt} = \arg \min_{P \in \{A, B, C\}} L_2(P), \text{ где}$$

$$L_2(P) = \sqrt{\sum_{i=1}^M (c_{Li}(P) - c_{Ri}(P))^2}. \quad (1)$$

В формуле (1) $c_{Li}(P)$ – это i -й MFCC-коэффициент на границе P для левого дифона, а $c_{Ri}(P)$ – соответственно i -й MFCC-коэффициент на границе P для правого дифона. В данном случае используется 12 MFCC-коэффициентов.

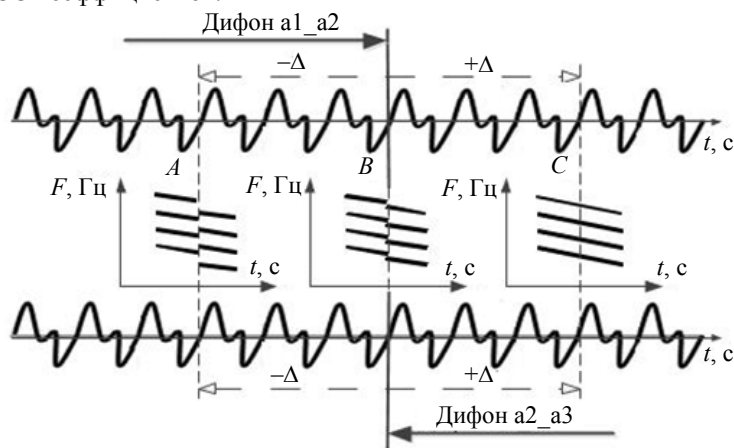


Рис. 3. Корректировка границ перед оптимальным объединением

Идея сглаживания основного тона на границе элементов состоит в том, чтобы, с одной стороны, устранить скачок огибающей ОТ, а с другой – сохранить локальные отклонения значений ОТ, чтобы речь не получилась слишком статичной.

Пусть $\mathbf{p}_L = \{p_{L1}, p_{L2}, \dots, p_{LN}\}$ – N значений длительностей периодов ОТ для левого элемента, а $\mathbf{p}_R = \{p_{R1}, p_{R2}, \dots, p_{RM}\}$ – M значений длительностей периодов ОТ для правого элемента. Вместе они образуют вектор огибающей ОТ $\mathbf{p} = \{p_{L1}, p_{L2}, \dots, p_{LN}, p_{R1}, p_{R2}, \dots, p_{RM}\}$, который должен быть сглажен. Результирующая огибающая $\mathbf{p}' = \{p'_1, p'_2, \dots, p'_{N+M}\}$ может быть рассчитана следующим образом.

В первую очередь огибающая \mathbf{p} разделяется на две составляющие – низкочастотная составляющая \mathbf{p}_m и высокочастотная \mathbf{p}_f , где $\mathbf{p}_m[i] = \alpha \cdot \mathbf{p}[i] + (1 - \alpha) \cdot \mathbf{p}_m[i - 1]$, а $\mathbf{p}_f = \mathbf{p} - \mathbf{p}_m$, $0 < \alpha < 1$. Затем \mathbf{p}_m сглаживается методом построения кривых Безье:

$$\mathbf{p}'_m[i] = \sum_{j=1}^{N+M} \mathbf{p}_m[j] \cdot b_{j-1, N+M-1} \left(\frac{i-1}{N+M-1} \right),$$

где $b_{i,n}(t) = C_i^n \cdot t^i \cdot (1-t)^{n-i}$, $C_i^n = \frac{n!}{i! \cdot (n-i)!}$. Результирующий вектор вычисляется как сумма сглаженной и высокочастотной составляющих: $\mathbf{p}' = \mathbf{p}'_m + \mathbf{p}'_f$.

Экспериментальные результаты

В данном разделе описываются эксперименты, выполненные с использованием алгоритмов оптимального объединения и сглаживания ОТ на границах элементов.

Рис. 4, а, иллюстрирует результат применения техники оптимального объединения элементов. Само место объединения отмечено вертикальной линией. Диаграмма вверху показывает спектр при объединении на изначально выбранной позиции элементов, нижний – после применения техники оптимального объединения. Отметим, что во втором случае спектр выглядит более естественно. На верхнем рисунке имеется обрыв спектральных пиков, чего нет на нижнем рисунке.

Результат сглаживания ОТ можно увидеть на рис. 4, б. Верхняя часть диаграммы показывает оригинальную огибающую ОТ, нижняя часть – модифицированную. Разрыв ОТ (отмеченный вертикальной линией) был сглажен с сохранением небольших отклонений на всей огибающей.

Чтобы оценить предложенную систему для различного размера речевых баз была проведена экспертная оценка MOS (Mean Opinion Score). Рассматривалось две составляющие: естественность и разборчивость речи. Критерии оценивания стандартны [18] и представлены в таблице. Результаты данной процедуры показаны на рис. 5.

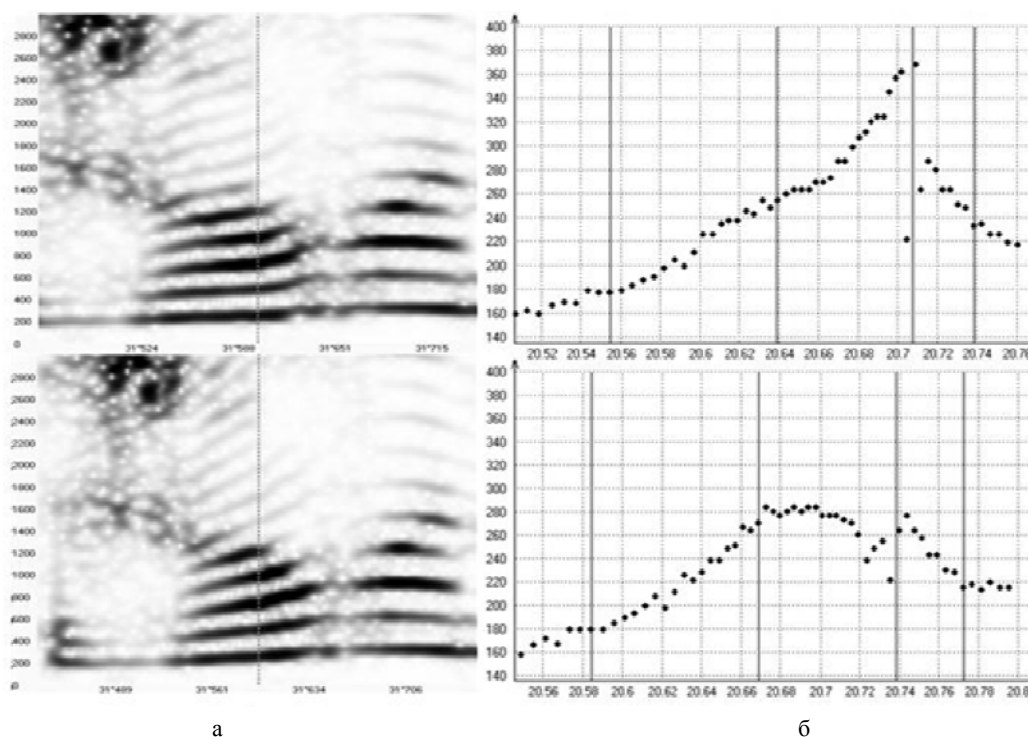


Рис. 4. Результат работы алгоритмов конкатенации элементов: фрагмент спектра на позиции конкатенации: сверху – без корректировки границы, снизу – с корректировкой (а); огибающая ОТ: сверху – без сглаживания, снизу – со сглаживанием (б)

Критерий естественности речи	Оценка	Критерий разборчивости речи	Оценка
Естественно звучащая речь, возможны небольшие искажения. Отсутствует хрип, треск. Высокая разборчивость	> 4,5	Полностью разборчивая речь	5
Небольшие недостатки естественности и разборчивости, слабое влияние одного типа искажений (шум, звон, хрип, др.)	3,6–4,5	Разборчивая речь, понимание без лишних усилий	4,6–4,9
Заметные нарушения естественности и разборчивости. Наличие нескольких типов искажений (шум, звон, хрип, др.)	2,6–3,5	Разборчивая речь, понимание с небольшими усилиями	3,6–4,5
Наличие постоянных искажений (шум, звон, хрип, др.). Значительные нарушения естественности и разборчивости	1,7–2,5	Почти разборчивая речь, понимание с усилиями	2,6–3,5
Сильные искажения: шум, звон, хрип, треск, механическое звучание голоса. Значительные нарушения естественности и разборчивости	< 1,7	Частично разборчивая речь, понимание со значительными усилиями	< 2,5

Таблица. Критерии оценки естественности и разборчивости речи

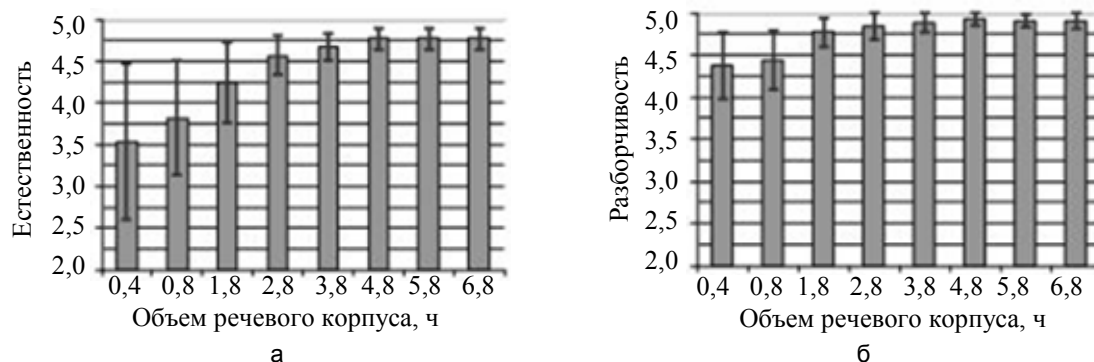


Рис. 5. Зависимость экспертной оценки естественности (а) и разборчивости (б) речи от объема базы

Заключение

В работе представлено описание системы синтеза естественной речи с использованием речевой базы небольшого объема. Основной целью являлось решение проблемы восстановления голоса, а также создание голоса в условиях сильного ограничения речевого материала. Задача была реализована с применением гибридного подхода (СММ-синтез плюс Unit Selection). Интонация целевого диктора моделируется по речевой базе другого диктора, к которой применялись технологии адаптации речевых характеристик, а выбираемые в процессе синтеза элементы речи изменялись в соответствии с предсказанными параметрами с применением специальных техник модификации и конкатенации. Экспериментальные результаты и субъективные экспертные оценки показали эффективность этого подхода и возможность синтеза высококачественной естественной речи даже в условиях малого количества исходных записей речи. Более того, предложенный подход уменьшает требования к предварительной разметке речевой базы и позволяет улучшить качество синтезированной речи.

Литература

1. Breuer S., Bergmann S., Dragon R., Möller S. Set-up of a unit-selection synthesis with a prominent voice // Proc. 5th International conference on Language Resources and Evaluation. Genoa, 2006. P. 293–296.
2. Matoušek J., Tihelka D., Šmídl L. On the impact of annotation errors on unit-selection speech synthesis // Lecture Notes in Computer Science. 2012. V. 7499. P. 456–463.
3. Yamagishi J., Zen H., Toda T., Tokuda K. Speaker-independent HMM-based speech synthesis system – HTS-2007 system for the blizzard challenge 2007 // Proc. Blizzard Challenge-2007. Bonn, Germany, 2007. P. 1–6.
4. Hunt A.J., Black A.W. Unit selection in a concatenative speech synthesis using a large speech database // Proc. IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, ICASSP 96. Atlanta, USA, 1996. V. 1. P. 373–376.
5. Phung T.-N., Mai C.L., Akagi M. A concatenative speech synthesis for monosyllabic languages with limited data // Signal and Information Processing Association Annual Summit and Conference, APSIPA ASC 2012. Hollywood, US, 2012. P. 1–10.
6. Meng F., Wu Z., Meng H., Jia J., Cai L. Hierarchical english emphatic speech synthesis based on HMM with limited training data // Proc. 13th Annual Conference of the International Speech Communication Association, InterSpeech 2012. Portland, US, 2012. V. 1. P. 466–469.
7. Tsuzuki R., Zen H., Tokuda K., Kitamura T., Bulut M., Narayanan S. Constructing emotional speech synthesizers with limited speech database // Proc. INTERSPEECH 2004-ICSLP. Jeju Island, Korea, 2004. P. 1185–1188.
8. Phung T. N., Luong M. C., Akagi M. A hybrid TTS between unit selection and HMM-based TTS under limited data conditions // Proc. 8th ISCA Speech Synthesis Workshop. Barcelona, Spain, 2013. P. 279–284.
9. Chistikov P.G., Korolkov E.A., Talanov A.O. Combining HMM and unit selection technologies to increase naturalness of synthesized speech // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии. 2013. № 12-2. С. 2–10.
10. Чистиков П.Г., Корольков Е.А., Таланов А.О., Соломенник А.И. Гибридная технология синтеза речи на основе скрытых марковских моделей и алгоритма Unit Selection // Изв. вузов. Приборостроение. 2013. Т. 56. № 2. С. 33–38.
11. Соломенник А.И., Таланов А.О., Соломенник М.В., Хомицевич О.Г., Чистиков П.Г. Оценки качества синтезированной речи: проблемы и решения // Изв. вузов. Приборостроение. 2013. Т. 56. № 2. С. 38–42.
12. Чистиков П.Г., Хомицевич О.Г., Рыбин С.В. Статистические методы автоматического определения мест и длительности пауз в системах синтеза речи // Изв. вузов. Приборостроение. 2014. Т. 57. № 2. С. 28–32.
13. Chistikov P.G., Korolkov E.A. Data-driven speech parameter generation for Russian text-to-speech system // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии. 2012. № 11. С. 103–111.
14. Chistikov P., Khomitsevich O. Improving prosodic break detection in a Russian TTS system // Proc. of the 15th International Conference on Speech and Computer, SPECOM 2013. Pilsen, Czech Republic, 2013. V. 8113. P. 181–188.
15. Zen H., Tokuda K., Masuko T., Kobayashi T., Kitamura T. A hidden semi-Markov model-based speech synthesis // IEICE Transactions on Information and Systems. 2007. V. E90-D. P. 825–834.
16. Yamagishi J., Kobayashi T. Adaptive training for hidden semi-Markov model // Proc. IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, ICASSP'05. Philadelphia, US, 2005. V. 1. Art. N 1415126. P. I365–I368.
17. Taylor P. Text-to-Speech Synthesis. Cambridge University Press, 2009. 626 p.
18. ГОСТ Р 50840-95. Передача речи по трактам связи. Методы оценки качества, разборчивости и узнаваемости. Введ. 01.01.1997. М: Издательство стандартов, 1996. 234 с.

- Чистиков Павел Геннадьевич** – кандидат технических наук, научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, chistikov@speechpro.com
- Таланов Андрей Олегович** – кандидат технических наук, руководитель отдела синтеза речи, ООО «ЦРТ», Санкт-Петербург, Россия, andre@speechpro.com
- Захаров Дмитрий Сергеевич** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; младший научный сотрудник, ООО «ЦРТ», Санкт-Петербург, Россия, zakharov-d@speechpro.com
- Соломенник Анна Ивановна** – научный сотрудник, ООО «Речевые технологии», Минск, Беларусь, solomennik-a@speechpro.com
- Pavel G. Chistikov** – PhD, scientific researcher, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, chistikov@speechpro.com
- Andrey O. Talanov** – PhD, Head of the speech synthesis department, Speech Technology Center Ltd., Saint Petersburg, Russia, andre@speechpro.com
- Dmitry S. Zakharov** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; Junior researcher, Speech Technology Center Ltd., Saint Petersburg, Russia, zakharov-d@speechpro.com
- Anna I. Solomennik** – scientific researcher, Speech Technology Ltd., Minsk, Belarus, solomennik-a@speechpro.com

Принято к печати 12.05.14

Accepted 12.05.14

УДК 621.391.037.372

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КЛИППИРОВАННЫХ ФРАГМЕНТОВ В АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛАХ

С.В. Алейник^a, Ю.Н. Матвеев^{a, b}, А.В. Шолохов^c^a ООО «ЦРТ-Инновации», Санкт-Петербург, Россия^b Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, matveev@mail.ifmo.ru^c Университет Восточной Финляндии, Йоенсуу

Аннотация. Исследован способ определения клиппированных участков в акустических сигналах, обладающий лучшими характеристиками по сравнению с другими известными способами. Данный способ основан на построении гистограммы амплитуд анализируемого сигнала и вычислении расстояний между локальными максимумами гистограммы на ее хвостах и в центральной части. Отличие гистограмм неклиппированного и клиппированного сигналов заключается в том, что гистограмма неклиппированного сигнала имеет плавно спадающие хвосты, в то время как гистограмма клиппированного сигнала имеет на хвостах заметные и легко обнаруживаемые всплески. Величина данных всплесков и качество детектирования клиппированных фрагментов соответственно зависят от параметров исследуемого способа. Основной целью работы является нахождение оптимальных параметров исследуемого способа. Путем математического моделирования детально исследованы характеристики способа: построены плотности распределения целевой величины для различных длин анализируемого кадра сигнала, количества отсчетов в гистограмме и уровней клиппирования акустических сигналов. Показано, что при длине кадра в 6000–8000 отсчетов и количестве отсчетов в гистограмме, равном 200–300, достигается хорошее различие клиппированных и неклиппированных участков акустического сигнала. При этом порог разделения может варьироваться в пределах 0,45–0,55. Приведены примеры работы детектора клиппирования, основанного на исследованном способе, на реальных акустических сигналах при различных уровнях клиппирования.

Ключевые слова: акустический сигнал, клиппирование, коэффициент клиппирования.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

DETECTION OF CLIPPED FRAGMENTS IN ACOUSTIC SIGNALS

S.V. Aleinik^a, Yu.N. Matveev^{a, b}, A.V. Sholokhov^c^a STC-Innovation, Ltd., Saint Petersburg, Russia^b ITMO University, Saint Petersburg, Russia, matveev@mail.ifmo.ru^c University of Eastern Finland, Joensuu, Finland

The paper deals with investigation of the method for detecting clipped fragments in acoustic signals with better characteristics as compared with the other known methods. This method is based on the histogram construction for the analyzed signal amplitudes and calculating the distances between the local peaks of the histogram on its tails and in the central part. The difference between histograms of non-clipped and clipped signals is that the histogram of a non-clipped signal has smoothly decaying tails while the histogram of a clipped signal has visible and easily detectable outbursts on its tails. The value of these outbursts and consequently the quality of detection of clipped fragments depends on the parameters of the method under investigation. The main aim of this paper is finding the optimal parameters of the method. Characteristics of the method are studied in detail by mathematical modeling; density functions of target values for different lengths of a studied signal frame and the number of histogram counts and levels of clipping of acoustic signals are built. It is shown that good separation between clipped and non-clipped signal fragments of acoustic signals can be achieved for the frame length between 6000 and 8000 samples and the number of histogram bins between 200 and 300. In this case the threshold level for the best separation can vary between 0.45–0.55. Examples of clipping detector operation based on the proposed method and on real acoustic signals are shown for the case of different clipping levels.

Keywords: acoustic signal, clipping, clipping coefficient.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation, Grant 074-U01.

Введение

Клиппирование – один из видов искажения формы сигнала [1]. На осциллограмме клиппирование проявляется как обрезание сигнала по амплитуде [2]. При этом возможно одностороннее (обрезание «только сверху» или «только снизу») и двустороннее клиппирование. В цифровом сигнале клиппирование выглядит как группировка отсчетов сигнала около его максимального и минимального значений (мягкое клиппирование), либо они просто равны соответствующим максимальным и минимальным значениям (жесткое клиппирование) [2]. Математически процесс двустороннего жесткого клиппирования дискретного сигнала $x(k)$ можно записать следующим образом [2, 3]:

$$x_{cl}(k) = \begin{cases} x(k), & \text{if: } |x(k)| < A, \\ A * (x(k) / |x(k)|) & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (1)$$

где k – временной индекс; $x_{cl}(\cdot)$ – клиппированный сигнал; $|\cdot|$ – операция взятия модуля; A – порог клиппирования.

В случае мягкого клиппирования формула (1) неверна. Мягкое клиппирование может быть описано как воздействие на сигнал некоей нелинейной функции, например, сигмоидной:

$$x_{cl}(k) = A \left(\frac{2}{1 + e^{\beta x(k)}} - 1 \right), \quad (2)$$

где A и β – параметры функции: A – максимально возможная амплитуда; β – крутизна, характеризующая степень жесткости (чем больше β , тем ближе клиппирование к жесткому).

Например, типичный вид исходного неклиппированного и клиппированного (мягкое клиппирование) речевых сигналов для $A=20000$ и $\beta=0,00045$ представлен на рис. 1. Видно, что в случае мягкого клиппирования ограничение сигнала происходит более плавно, чем при жестком – нет резких изломов графика сигнала в районе максимальных и минимальных значений сигнала.

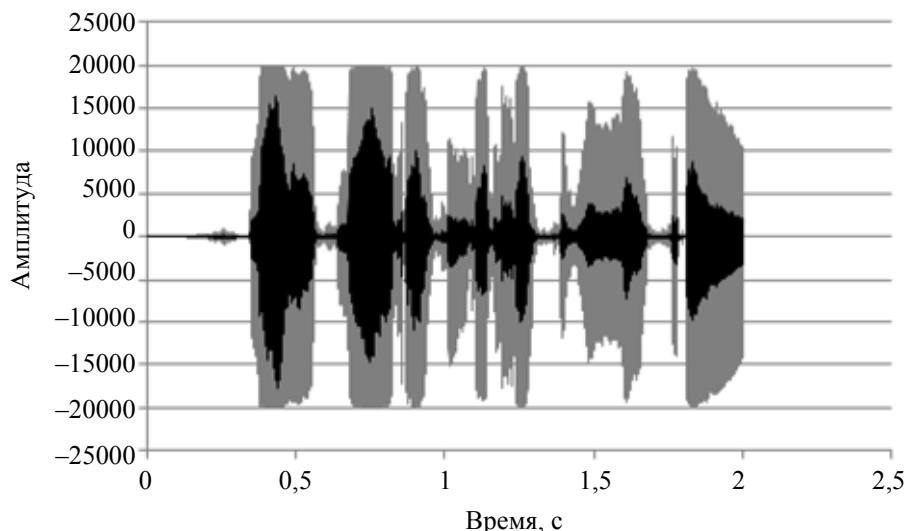


Рис. 1. Неклиппированный (черный цвет) и клиппированный (серый цвет) речевые сигналы для $A=20000$ и $\beta=0,00045$, мягкое клиппирование в соответствии с (2)

Если известен порог клиппирования A и мощность сигнала P_{sig} , то можно вычислить так называемое отношение клиппирования (clipping ratio, CR), служащее характеристикой того, насколько сильно клиппирован сигнал [1, 2]:

$$CR_{lin} = A / \sqrt{P_{sig}}, \quad (3)$$

$$CR_{dB} = 10 \log_{10}(A^2 / P_{sig}). \quad (4)$$

Однако в [2] отмечено, что в реальной жизни чаще всего порог клиппирования неизвестен, что делает невозможным использование формул (3) и (4) для оценки уровня клиппирования анализируемого сигнала.

Большинство исследований посвящено оценке уровня клиппирования узкого круга известных (например, OFDM [3–5], сейсмических [6], и пр.) сигналов; соответственно, при оценке требуемых характеристик используются присущие данным сигналам специфические свойства [2]. Некоторые алгоритмы используют знание исходного (неклиппированного) сигнала [7–9] и, следовательно, ориентированы скорее на оценку качества устройства обработки (усилителя и пр.), а не самого сигнала.

В работе [2] был исследован новый метод метода оценки уровня клиппирования речевого сигнала в случае, когда исходный неискаженный сигнал неизвестен, а параметры анализируемого сигнала (частота дискретизации, мощность, способ кодирования и т.п.) варьируются в широких пределах. Целью предлагаемой работы является дальнейшее детальное исследование метода [2], определение границ его применимости, а также определение оптимальных параметров метода.

Гистограммный метод оценки уровня клиппирования неизвестного сигнала

Гистограммный метод оценки уровня клиппирования неизвестного сигнала исследован в работах [2, 9, 10]. В данном методе строится и анализируется гистограмма обрабатываемого сигнала. Известно, что плотность распределения амплитуд неклиппированного речевого сигнала может быть достаточно хорошо аппроксимирована симметричными распределениями, такими как гамма-распределение или распределение Лапласа [11, 12]. Общий вид этих распределений – одномодовые, с плавно спадающими хвостами. В работе [2] приведена гистограмма жестко клиппированного сигнала, имеющая резкие всплески на хвостах. На рис. 2 приведена гистограмма клиппированного сигнала в случае мягкого клиппирования.

Видно, что в случае мягкого клиппирования гистограмма сигнала также имеет всплески на хвостах, но в данном случае всплески более «размазаны». Это свойство характерно не только для речевого, но для любых клиппированных сигналов.

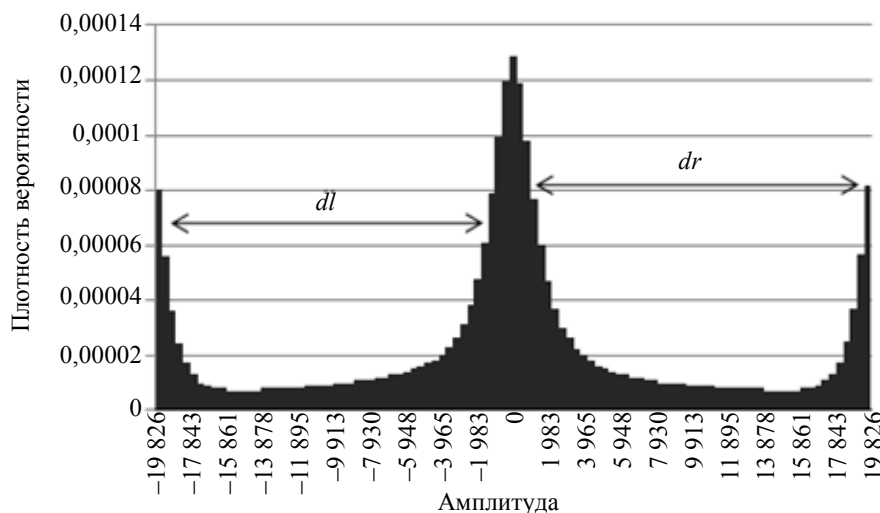


Рис. 2. Гистограмма значений амплитуды клиппированного речевого сигнала (мягкое клиппирование). Величины dl и dr – расстояния между локальными максимумами на хвостах и в области медианы гистограммы (см. Алгоритм 1)

Наши исследования [2] показали, что амплитуда всплесков и их количество варьируются в широких пределах, поэтому методы, основанные на замере данных показателей [9, 10], дают неустойчивые результаты.

Предложенный в [2] метод основан на вычислении и анализе расположения максимумов на оси X , что оказывается более робастным к типу и величине клиппирования, чем анализ амплитуд гистограммы.

Модифицированный алгоритм выглядит следующим образом.

Алгоритм 1. Вычисление коэффициента клиппирования.

- Вычислить гистограмму сигнала: $H(k)$, $k = 0, K-1$.
- Найти самый левый kl и самый правый kr индекс по оси X , где гистограмма не равна нулю.
- Вычислить $Denom = kr - kl$.
- Установить $yl_0 = H(kl)$; $yr_0 = H(kr)$; $dl = dr = 0$; $Dmax = 0$.
- Цикл: Пока $(kr > kl)$ выполнять:
 - увеличить: $kl = kl + 1$;
 - уменьшить: $kr = kr - 1$;
 - вычислить:
 - Если $H(kl) \leq yl_0$, то: $\{ dl = dl + 1; \}$
 - Иначе: $\{ yl_0 = H(kl); dl = 0; \}$
 - Если $H(kr) \leq yr_0$, то: $\{ dr = dr + 1; \}$
 - Иначе: $\{ yr_0 = H(kr); dr = 0; \}$
 - $Dmax = \max\{Dmax, dl, dr\}$.

- Вычислить коэффициент клиппирования: $Rcl = 2Dmax / Denom$.

Гистограмма рассчитывается по следующему алгоритму.

Алгоритм 2. Вычисление гистограммы.

Пусть $x(n)$, $n = 0, N-1$ – дискретный временной сигнал, K – количество отсчетов в гистограмме.

Тогда:

- для всех $n = 0, N-1$, найти минимальное $xmin$ и максимальное $xmax$ значения амплитуды сигнала;
- установить нулевые значения всех отсчетов гистограммы: $H(k) = 0$, $k = 0, K-1$;
- для всех $n = 0, N-1$ выполнить:
 - вычислить значение: $y = (x(n) - xmin) / (xmax - xmin)$;
 - вычислить индекс отсчета гистограммы: $k = (\text{int})\{Ky\}$;
 - увеличить значение отсчета гистограммы:
 - Если $k < N$, то: $H(k) = H(k) + 1$;
 - Иначе: $H(k-1) = H(k-1) + 1$.

Следует заметить, что в случае сильно клиппированного сигнала локальные максимумы на хвостах гистограммы оказываются больше центрального максимума. Тогда $dl = dr = 0,5 * (Max_Index - Min_Index)$, и, следовательно, $R = 1$.

Теоретические свойства коэффициента клиппирования R ($0 \leq R \leq 1$) подробно описаны в [2]. В настоящей работе авторы сконцентрировались на экспериментальных исследованиях поведения коэффициента клиппирования на различных сигналах и при различных параметрах.

Экспериментальные исследования предлагаемого коэффициента

Авторами проведены детальные исследования плотностей распределения коэффициента R для разных уровней клиппирования сигнала и различных параметров алгоритма, а именно, варьировались длина кадра N и количество отсчетов в гистограмме K . Результаты экспериментов по определению плотности распределения коэффициента R для различного количества K отсчетов в гистограмме приведены на рис. 3 (неклиппированный сигнал) и рис. 4 (клиппированный 50% сигнал).

Объединенные кривые для клиппированного и неклиппированного сигналов изображены на рис. 5. Анализ рис. 5 показывает, что установка порога обнаружения в пределах 0,45–0,55 позволяет достаточно хорошо разделять клиппированный и неклиппированный сигналы.

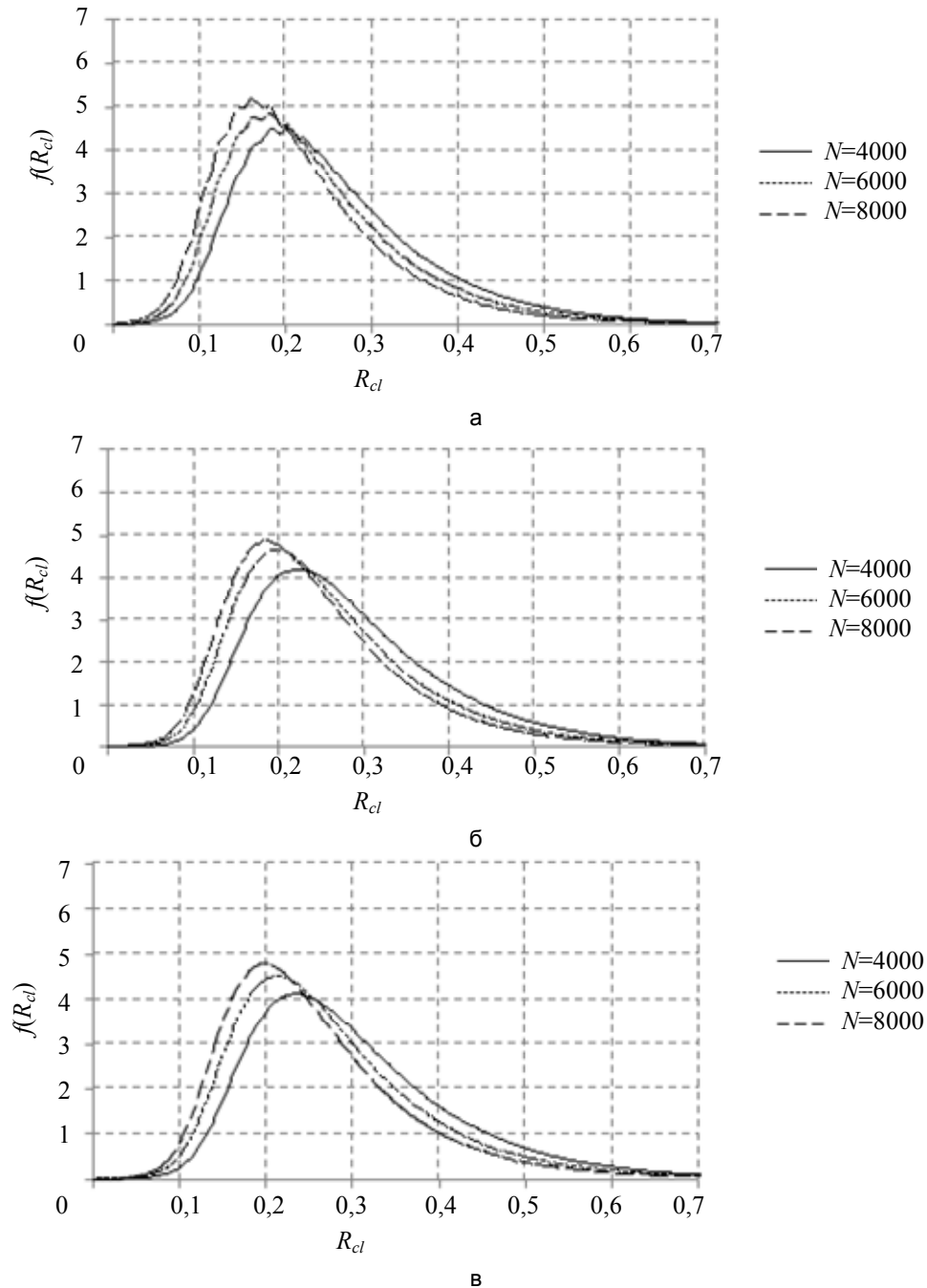


Рис. 3. Плотность распределения f коэффициента клиппирования R_{cl} для различного количества отсчетов в гистограмме K для неклиппированного речевого сигнала: $K = 101$ (а); $K = 201$ (б); $K = 301$ (в)

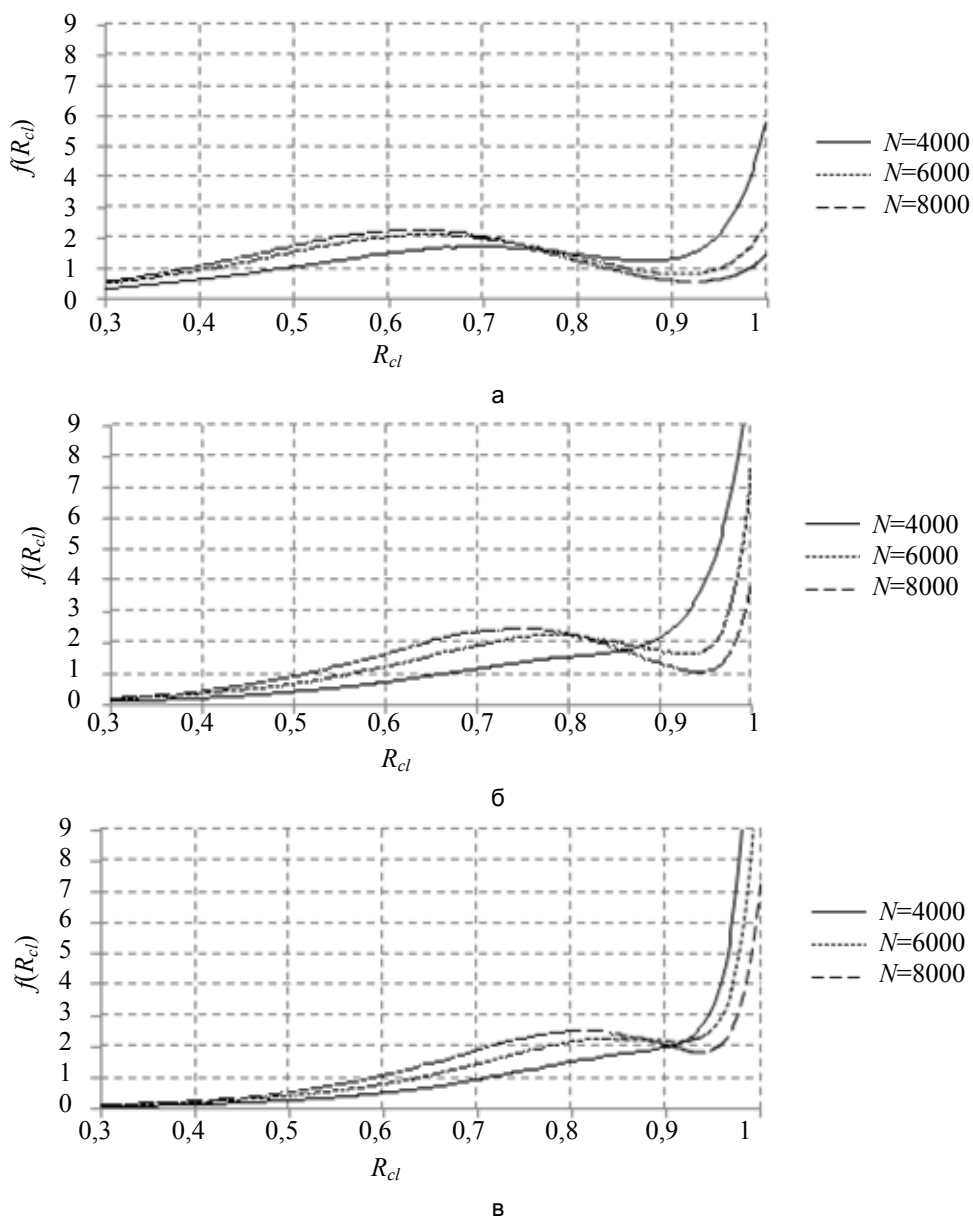


Рис. 4. Плотность распределения f коэффициента клиппирования R_{cl} для различного количества отсчетов в гистограмме K для клиппированного (50%) речевого сигнала: $K = 101$ (а); $K = 201$ (б); $K = 301$ (в)

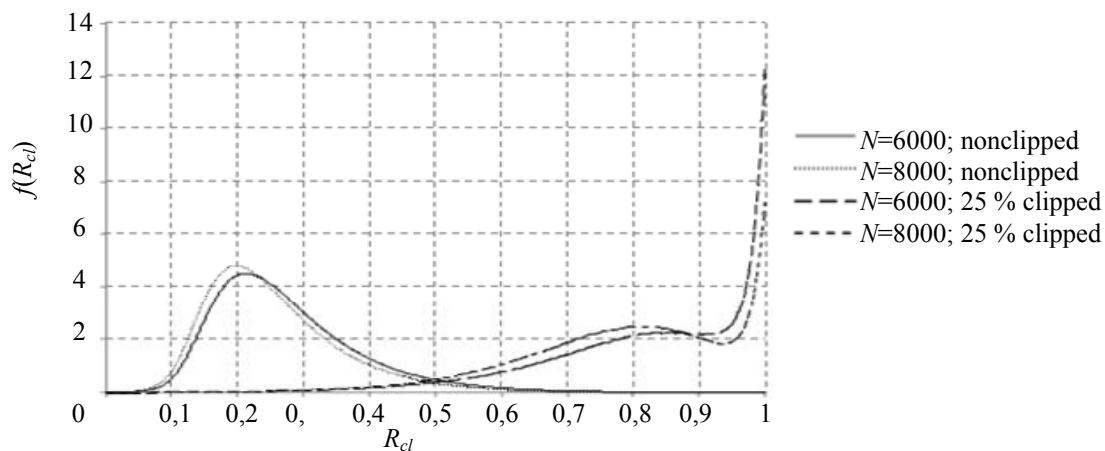


Рис. 5. Плотность распределения коэффициента клиппирования R для $K=31$ в случаях неклиппированного и клиппированного (25%) речевых сигналов

Примеры обработки речевых сигналов

Примеры обработки реальных речевых сигналов изображены на рис. 6–8. Из этих рисунков видно, что порог, равный 0,55, позволяет полностью разделить неклипированные и клипированные участки сигнала.

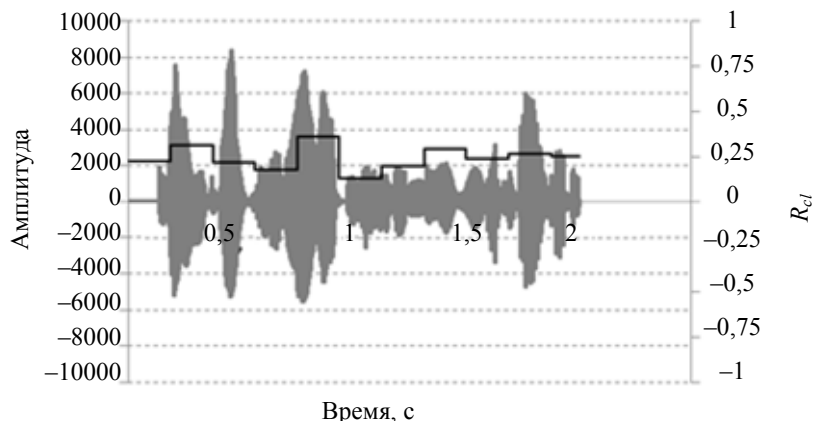


Рис. 6. Осциллограммы речевого сигнала (серый цвет) и соответствующего коэффициента R (черный цвет, шкала значений коэффициента – справа); неклипированный сигнал

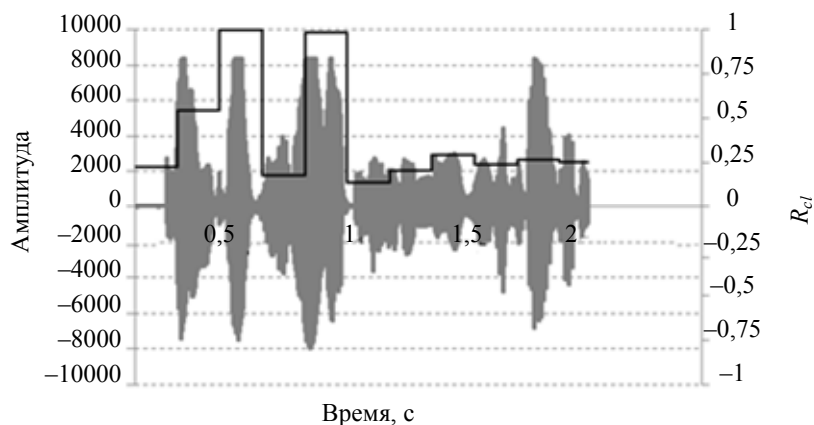


Рис. 7. Осциллограммы речевого сигнала (серый цвет) и соответствующего коэффициента R (черный цвет, шкала значений коэффициента – справа); коэффициент клипирования 25%

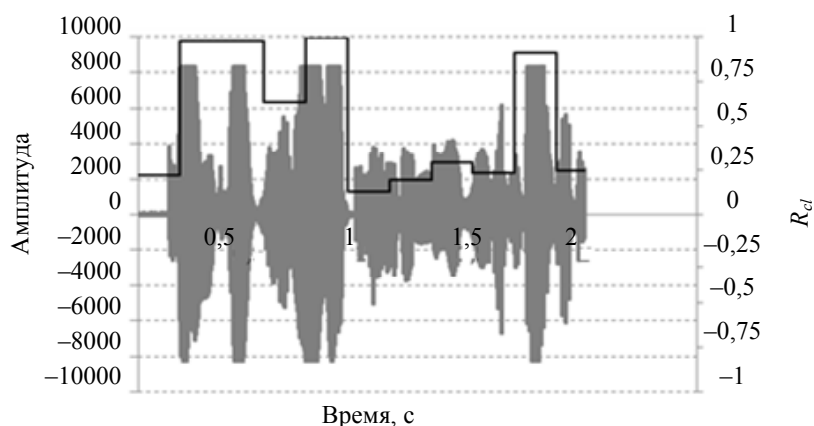


Рис. 8. Осциллограммы речевого сигнала (серый цвет) и соответствующего коэффициента R (черный цвет, шкала значений коэффициента – справа); коэффициент клипирования 50%

Заключение

Проведенные теоретические и экспериментальные исследования показали работоспособность предложенного метода детектирования клипированных фрагментов акустического сигнала и позволили определить его оптимальные параметры. Предложенный метод детектирования клипированных участ-

ков успешно используется в системах верификации и идентификации личностей по голосу, описанных в работах [13–16]. Следует, однако, указать, что описанный метод имеет определенные ограничения.

1. Резкое увеличение коэффициента клиппирования до величин, близких к единице, в случае, когда более 50% сигнала клиппировано, делает его более подходящим для задачи обнаружения факта клиппирования, чем для задачи измерения уровня клиппирования.
2. Необходимо помнить, что на простых гармонических сигналах метод дает значение, близкое к 1, даже при отсутствии клиппирования.
3. Исследования показали, что метод может давать завышенные оценки в случае, когда анализируемый кадр речевого сигнала содержит значительное количество нулевых отсчетов.

Литература

1. Алейник С.В., Симончик К.К. Алгоритмы выделения типовых помех и искажений в речевых сигналах // Изв. вузов. Приборостроение. 2013. Т. 56. № 2. С. 18–24.
2. Алейник С.В., Матвеев Ю.Н., Раев А.Н. Метод оценки уровня клиппирования речевых сигналов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2012. № 3 (79). С. 79–83.
3. Chen H., Haimovich A.M. An iterative method to restore the performance of clipped and filtered OFDM signals // IEEE International Conference on Communications. 2003. V. 5. P. 3438–3442.
4. Zhidkov S.V. Detection of clipped code-division multiplexed signals // Electronics Letters. 2005. V. 41. N 25. P. 33–34.
5. Zillmann P., Rave W., Fettweis G. Soft detection and decoding of clipped and filtered COFDM signals // Proc. IEEE Vehicular Technology Conference. 2007. P. 1598–1602.
6. Yang W., Ben-Zion Y. An algorithm for detecting clipped waveforms and suggested correction procedures // Seismological Research Letters. 2010. V. 81. N 1. P. 53–62.
7. Kim J. Method and apparatus for evaluating audio distortion. Patent US 5402495, 1995.
8. Riemer T.E., Weiss M.S., Losh M.W. Discrete clipping detection by use of a signal matched exponentially weighted differentiator // Proc. IEEE Southeastcon. New Orleans, USA, 1990. P. 245–248.
9. Otani T., Tanaka M., Ota Y., Ito S. Clipping detection device and method. Patent US 20100030555, 2010.
10. Liu X., Jia J., Cai L. SNR estimation for clipped audio based amplitude distribution // Proc. International Conference on Natural Computation (ICNC). Shenyang, China, 2013. P. 1434–1438.
11. Rabiner L.R., Schafer R.W. Introduction to Digital Speech Processing. Hanover, NOWPress, 2007. 194 p.
12. Матвеев Ю.Н. Оценка доверительного интервала общего решения ансамбля классификаторов // Изв. вузов. Приборостроение. 2013. Т. 56. № 2. С. 74–79.
13. Матвеев Ю.Н., Симончик К.К. Система идентификации дикторов по голосу для конкурса NIST SRE 2010 // Труды 20 Международной конференции по компьютерной графике и зрению ГрафиКон'2010. Санкт-Петербург, 2010. С. 315–319.
14. Белых И.Н., Капустин А.И., Козлов А.В., Лоханова А.И., Матвеев Ю.Н., Пеховский Т.С., Симончик К.К., Шулипа А.К. Система идентификации дикторов по голосу для конкурса NIST SRE 2010 // Информатика и ее применение. 2012. Т. 6. № 1. С. 91–98.
15. Козлов А.В., Кудашев О.Ю., Матвеев Ю.Н., Пеховский Т.С., Симончик К.К., Шулипа А.К. Система идентификации дикторов по голосу для конкурса NIST SRE 2012 // Труды СПИИРАН. 2013. № 2 (25). С. 350–370.
16. Kozlov A., Kudashev O., Matveev Y., Pekhovsky T., Simonchik K., Shulipa A. SVID speaker recognition system for the NIST SRE 2012 // Lecture Notes in Computer Science. 2013. V. 8113 LNAI. P. 278–285.

- Алейник Сергей Владимирович** – научный сотрудник, ООО «ЦРТ-Инновации», Санкт-Петербург, Россия, aleinik@speechpro.com
- Матвеев Юрий Николаевич** – доктор технических наук, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; главный научный сотрудник, ООО «ЦРТ-инновации», Санкт-Петербург, Россия, matveev@mail.ifmo.ru
- Шолохов Алексей Владимирович** – аспирант, Университет Восточной Финляндии, Йоенсуу, Финляндия, sholokhovalexey@gmail.com
- Sergei A. Aleinik** – research scientist, STC-Innovation, Ltd., Saint Petersburg, Russia, aleinik@speechpro.com
- Yuri N. Matveev** – D.Sc., Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, matveev@mail.ifmo.ru; Chief research scientist, STC-Innovation, Ltd., Saint Petersburg, Russia, matveev@speechpro.com
- Alexei V. Sholokhov** – postgraduate, University of Eastern Finland, Joensuu, Finland, sholokhovalexey@gmail.com

Принято к печати 21.05.14

Accepted 21.05.14

УДК 621.391

ДВУХУРОВНЕВЫЙ МЕТОД ИЕРАРХИЧЕСКО-КООРДИНАЦИОННОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ ОЧЕРЕДЕЙ НА УЗЛАХ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ

М.В. Семеняка^а^а Харьковский национальный университет радиозлектроники, Харьков, Украина, maxisemen@gmail.com

Аннотация. Предложен метод иерархическо-координационного обслуживания очередей. В рамках предложенного метода задача обслуживания очередей была сведена к решению оптимизационной задачи, представленной двухуровневой иерархической структурой. На первом уровне решалась задача распределения потоков между очередями, на втором уровне решения, полученные на первом уровне, координировались с целью предотвращения вероятной перегрузки канала связи. При управлении многоуровневой структурой в основу был положен принцип целевой координации, который определял порядок учета ограничений на взаимодействие очередей и распределения расчетных задач между уровнями иерархии. Координация решений осуществлялась с использованием метода множителей Лагранжа. Методами аналитического моделирования проведено исследование сходимости предложенного метода.

Ключевые слова: обслуживание очередей, метод целевой координации, качество обслуживания, иерархическая структура.

TWO-LEVEL HIERARCHICAL COORDINATION QUEUING METHOD FOR TELECOMMUNICATION NETWORK NODES

M.V. Semenyaka^а^а Kharkiv National University of Radioelectronics, Kharkiv, Ukraine, maxisemen@gmail.com

Abstract. The paper presents hierarchical coordination queuing method. Within the proposed method a queuing problem has been reduced to optimization problem solving that was presented as two-level hierarchical structure. The required distribution of flows and bandwidth allocation was calculated at the first level independently for each macro-queue; at the second level solutions obtained on lower level for each queue were coordinated in order to prevent probable network link overload. The method of goal coordination has been determined for multilevel structure managing, which makes it possible to define the order for consideration of queue cooperation restrictions and calculation tasks distribution between levels of hierarchy. Decisions coordination was performed by the method of Lagrange multipliers. The study of method convergence has been carried out by analytical modeling.

Keywords: queue management, goal coordination method, service quality, hierarchical structure.

Введение

Важной задачей развития современных телекоммуникационных сетей является повышение качества обслуживания (Quality of Service, QoS) возрастающего количества запросов пользователей. Среди множества средств повышения качества обслуживания значимое место занимают методы управления очередями, позволяющие эффективно улучшить такие показатели, как средняя задержка пакетов, джиттер, количество отброшенных пакетов без существенных затрат на модернизацию существующей инфраструктуры сети [1]. В свою очередь, особенности и эффективность технологических решений в области обслуживания очередей зависят от тех математических моделей и методов, которые в них заложены.

Применяемые сегодня механизмы обслуживания очередей (FIFO Queueing (First In, First Out), приоритетные очереди (Priority Queueing, PQ), заказные очереди (Custom Queueing, CQ), взвешенное справедливое обслуживание (Weighted Fair Queueing, WFQ), взвешенные справедливые очереди, основанные на классах (Class-based Weighted Fair Queueing, CBWFQ), очереди с малой задержкой (Low Latency Queueing, LLQ)) требуют вмешательства администратора при настройке, не способны к адаптации и тем самым не способны обеспечить возрастающие потребности в обеспечении качества обслуживания нового информационного общества [2]. В связи с этим актуальным видится исследование новых подходов обслуживания очередей на узлах как проводной, так и беспроводной телекоммуникационной сети [3–6].

Современная телекоммуникационная сеть имеет многоуровневую структуру, происходит переход к распределенным, облачным технологиям, которые требуют соблюдения принципов согласования, координации элементов [7, 8]. В области обслуживания очередей это распределенные алгоритмы обслуживания DWFQ (Distributed Weighted Fair Queueing), DCBWFQ (Distributed Class-based Weighted Fair Queueing, DLLQ (Distributed Low Latency Queueing)) и др. Математическим аппаратом, способным решить поставленную задачу согласования и координации распределенной сети для повышения качества обслуживания потоков пользователей, является теория многоуровневых иерархических систем [9, 10].

Иерархические структуры (очереди) подходят для масштабирования сети в случае увеличения количества обслуживаемых потоков. Этот математический аппарат позволяет более эффективно использовать многоядерные (многопроцессорные) системы, когда общий ресурс распределяется параллельно и каждый процессор занимается обслуживанием своей группы очередей.

Таким образом, актуальной является задача исследования новых методов обслуживания очередей, представленных иерархическими структурами. Предложенный в настоящей работе подход также исследован в области управления трафиком для решения задач маршрутизации, представлен математическими

моделями дифференциальных и алгебраических уравнений [11, 12]. В работе предложена потоковая модель иерархических очередей в декомпозиционной форме в виде алгебраических уравнений.

Двухуровневый метод иерархическо-координационного обслуживания очередей на узлах телекоммуникационной сети

Базовыми принципами иерархической системы являются принципы согласованности и координации решений, принимаемых на всех уровнях управления. В рамках задачи обслуживания очередей эти принципы заключаются в том, что все сетевые элементы управления буферным ресурсом (как по горизонтали, так и по вертикали) должны быть согласованы между собой по всем показателям с целью достижения заданных значений средней задержки, джиттера, количества отброшенных пакетов. Например, при проектировании системы обслуживания очередей должна быть предусмотрена координация элементов по расходу ресурсов пропускной способности (ПС) исходящего канала связи, загруженности сетевого интерфейса, по целям функционирования, программному и алгоритмическому обеспечению и т.д.

В сетевом узле в ходе решения задачи обслуживания очередей необходимо определить распределение множества потоков между очередями, а также порядок обслуживания потоков пакетов заданной интенсивности [13]. Для повышения масштабируемости задачи обслуживания очередей определим двухуровневую функциональную иерархию расчетов:

- на нижнем уровне искомое распределение потоков подлежит расчету независимо для каждой макроочереди для потоков, которые поступают от сетей доступа или других сетевых узлов;
- на верхнем уровне полученные на нижнем уровне решения задач распределения потоков и выделения ПС для каждой очереди координируются с целью предотвращения вероятной перегрузки канала связи ввиду децентрализации принимаемых решений на каждой конкретной макроочереди.

Общая схема предлагаемого метода представлена на рис. 1.

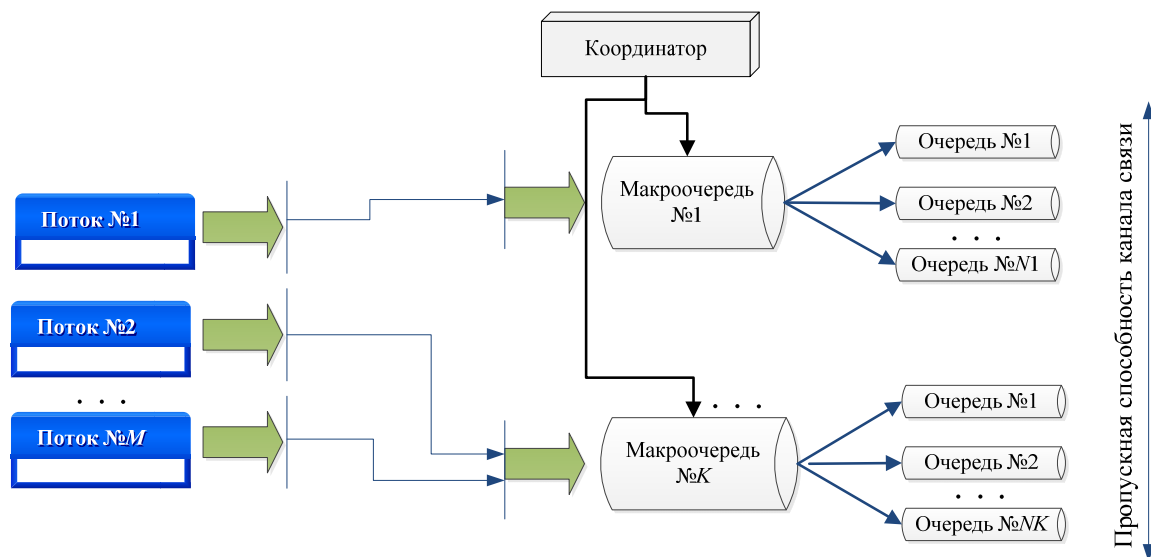


Рис. 1. Общая схема двухуровневого метода иерархическо-координационного обслуживания очередей

На вход сетевого узла поступают M потоков с различными параметрами интенсивности, приоритета, длины и распределения времени поступления пакетов. В зависимости от настроек списков доступа на сетевом узле потоки распределяются между K макроочередями. Каждая макроочередь обслуживается отдельным процессором или ядром сетевого узла. В рамках макроочереди параллельно рассчитывается распределение потоков между очередями и выделение для каждой очереди ПС. Координатор следит за тем, чтобы сумма ПС, выделенных каждой макроочереди, не превышала ПС канала связи.

Базовая модель обслуживания очередей на узлах телекоммуникационной сети

Предположим, что для каждой r -й ($r = \overline{1, K}$) макроочереди в качестве искомого выступают булевы переменные x_{ij}^r , которые характеризуют возможность обслуживания i -го ($i = \overline{1, M}$) потока j -й ($j = \overline{1, N_r}$) очередью r -й макроочереди, а также переменные b_j^r , под которыми понимается ПС, выделенная для j -й очереди r -й макроочереди.

Согласно физическому содержанию, искомая переменная x_{ij}^r может принимать только два значения – или 0, или 1, так как поток одного класса может быть обслужен только в рамках одной очереди:

$$x_{ij}^r \in \{0, 1\}. \quad (1)$$

С целью обеспечения управляемости предложенного метода необходимо обеспечить выполнение условия

$$\sum_{r=1}^K \sum_{j=1}^{N_r} x_{ij}^r = 1 \quad (i = \overline{1, M}). \quad (2)$$

Условие (2) гарантирует обслуживание потоков пользователей исходящими очередями и должно выполняться для каждого i -го потока, поступающего в произвольную макроочередь.

Основной причиной потери пакетов в телекоммуникационной сети является переполнение буфера сетевых устройств, вызванное недостаточной ПС канала связи для обслуживания поступивших потоков. Отсутствие потерь на сетевом узле должно способствовать отсутствию потерь в сети в целом. Интенсивность потока, направленного на обслуживание в очередь, не должна превышать ПС, выделенной для этой очереди. С целью предотвращения возможной перегрузки очередей в ходе расчета распределения потоков важно выполнить условие

$$\sum_{i=1}^M a_i x_{ij}^r < b_j^r, \quad (3)$$

где a_i – интенсивность потока i -го класса, поступающего на обслуживание сетевого узла.

Для решения задачи распределения трафика между очередями к использованию предлагается целевая функция минимизации средней длины очереди:

$$F = \sum_{r=1}^K \sum_{j=1}^{N_r} f(p_j^r, d_j^r) \bar{n}_j^r, \quad (4)$$

где $f(p_j^r, d_j^r)$ – некоторая функция от характеристик пакетов j -й очереди, например их IP-приоритета p_j^r или длины d_j^r ; \bar{n}_j^r – средняя длина j -й очереди r -й макроочереди. Стоит отметить, что поток с более высоким приоритетом обслуживается лучше, чем поток с низким приоритетом. В результате значение функции $f(p_j^r, d_j^r)$ должно быть тем больше, чем выше приоритет и чувствительность к задержке данного потока. В связи с этим в (4) в качестве функции характеристик потока можно использовать следующее выражение:

$$f(p_j^r, d_j^r) = \frac{p_j^r}{d_j^r}. \quad (5)$$

В зависимости от параметров входящего потока \bar{n}_j^r может быть рассчитана с использованием следующих выражений:

$M/M/1$:

$$\bar{n}_j^r = \frac{(\rho_j^r)^2}{1 - \rho_j^r}, \quad (6)$$

$M/D/1$:

$$\bar{n}_j^r = \frac{(\rho_j^r)^2}{2(1 - \rho_j^r)}, \quad (7)$$

$M/M/1/N$:

$$\bar{n}_j^r = \frac{\rho_j^r}{1 - (\rho_j^r)^{N+1}} \cdot \frac{1 - (N+1)(\rho_j^r)^N + N(\rho_j^r)^{N+1}}{1 - \rho_j^r} - \rho_j^r, \quad (8)$$

$fBM/M/1/N$:

$$\bar{n}_j^r = \frac{\frac{\rho_j^r}{\beta} f(H)}{1 - \left[\frac{\rho_j^r}{\beta} f(H) \right]^{N+2}} \cdot \frac{\left\{ 1 - (N+1) \left[\frac{\rho_j^r}{\beta} f(H) \right]^N \right\} + N \left[\frac{\rho_j^r}{\beta} f(H) \right]^{N+1}}{1 - \frac{\rho_j^r}{\beta} f(H)} - \frac{\rho_j^r}{\beta} f(H), \quad (9)$$

где $\rho_j^r = \frac{\sum_{i=1}^M a_i x_{ij}^r}{b_{ij}^r}$ – коэффициент использования пропускной способности, выделенной для j -й очереди;

β – вероятность отсутствия повторной передачи пакетов; H – коэффициент Херста; $f(H)$ – функция, которая учитывает влияние самоподобия поступающего в узел потока. Из (9) видно, что для определения средней длины очереди необходимо определиться с функцией $f(H)$. Например, если использовать линейный закон и значение данной функции для $H = 0,5$, равное 1, то можно представить $f(H)$ в виде $f(H) = 2H$ [14].

Использование целевой функции (4) позволяет наиболее полно сохранить физический смысл исходных переменных, адаптировав метод под характеристики различных передаваемых потоков. В зависимости от модели входящего потока и модели обслуживания решаемую задачу можно аппроксимировать одной из систем массового обслуживания, воспользовавшись для вычисления средней длины очереди известными выражениями (6)–(9). При этом учитывается IP-приоритет пакетов и их длина (5).

Переход от централизованного решения к декомпозиционной форме

Для перехода к более гибкой, масштабируемой иерархической структуре обслуживания очередей описанную выше централизованную постановку задачи распределения потоков между очередями и выделения ПС необходимо представить в декомпозиционной форме по количеству макроочереди с возможностью координации результатов решения на каждой макроочереди.

Стоит учесть, что распределение потоков для каждой макроочереди рассчитывается только на основе имеющейся у нее информации о поступивших в нее пакетах и ПС канала связи, без данных о результатах распределения потоков и выделения ПС на других макроочередях. В связи с этим в дополнение к условию предотвращения перегрузки очереди (3) целесообразно определить условие на непереполнение канала связи:

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_r} a_i x_{ij}^r < b - \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq r}}^K \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_s} a_i x_{ij}^s \quad (r = \overline{1, K}). \quad (10)$$

В левой части неравенства (10) приведена суммарная интенсивность потоков пакетов, поступивших на обслуживание в r -ю макроочередь. В правой части неравенства (10), кроме ПС канала связи b , присутствует суммарная интенсивность потоков, поступивших на обслуживание в другие (отличные от r -й) макроочереди. Смысл выражения (10) заключается в том, что поток, поступивший на обслуживание в r -ю макроочередь, не должен по своей интенсивности превышать доступную ПС канала связи, которая осталась после обслуживания потоков, обслуженных в других макроочередях. Выполнение условия (10) будет положено в основу координирующего уровня предложенной модели. В дальнейшем условие (10) удобно будет использовать в векторно-матричной форме:

$$\mathbf{B}_r \mathbf{x}_r < b - \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq r}}^K \mathbf{B}_s \mathbf{x}_s \quad (r = \overline{1, K}), \quad (11)$$

где $\mathbf{B}_r, \mathbf{B}_s$ ($r, s \in K; r \neq s$) – согласующие матрицы, координаты которых выбираются в соответствии с выражением (10) и интенсивностями потоков, поступающих в сетевой узел.

Решение оптимизационной задачи, связанной с минимизацией функции (4) при наличии ограничений (1)–(3), (11), является основой предлагаемого метода иерархическо-координационного обслуживания очередей. Тогда, используя теорему о строгой дуальности задач на условный экстремум и переходя к задаче на безусловный экстремум, имеем

$$\min_{x, b} F = \max_{\mu} \Phi,$$

определив в соответствии с формулой (8) двойственную функцию $\Phi(\mu)$ следующим образом:

$$\Phi(\mu) = \{ \min_{x, b} L(x, b, \mu) \},$$

где

$$L = \sum_{r=1}^K \sum_{j=1}^{N_r} f(p_j^r, d_j^r) \bar{n}_j^r + \sum_{r=1}^K \mu_r^t (\mathbf{B}_r \mathbf{x}_r + \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq r}}^K \mathbf{B}_s \mathbf{x}_s - b). \quad (12)$$

Применение иерархическо-координационного подхода к решению поставленной задачи предполагает обоснованный выбор координирующих векторов (вектора). При решении оптимизационной задачи по управлению многоуровневой структурой в основу иерархическо-координационных методов могут

быть положены принципы координации, такие, как принцип целевой координации, принцип оценки взаимодействий и принцип прогнозирования взаимодействия [9, 15].

В рамках потоковой модели наиболее обоснованным является принцип целевой координации, который определяет порядок учета ограничений на взаимодействие макроочереди и распределения расчетных задач между уровнями иерархии. При этом в ходе декомпозиции решения задачи (12) векторы искомых переменных \mathbf{x}_{ij}^r и \mathbf{b}_j^r будут рассчитываться непосредственно на процессорах каждой макроочереди, а множители Лагранжа μ_r будут рассчитываться на верхнем уровне управления для предотвращения перегрузки каналов связи.

Таким образом, для решения сформулированной оптимизационной задачи используем принцип целевой координации [9, 15], в рамках которого лагранжиан (12) представим в следующем виде:

$$L = \sum_{r=1}^K \sum_{j=1}^{N_r} f(p_j^r, d_j^r) \bar{n}_j^r + \sum_{r=1}^K \mu_r^t \mathbf{B}_r \mathbf{x}_r + \sum_{r=1}^K \mu_r^t \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq r}}^K \mathbf{B}_s \mathbf{x}_s - \sum_{r=1}^K \mu_r^t b. \quad (13)$$

Предположив, что величины μ_r являются фиксированными, можно предпоследнее слагаемое в выражении (8) привести к виду [15]

$$\sum_{r=1}^K \mu_r^t \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq r}}^K \mathbf{B}_s \mathbf{x}_s = \sum_{r=1}^K \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq r}}^K \mu_r^t \mathbf{B}_s \mathbf{x}_s, \quad (14)$$

и с учетом (14) выражение (8) можно записать следующим образом:

$$L = \sum_{r=1}^K L_r,$$

где

$$L_r = \sum_{j=1}^{N_r} f(p_j^r, d_j^r) \bar{n}_j^r + \mu \mathbf{B}_r \mathbf{x}_r - \mu^t b. \quad (15)$$

Таким образом, функция (8) приобретает сепарабельную форму, а общая проблема распределения нагрузки между очередями и выделения ПС оказалась декомпозированной на ряд подзадач (по числу макроочереди), где каждая задача распределения на r -й макроочереди, состоящая в расчете векторов \mathbf{x}_{ij}^r и \mathbf{b}_j^r , свелась к оптимизации лагранжиана L_r (15). При этом лагранжиан (15) является функцией переменных только одного индекса, определяющего номер макроочереди.

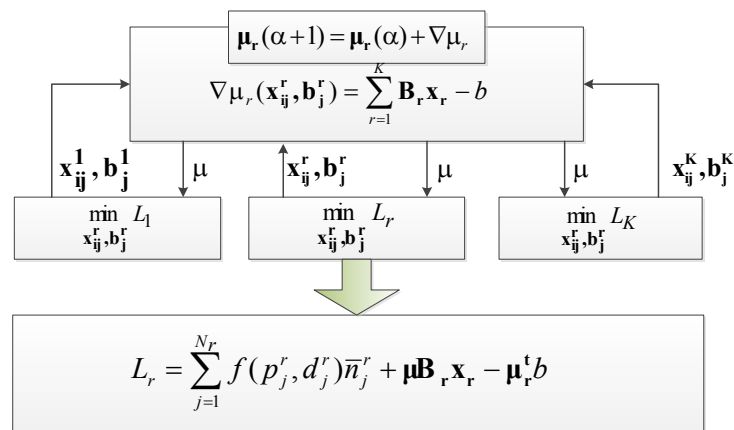


Рис. 2. Схема двухуровневого обслуживания очередей

Решение задачи минимизации выражения (15) определяет нижний уровень расчетов, результатом которого является формирование распределения трафика и выделения ПС каждой конкретной макроочереди согласно содержанию искомых векторов \mathbf{x}_{ij}^r и \mathbf{b}_j^r . На верхнем уровне, основной задачей которого является координация решений, полученных на нижнем уровне с целью недопущения перегрузки канала связи (11), осуществляется модификация вектора множителей Лагранжа в ходе выполнения следующей градиентной процедуры:

$$\mu_r(\alpha + 1) = \mu_r(\alpha) + \nabla \mu_r, \quad (16)$$

где $\nabla \mu_r$ – градиент функции, который рассчитывается исходя из получаемых на нижнем уровне результатов решения задачи распределения потоков и выделения ПС каждой конкретной r -й макроочереди ($r \in K$), т.е.

$$\nabla_{\mu_r}(\mathbf{x}_{ij}^r, \mathbf{b}_j^r) = \sum_{r=1}^K \mathbf{B}_r \mathbf{x}_r - b. \quad (17)$$

Результаты решения задач на каждой отдельной макроочереди собираются координатором (верхний уровень иерархии), осуществляется их анализ и координация путем расчета (корректировки) векторов множителей Лагранжа μ_r ($r \in K$) (16)–(17) в ходе оптимизации лагранжиана (13). Полученные новые решения снова «спускаются» на первый уровень управления для итерационной оптимизации процесса распределения трафика и выделения пропускной способности (рис. 2).

Исследование и оценка эффективности предложенного двухуровневого метода иерархическо-координационного обслуживания очередей на узлах телекоммуникационной сети

Исследование предложенного метода основывалось на анализе сходимости результатов аналитического моделирования. Для лабораторного исследования метода можно использовать подход, описанный в [16]. Оптимизационная задача решалась с использованием пакета Optimization Toolbox среды MATLAB 7, представленного программой fmincon, в рамках которой поддерживается решение задач нелинейного программирования с произвольно заданной целевой функцией. Проводился анализ для различного количества потоков на входе сетевого узла, числа макроочереди, ПС канала. Для примера решения задачи обслуживания очередей с использованием предложенного метода взяты следующие исходные данные. На вход сетевого узла поступал трафик, состоящий из девяти потоков интенсивностью $a_1 = 8 \text{ с}^{-1}$, $a_2 = 12 \text{ с}^{-1}$, $a_3 = 10 \text{ с}^{-1}$, $a_4 = 24 \text{ с}^{-1}$, $a_5 = 22 \text{ с}^{-1}$, $a_6 = 18 \text{ с}^{-1}$, $a_7 = 38 \text{ с}^{-1}$, $a_8 = 22 \text{ с}^{-1}$, $a_9 = 26 \text{ с}^{-1}$. Обслуживание трафика производилось с помощью модели $M/M/1$. Для обслуживания очередей предложено использование трех макроочереди с двумя очередями в каждой макроочереди. ПС канала связи составляла 250 с^{-1} . Результаты исследования сходимости метода представлены на рис. 3.

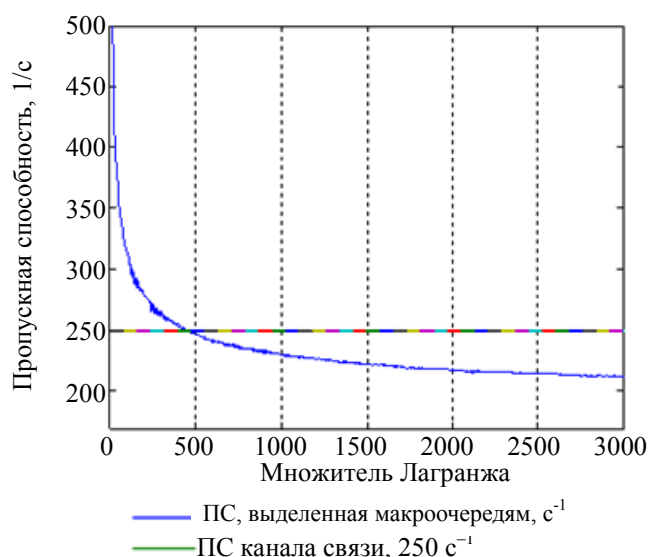


Рис. 3. Результаты исследования сходимости предложенного метода

На рис. 3 показан координирующий эффект введения множителей Лагранжа при переходе к иерархической постановке обслуживания очередей. Изначально, при малых значениях множителя Лагранжа, каждая из макроочереди для обслуживания поступавшего в нее трафика выделяла максимально возможную ПС, что в сумме в разы превышало ПС канала связи. С увеличением множителя Лагранжа, который является штрафующим (координирующим) элементом метода, суммарная ПС, выделяемая макроочередям, уменьшалась. Для исходных данных, представленных выше, значение множителя Лагранжа, обеспечивающее удовлетворение условия непереполнения канала связи, (11) лежит в пределах от 450 и выше. Достаточно большое значение множителя Лагранжа позволит сразу выполнить ограничение непереполнения канала связи независимо от исходных данных, но это приведет к увеличению длины очереди, ведь чем меньше ПС выделено для потока, тем выше будет значение средней длины очереди, что отрицательно скажется на качестве обслуживания потоков пользователей. Наша задача заключается в поиске такого значения координирующих элементов (множителей Лагранжа), которое позволит максимально использовать доступную ПС канала связи, не переполнив его, т.е. на пересечении графиков на рис. 3.

Порядок решения сформулированной задачи с исходными данными, представленными выше, показан на рис. 4.

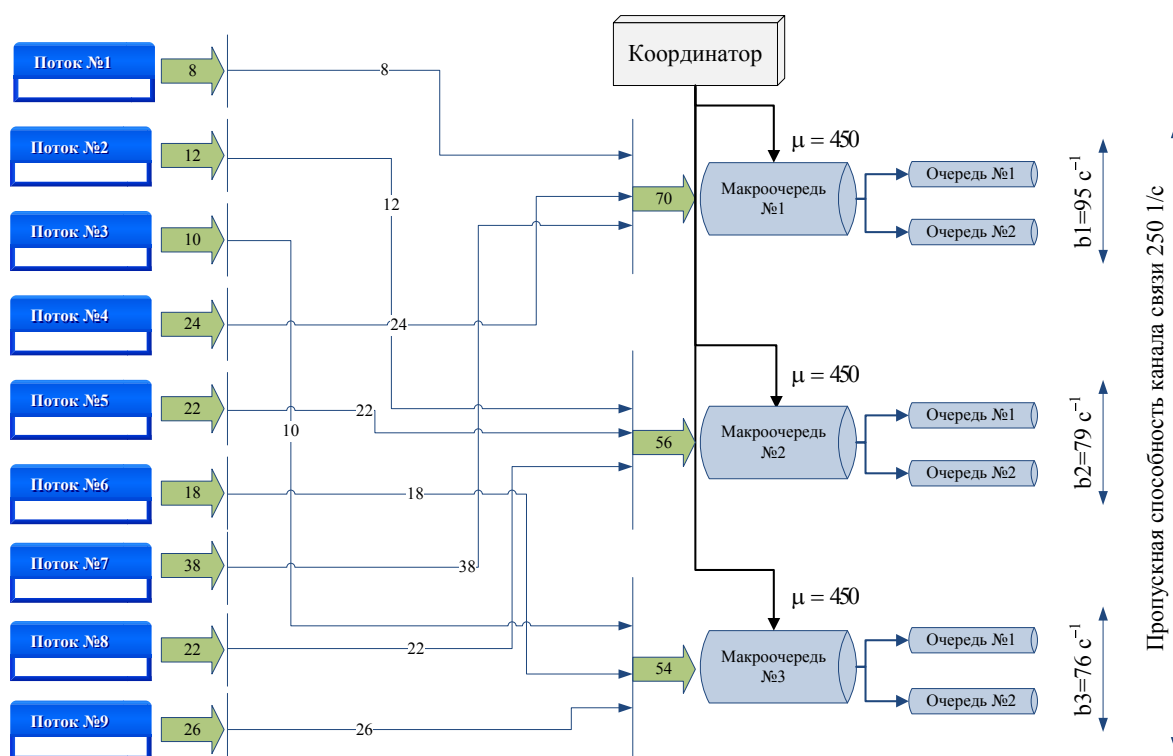


Рис. 4. Пример результатов расчета предложенного метода

В результате решения оптимизационной задачи получено распределение потоков между очередями, выделенная пропускная способность \mathbf{b}^r для каждой макроочереди составила 95 c^{-1} , 79 c^{-1} , 76 c^{-1} соответственно, множитель Лагранжа равнялся 450.

Заключение

В работе предложен двухуровневый метод иерархическо-координационного обслуживания очередей на узлах телекоммуникационной сети. В основу метода положен принцип целевой координации, а задача обслуживания очередей сведена к решению оптимизационной задачи, представленной в декомпозиционной форме. При решении задачи обслуживания очередей это позволило обеспечить более высокий уровень адекватности (системности) процесса управления и получить более высокое качество решения задач управления перегрузками на узлах сети, адаптировав их под современную многопроцессорную архитектуру сетевых узлов. Адекватность полученных результатов обеспечивалась использованием положений известного и хорошо апробированного математического аппарата – теории управления многоуровневыми системами, теории массового обслуживания, а также четкой физической трактовкой искомых переменных и полученных результатов исследования. Предложенный математический аппарат подходит для решения задач распределения ресурсов в распределенных, многоядерных, многопроцессорных, многомодульных системах. Использование параллельно работающих процессоров для вычислений на первом уровне иерархии позволит увеличить скорость нахождения оптимального решения. Исследование сходимости предложенного метода показало характер влияния координирующего вектора на результаты расчета, а также на способ нахождения таких координирующих значений, которые позволяют максимально использовать доступный ресурс пропускной способности, тем самым повысив качество обслуживания потоков пользователей.

Литература

1. Вегенша Ш. Качество обслуживания в сетях IP: Пер. с англ. М.: Вильямс, 2003. 386 с.
2. Valencia C. Scheduling alternatives for mobile WiMAX end-to-end simulations and analysis. Master Thesis. Ottawa, Canada, Carleton University, 2009. 116 p.
3. Victoria R.S., Kumar S.S. Efficient bandwidth allocation for packet scheduling // International Journal of Future Computer and Communication. 2012. V. 1. N 4. P. 381–384.
4. Luo Y., Yin S., Wang T., Suemura Y., Nakamura S., Ansari N., Cvijetic M. QoS-aware scheduling over hybrid optical wireless networks // Proc. of OFC/NFOEC 2007. Anaheim, USA, 2007. Art. N 4348497.
5. Down D., Lewis M. Dynamic load balancing in parallel queueing systems: stability and optimal control // European Journal of Operational Research. 2006. V. 168. N 2 spec. P. 509–519.

6. Yang L., Kwok Y.-K., Wang J. An adaptive packet scheduling algorithm for efficient downlink bandwidth allocation in UWB based wireless infrastructure networks // Computer Communications. 2007. V. 30. N 9. P. 2087–2095.
7. Badger M., Grance T., Patt-Corner R., Voas J. Cloud computing synopsis and recommendations (Special Publication 800-146). NIST, 2012. 82 p.
8. Cisco cloud computing – data center strategy, architecture, and solutions, 2009 [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.cisco.com/web/strategy/docs/gov/CiscoCloudComputing_WP.pdf свободный. Яз. англ. (дата обращения 12.12.2013).
9. Месарович М., Мако Д., Такахара И. Теория иерархических многоуровневых систем: Пер. с англ. М.: Мир, 1973. 344 с.
10. Dandamudi S.P., Ayachi S. Performance of hierarchical processor scheduling in shared-memory multiprocessor systems // IEEE Transactions on Computers. 1999. V. 48. N 11. P. 1202–1213.
11. Лемешко А.В., Хайлан А.М. Многоуровневое управление трафиком в сети MPLS-TE DiffServ на основе координационного принципа прогнозирования взаимодействий // Проблемы телекоммуникаций. 2010. № 1 (1). С. 35–44.
12. Беленков А.Г., Евсеева О.Ю., Лемешко А.В. Метод распределения нагрузки в иерархических телекоммуникационных сетях на базе декомпозиционных принципов предсказания взаимодействий и целевой координации // Праці УНДІРТ. 2005. № 2 (42). С. 11–16.
13. Tsai T.-Y., Chung Y.-L., Tsai Z. Introduction to packet scheduling algorithms for communication networks. In: Jun Peng (ed.) Communications and Networking. Sciyo, Croatia, 2010. 434 p.
14. Петров М.Н., Пономарев Д.Ю. Самоподобие в системах массового обслуживания с ограниченным буфером // Электросвязь. 2002. № 2. С. 35–39.
15. Сингх М., Титли А. Системы: декомпозиция, оптимизация и управление: Пер. с англ. М.: Машиностроение, 1986. 496 с.
16. Лемешко А.В., Семеняка М.В., Али С. Особенности проведения лабораторного эксперимента по исследованию процессов управления очередями в телекоммуникационных сетях // Цифрові технології. 2011. № 10. С. 5–17.

Семеняка Максим Викторович – аспирант, Харьковский национальный университет радиоэлектроники, Харьков, Украина, maxisemen@gmail.com

Maxim V. Semenyaka – postgraduate, Kharkiv National University of Radioelectronics, Kharkiv, Ukraine, maxisemen@gmail.com

Принято к печати 25.02.14
Accepted 25.02.14

УДК 007:681.512.2

МЕТОД ПОИСКА ПОВТОРЯЮЩИХСЯ ФРАГМЕНТОВ ТЕКСТА В ТЕХНИЧЕСКОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ

Д.В. Луцив^{a, b}, Д.В. Кознов^a, Х.А. Басит^c, О.Е. Ли^d, М.Н. Смирнов^{a, b}, К.Ю. Романовский^a^a Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, dkoznov@yandex.ru^b ЗАО «Ланит-Терком», Санкт-Петербург, Россия^c Университет менеджмента Лахора, Пакистан^d Национальный университет Сингапура, Сингапур

Аннотация. Предложен метод, позволяющий искать повторы в технической документации, выполненной в формате DocBook/DRL или в виде «плоского» текста. Разработан алгоритм, основанный на технике поиска клонов в программном обеспечении (software clone detection). Алгоритм реализует фильтрацию стандартного поиска клонов: отбрасываются клоны, чья длина меньше 5 символов; выполняется устранение пересечения клонов, а также удаление несущественных клонов и клонов, состоящих только из XML-конструкций. Поддерживается поиск по остаткам. После нахождения клонов они удаляются из документации, и поиск повторяется. Доказывается достаточность одного шага. Реализована техника адаптированного повторного использования Бассета–Ерзабека. На основе предложенного алгоритма разработан программный инструмент, поддерживающий параметризацию поиска повторов, а также визуализацию полученных результатов. Инструмент интегрирован со средой разработки повторно используемой документации DocLine и реализует рефакторинг документов на основе найденных клонов. Инструмент использует утилиту Clone Miner для поиска клонов. Представлена апробация метода для документации к ядру операционной системы Linux (29 документов, 25 000 строк). Выделено 5 видов клонов: термины, гиперссылки, лицензии, описание функциональности, примеры кода. Всего найдено 451 содержательных групп клонов. Средняя длина клона – 4,43 токена. Среднее количество клонов в группе – 3,56. Предложенный подход может оказаться полезным в средах работы с документацией семейств программных продуктов.

Ключевые слова: документация программного обеспечения, переиспользование документации, поиск клонов в программном обеспечении, вариативное переиспользование, рефакторинг, DocBook, DocLine, DRL.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-01-00415-а. Авторы благодарят студентов Артема Шутака, Дмитрия Копина, Михаила Смаржевского и Аделя Кана (Adeel Khan), реализовавших часть прототипов использованных программных инструментов и принимавших активное участие в обсуждении предмета работы.

AN APPROACH FOR CLONE DETECTION IN DOCUMENTATION REUSE

D.V. Lutsiv^{a, b}, D.V. Koznov^a, H.A. Basit^c, O.E. Lieh^d, M.N. Smirnov^{a, b}, K.Yu. Romanovsky^a^a Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, dkoznov@yandex.ru^b “Lanit-Tercom” Ltd., Saint Petersburg, Russia^c Lahore University of Management Sciences, Lakhora, Pakistan^d National University of Singapore, Singapore

Abstract. The paper focuses on the searching method for repetitions in DocBook/DRL or plain text documents. An algorithm has been designed based on software clone detection. The algorithm supports filtering results: clones are rejected if clone length in the group is less than 5 symbols, intersection of clone groups is eliminated, meaningfulness clones are removed, the groups containing clones consisting only of XML are eliminated. Remaining search is supported: found clones are extracted from the documentation, and clone search is repeated. One step is proved to be enough. Adaptive reuse technique of Paul Bassett – Stan Jarzabek has been implemented. A software tool has been developed on the basis of the algorithm. The tool supports setting parameters for repetitions detection and visualization of the obtained results. The tool is integrated into DocLine document development environment, and provides refactoring of documents using found clones. The Clone Miner clone detection utility is used for clones search. The method has been evaluated for Linux Kernel Documentation (29 documents, 25000 lines). Five semantic kinds of clones have been selected: terms (abbreviations, one word and two word terms), hyperlinks, license agreements, functionality description, and code examples. 451 meaningful clone groups have been found, average clone length is 4.43 tokens, and average number of clones in a group is 3.56.

Keywords: software documentation, documentation reuse, software clone detection, adaptive reuse, refactoring, DocBook, DocLine, DRL.

Acknowledgements. The work was supported by by RFBR grant 12-01-00415-a. The authors express their gratitude to the students (Artyom Shutak, Dmitry Kopin, Michail Smarzhovsky and Adeel Khan) who implemented a part of soft-based prototypes and took an active part in the discussion about the subject of research.

Введение

Документация является важной составляющей современного программного обеспечения (ПО). При разработке ПО создается много видов документации: руководства пользователя, описания архитектуры, сопроводительные заметки о выпусках и пр. Эти документы обладают сложной структурой и значительным объемом, и, как и само ПО, они постоянно изменяются в течение жизненного цикла. Сопровождение документации оказывается трудоемкой работой, поскольку в документах, как правило, много повторов, например, описаний одной и той же функциональности, присущей разным программным продуктам одного семейства. Если никаких связей между дубликатами не задано, то все они должны редактироваться синхронно «вручную». Большая трудоемкость данного процесса, а также обычная для программных проектов нехватка времени приводят к появлению и накоплению в документации противоре-

чий и ошибок. Ситуация дополнительно усложняется тем, что зачастую информация повторяется не буквально: например, в разных разделах одного и того же документа одна и та же функциональность может быть описана с разной степенью подробности. Это приводит к вариативности повторений, что затрудняет их поиск типичными средствами обработки текстов. Кроме того, в конечном итоге обычно требуется не просто обнаружить дубликаты, но и выполнять над ними различные операции, например, оформлять фрагменты текста как повторно используемые, вынеся повторы в одно место и заменив все их вхождения ссылками на это описание.

Плановое повторное использование широко используется при разработке. Различные техники представлены, например, в [1, 2]. Одна из них – XVCL (XML-Based Variant Configuration Language) [3] – основана на технике вариативного повторного использования Пола Бассета [4]. XVCL и вариативное повторное использование были применены для разработки документации в технологии DocLine [5]. В рамках последней была предложена техника рефакторинга XML-документации [6, 7], однако проблема автоматизированного поиска пригодных для повторного использования фрагментов документов осталась нерешенной.

Первой попыткой решить данную задачу стал подход, изложенный в [8]. Для поиска повторов использовалась техника поиска клонов в программном обеспечении (software clone detection) [7–9], в качестве базового средства поиска клонов использован пакет Clone Miner [10]. Подход работал с документацией в формате DocBook [11] (Linux-сообществе) и DRL [5] (настройка над DocBook для организации вариативного повторного использования средствами технологии DocLine), а также для «плоского» текста. Однако алгоритм, представленный там, давал до 1/3 ложных срабатываний и уменьшал найденные клоны. В настоящей работе представлены улучшенная версия алгоритма и его программная реализация, интегрированная со средствами рефакторинга документации в технологии DocLine, а также апробация на документации к ядру операционной системы Linux [12].

Контекст работы

DocBook. Технология DocBook [11] является набором стандартов и инструментов, предназначенных для создания технической документации, имеющей большой размер и сложную структуру. Особенностью данной технологии является разделение структуры документа и его стилистического оформления, что позволяет преобразовывать один исходный документ в разные выходные форматы – HTML, PDF и т.д. Технология не является WYSIWYG (What You See Is What You Get), поэтому требует дополнительной подготовки для использования (с дискуссией о применении техническими писателями языков разметки можно познакомиться в [13]). DocBook легко расширяется и позволяет вводить дополнительные конструкции, которые потом могут быть автоматически преобразованы в базовый DocBook, чтобы с документами по-прежнему можно было выполнять стандартные операции (например, генерировать PDF).

DocLine. Технология DocLine [5] создана для разработки и сопровождения сложной документации ПО с использованием вариативного повторного использования [3, 4] повторяющихся фрагментов документов. Вариативность в данном случае означает возможность настройки фрагментов текста для использования в различных контекстах. В рамках DocLine создан новый XML-язык разметки DRL (Documentation Reuse Language) и модель процесса разработки документации. Программные средства DocLine созданы на основе Eclipse. Язык DRL является расширением языка DocBook – добавлены две новые конструкции, предназначенные для вариативного повторного использования: информационный элемент и каталог элементов.

Информационный элемент. Рассмотрим документацию семейства телефонных аппаратов с АОН (Автоматического Определения Номера). Она может включать в себя информационный элемент «Прием входящих звонков», содержащий следующий текст:

Когда Вы принимаете входящий звонок, телефонный аппарат получает информацию CallerID и отображает ее на экране. (1)

Телефонные аппараты могут выдавать информацию о вызывающем абоненте и иными способами, для которых пример (1) будет выглядеть иначе:

Когда Вы принимаете входящий звонок, телефонный аппарат получает информацию CallerID и произносит ее. (2)

Для того чтобы создать элемент документации, объединяющий в себе оба варианта (1) и (2), на DRL может быть описан следующий информационный элемент:

```
<infelement id="CallerIdent">
  Когда Вы принимаете входящий звонок, телефонный аппарат
  получает информацию CallerID <nest id="DisplayOptions">
  и отображает ее на экране</nest>.
</infelement>
```

Информационный элемент задается тэгом (<infelement>), а внутри этой конструкции описывается точка расширения (тэг <nest/>). После этого данный информационный элемент можно использовать в

разных контекстах с помощью конструкции «Ссылка на информационный элемент», которая задается тэгом <infelemref/>:

```
<infelemref infelemid="CallerIdent">
<replace-nest nestid="DisplayOptions">
и произносит ee</replace-nest>
</infelemref>
```

В ссылке на информационный элемент любая точка расширения может быть удалена, заменена или дополнена специальным содержимым без внесения изменений в исходный информационный элемент.

Каталог элементов. В документации для большинства программных продуктов встречаются описания сходных объектов, которые имеют разную форму, но близкое содержание. Например, одна и та же функция пользовательского интерфейса может быть представлена и как пункт главного меню, и как пункт всплывающего меню, и как кнопка панели инструментов. Если описывать такие объекты, не отслеживая связей, то при внесении изменений в их содержание потребуется вручную изменять все соответствующие элементы. Для решения этой проблемы в DRL введена конструкция «Каталог». Каталог содержит набор элементов, каждый из которых содержит набор шаблонов. Когда технический писатель включает в определенный контекст элемент каталога, он должен указать его идентификатор и необходимый шаблон представления в тексте. Частный случай каталога – словарь, который содержит набор терминов без шаблонов представления. Более детальное описание предназначенных для различных представлений каталогов элементов доступно в [5, 6].

Рефакторинг документации. Рефакторинг ПО – это процесс преобразования его исходного кода, не изменяющий его функциональность, но улучшающий его внутреннюю структуру [14, 15]. В [6] понятие рефакторинга было адаптировано и применено к процессу сопровождения XML-документации. В данном случае под рефакторингом понимается изменение внутренней структуры документа (конструкций разметки XML) с сохранением результирующего представления документа (например, PDF). В соответствии с данной идеей для DocLine был описан ряд операций рефакторинга [6], которые собраны в группы, как указано ниже.

1. Операции выделения общих используемых повторяющихся активов, в частности, для преобразования в DRL из DocBook или «плоского» текста.
2. Операции, помогающие настройке основных активов (расширяющие их настраиваемость).
3. Операции по переименованию различных элементов документации.

Обнаружение клонов в программном обеспечении и Clone Miner. Повторное использование программного кода часто происходит хаотически, методом cut & pasted. Подобные действия создают повторяющийся код (программные клоны, software clones) и могут привести к серьезным трудностям при сопровождении. Методы поиска клонов (software clone detection techniques) предназначены для поиска различных повторений в коде для последующего рефакторинга и организации повторного использования. Систематизированный обзор методов и инструментов обнаружения клонов доступен в [9]. В [16, 17] приводятся интересные обсуждения проблем клонирования кода и задачи обнаружения клонов, существует также значительное количество подходов и методов для поиска и классификации клонов (см., например, [18]) и пр.

Для нашего исследования мы выбрали инструмент Clone Miner [10], так как он обладает простым программным интерфейсом (командная строка), легок для интеграции и поддерживает русский язык (формат Unicode). Clone Miner ищет клоны в терминах лексических токенов: он преобразует полученный на входе текст в последовательность токенов, а затем при помощи алгоритмов поиска, основанных на основанных на суффиксных массивах, находит повторяющиеся фрагменты текста. Инструмент позволяет варьировать минимальную длину искомых клонов (в токенах). Применительно к текстовым документам, токен – это слово, отделенное от остальных слов разделителями `.` , `(` , `)` , и т.д. Так, например, следующий фрагмент текста содержит два токена: ``FM registers``.

Процесс

В этом разделе будет описан процесс поиска клонов, реализуемый в нашем методе.

Общее описание. Последовательность действий процесса представлена на рис. 1.

На входе имеется файл с документом, который нужно подвергнуть автоматизированному рефакторингу. С этим файлом выполняется определенная работа по его подготовке к процессу, затем запускается Clone Miner, который выдает список групп клонов и их координаты в тексте. По этому списку пользователь для любой из обнаруженных групп может выполнить автоматизированный рефакторинг. При рефакторинге все экземпляры клона заменяются ссылками на повторно используемое определение информационного элемента.

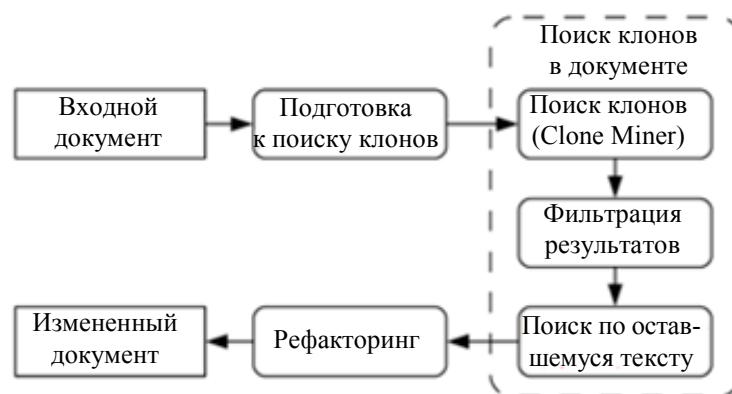


Рис. 1. Процесс рефакторинга документа на основе поиска клонов

Подготовка к поиску клонов. DocLine работает с файлами в формате DRL, а процедура поиска клонов применяется к информационному элементу. Но, поскольку поиск клонов целесообразно применять к «плоскому» тексту (файлы в формате ASCII/Unicode) или к DocBook-файлам, эти файлы нужно преобразовать в DRL, применив к ним операцию рефакторинга «Преобразование в DRL». В результате появляется новый информационный элемент, полностью содержащий исходный текст, и можно двигаться дальше.

Поиск клонов. Мы запускаем Clone Miner в режиме поиска в «плоском» тексте, поскольку основное его предназначение – поиск текстовых клонов в исходном коде программ, написанных на языках с существенно отличающимся от XML синтаксисом, в которых не встречаются такие специфические конструкции, как, например, именованные закрывающие тэги. Кроме того, во многих случаях нам требуется именно поиск в «плоском» тексте, так как нужные нам повторы могут содержаться внутри XML-конструкций. Таким образом, найденные клоны могут существенно нарушать структуру XML-документа. Пример (3) показывает фрагмент текста, в котором полужирным выделен найденный клон. Он включает открывающий тэг, но не включает закрывающего. Клоны делаются XML-корректными при выполнении рефакторинга, вместе с этим делается XML-корректным и то окружение документа, из которого они извлекаются.

```

<section id="file-tree-isa-directory">
<title>Reviving incoming calls </title>
<para>
Once you receive an incoming call, the phone gets CallerID
information and reads it out. But if...</para>
</section>
  
```

(3)

Фильтрация результатов. Наш алгоритм производит фильтрацию результатов работы Clone Miner следующим образом.

Шаг 1. Группа клонов отбрасывается, если содержит клоны менее чем из 5 отображаемых символов (например, «is a» содержит 3 отображаемых символа): как правило, такие клоны не имеют значимой для пользователя семантики, хотя и встречаются в большом количестве. При этом возможны потери значимой информации, например, некоторых аббревиатур, но в целом такая фильтрация позволяет заметно снизить количество бесполезных групп клонов. На текст длиной около 900 КБ на английском языке находится в среднем 3000 таких клонов, что значительно затрудняет дальнейшую работу.

Шаг 2. Clone Miner позволяет найденным группам клонов пересекаться, так как он лишь находит клоны, но не обладает информацией о том, для чего выполняется поиск и какие операции над найденными клонами будут производиться. Наш алгоритм исключает пересечения, оставляя лишь те группы, длина клонов в которых наибольшая, так как длинные клоны ожидаемо несут больше информации, чем короткие.

Шаг 3. Мы игнорируем группы, включающие клоны, состоящие исключительно из разметки XML и не включающие какого-либо текста, так как не ставим своей целью организацию повторного использования XML-разметки.

Шаг 4. Мы исключаем группы, состоящие из фраз «that is», «there is a» и др., так как они семантически несодержательны (подробнее в разделе «Апробация»). Для исключения подобных клонов мы разработали словарь и каждую группу проверяем на принадлежность данному словарю.

Поиск по оставшемуся тексту. После выполнения поиска клонов и фильтрации результатов (рис. 1) мы получаем набор клонов A1. Затем мы удаляем из документа все входящие в A1 клоны, вновь запускаем Clone Miner на оставшемся тексте и получаем набор A2. К A2 мы снова применяем шаги 1–4, получаем набор A3. Далее мы объединяем наборы A1 и A3, считая это конечным результатом. Такой повторный поиск может давать существенные результаты, в частности, из-за исключения пересекаю-

щихся групп. Эксперименты (см. раздел «Апробация») показали, что многократный поиск по остаткам не дает значимого улучшения результатов.

Такой повторный поиск может давать существенные результаты, в частности, из-за исключения пересекающихся групп. Эксперименты (см. раздел «Апробация») показали, что многократный поиск по остаткам не дает значимого улучшения результатов.

Рефакторинг. Для каждой группы клонов из полученного результирующего набора групп клонов пользователь может выполнить следующие операции из группы 1 (см. раздел «Рефакторинг документации»): выделение информационного элемента или выделение для включения в словарь. После выполнения любой из этих операций соответствующая группа клонов исключается из набора, а координаты клонов оставшихся групп пересчитываются с учетом произошедших при рефакторинге изменений в тексте документа.

Перед выполнением операций рефакторинга наш алгоритм преобразует выбранные клоны в корректные с точки зрения синтаксиса XML-фрагменты текста. Как было сказано ранее, Clone Miner «не знает» про XML, работая с документом как с «плоским» текстом. Однако DocLine может работать лишь с корректными конструкциями DocBook и DRL. Наш алгоритм восстанавливает балансировку открывающих и закрывающих тегов в клоне и в окружающем тексте, из которого извлекается клон.

Программный инструмент. Представленный процесс поиска клонов реализован в виде программных средств, интегрированных с DocLine и Eclipse. Созданный инструмент позволяет обнаруживать клоны в документах, редактируемых при помощи DocLine: поиск клонов включен как одна из операций рефакторинга в редакторе DRL. Инструмент также позволяет осуществлять навигацию по группам клонов и перемещение по исходному тексту, чтобы наблюдать, в каких контекстах встречается клон. Наконец, есть возможность извлекать все клоны выбранной группы как подлежащие повторному использованию элементы.

На рис. 2 показан процесс навигации по найденным в документе группам клонов и клонам и контекстное меню, предлагающее возможность выделить группу в информационный элемент или в поместить ее в словарь.

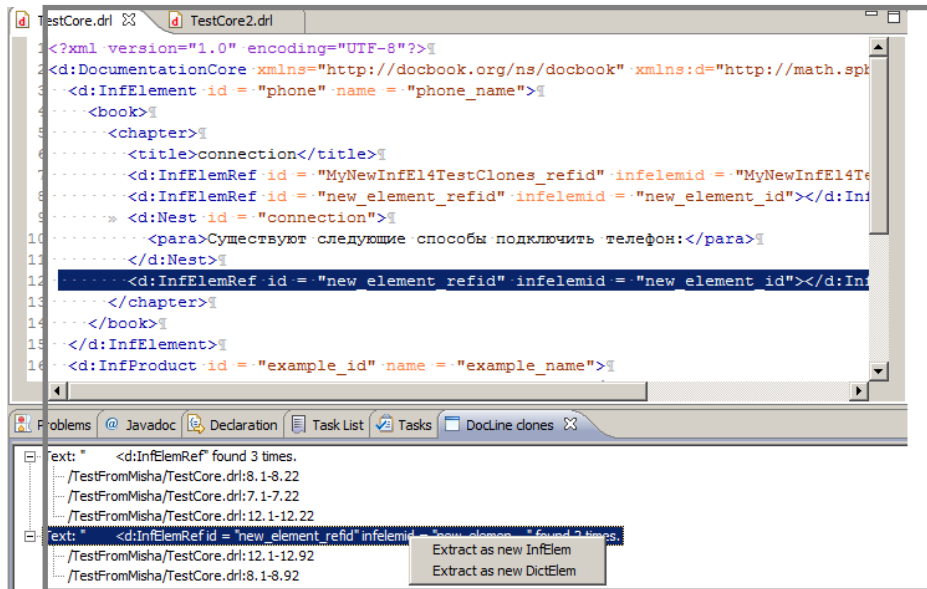


Рис. 2. Навигация по найденным клонам

Кроме инструмента редактирования и навигации, был реализован ряд вспомогательных инструментов, позволяющих собирать статистику по количеству и характеру найденных клонов и выдавать отчеты в табличном виде. Эти вспомогательные инструменты генерируют отчеты в формате HTML, содержание отчетов легко импортируется в офисные пакеты для последующей обработки данных средствами электронных таблиц. Вспомогательные инструменты реализованы на языке Python и интегрированы в среду DocLine. Пример отчета показан на рис. 3.

Апробация

Для апробации предложенного подхода была проведено три серии экспериментов. Первая серия заключалась в запуске инструмента на небольших документах, специально созданных нами для этой цели: в этих документах было точно известно количество клонов. Инструмент обнаружил все клоны.

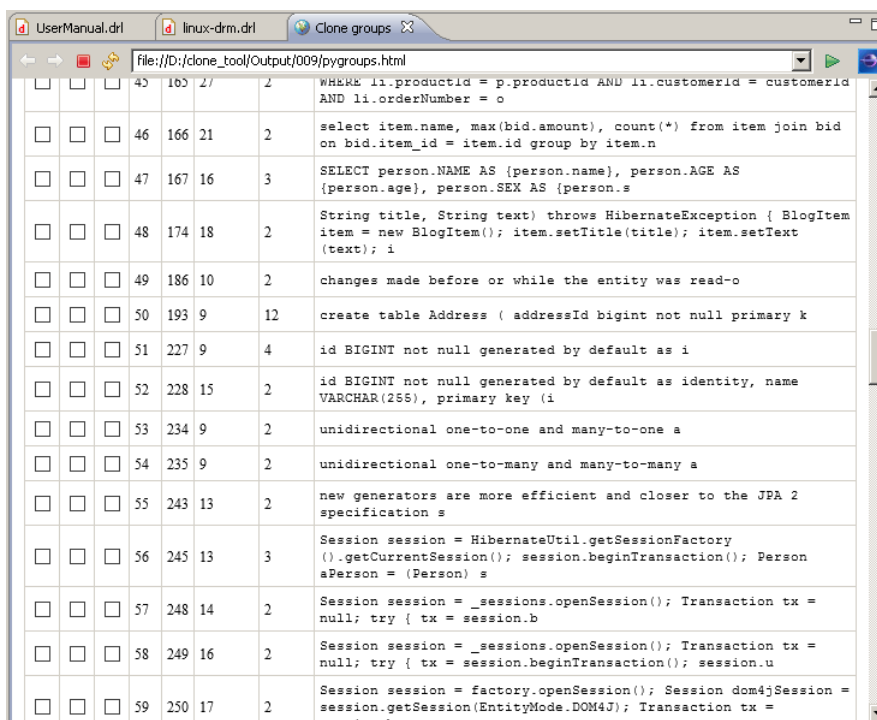


Рис. 3. Отчет по найденным группам клонов

Вторая серия экспериментов была посвящена эффективности поиска клонов по оставшемуся тексту (раздел «Поиск по оставшемуся тексту»). Для этого мы использовали фрагменты открытой DocBook-документации для 15 Java-проектов с открытым исходным кодом (15 документов в среднем по 1300 строк). Поиск по оставшемуся тексту увеличил количество групп клонов на 5–10%, однако на 1,5% уменьшил длину клонов. По итогам тестирования мы заключили, что данный прием позволяет, в основном, находить короткие (по 2–5 токенов) клоны и может быть полезен для поиска в документации повторяющихся терминов. Дальнейшее повторение этого шага не дало значимых результатов, так как маленькие группы клонов редко пересекаются, а поиск по оставшемуся тексту восстанавливает, в основном, те клоны, которые были отброшены при фильтрации пересечений.

Третья серия экспериментов была проведена для документации ядра операционной системы Linux [12] (Linux Kernel Documentation, далее – LKD). LKD состоит из 29 документов общим объемом 870 КБ (25000 строк), документация написана в формате DocBook. Статистика приведена в табл. 1.

Минимальная длина клона	1	2	3	5	6	7	8
Количество найденных групп клонов	3564	3543	2327	429	231	150	108

Таблица 1. Количество найденных клонов в зависимости от минимальной длины клона

Эксперименты показали, что фильтрация (см. раздел «Поиск по оставшемуся тексту») существенно снижает общее количество клонов, отбрасывая, в основном, малосодержательные клоны длиной 1 и 2 токена. В целом, с увеличением минимальной длины клона количество групп клонов значительно падает, как показано на рис. 4 (данные графика «групп после фильтрации» на рис. 3 соответствуют строке LKD в табл. 1).

Анализируя результаты экспериментов, мы выделили 5 смысловых групп клонов.

1. **Термины** (аббревиатуры, отдельные слова или словосочетания из 2 слов), на основе которых можно составить глоссарий. 58 из найденных в LKD групп клонов были классифицированы как термины (30 из одного токена и 28 из двух). В среднем они повторялись по 11 раз.
2. **Гиперссылки** (ссылки на веб-страницы). Полезно уметь выделять из документации все гиперссылки и собирать их в единый список ссылок. В LKD было найдено 8 групп клонов, содержащих гиперссылки. В ходе второго эксперимента было найдено больше гиперссылок.
3. **Лицензионные соглашения**. Каждый документ LKD содержит лицензионное соглашение, основанное на фрагменте GPL v 2 [19], но варьирующееся. В данном случае важно понимать, какие фрагмен-

ты лицензии идентичны, а какие отличаются. Для читателя может оказаться полезной возможность визуализировать эту информацию: так он сможет не читать одинаковые части текста, а сосредоточиться на отличиях. Мы обнаружили 6 групп в среднем по 4,36 токенов и по 2 клон в группе.

4. **Описание функциональности и требования.** Например, «When debugger detects an error, than it calls...». Здесь мы используем адаптивное повторное использование, считая одними и теми же группы клонов, члены которых отличаются мелкими деталями (числами, обозначающими размеры буферов, названиями процедур и т.д.), но данное объединение групп мы сделали вручную. В итоге мы получили 49 групп, в среднем состоящих из 3,27 клонов, включающих в среднем по 3,29 токенов.
5. **Примеры исходного кода.** LKD содержит множество листингов фрагментов исходного кода. Наш инструмент нашел в них 330 групп клонов со средними показателями 5,2 токенов на клон и 2,69 клонов в группе.

Результаты экспериментов по смысловым группам клонов суммируются в табл. 2.

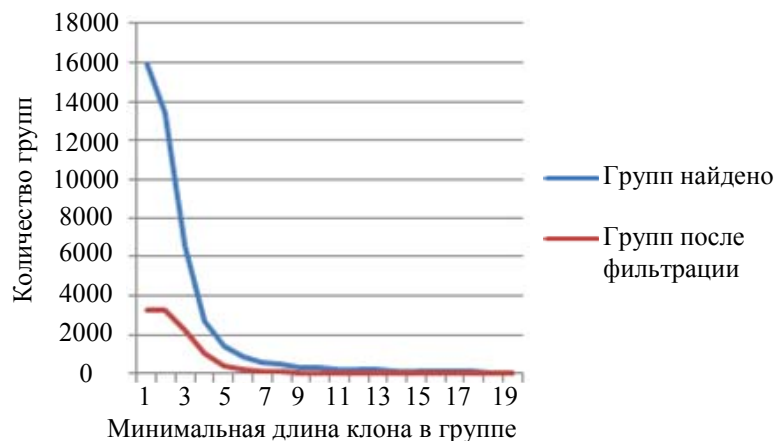


Рис. 4. Количество найденных в LKD групп клонов в зависимости от минимальной длины клона

Показатели	Смысловые группы клонов					
	Термины	Гиперссылки	Лицензионные соглашения	Описание функциональности и требования	Примеры исходного кода	Всего
Количество групп	58	32	6	49	330	451
Токенов/клон	1,48	1*	4,36	3,29	5,2	4,43
Клонов/группу	11	1,25	2	3,27	2,69	3,56

*Каждая гиперссылка состоит из одного токена

Таблица 2. Смысловые типы клонов

В итоге на примере LKD были получены следующие результаты: 451 содержательная группа клонов, где длина клона в среднем равна 4,43 токенов, а количество клонов в группе в среднем составляет 3,65 штук.

Не все найденные клоны удалось распределить по этим смысловым группам. Так, например, фрагмент «This document describes...» в LKD встречается часто, но он лишен семантики (не несет самостоятельного смысла). Для таких случаев полное повторное использование лишь усложнит и удлинит XML-представление документа, в то время как семантическое повторное использование позволит интегрировать наш подход с различными построения соответствия между фрагментами документов и прочими артефактами – кодом, требованиями, сущностями моделей и т.д. (см., например, [20]). В таком случае повторное использование может повысить качество построения этих соответствий, а адаптивное повторное использование позволит фиксировать более «тонкие» связи. Наш подход также может быть использован для управления изменениями при разработке линеек программных продуктов [21].

Заключение

Эксперименты показали удовлетворительное качество работы инструмента. Предложенный подход может оказаться полезным в средах работы с документацией семейств программных продуктов (например, [22]) для выделения подлежащих повторному использованию фрагментов документации разных продуктов семейства и создания повторно используемой структуры документации. Эта структура упрощает процесс сопровождения документации и имеет значение в тех случаях, когда сопровождение (эле-

мента семейства программных продуктов и (или) его документации) играет значительную роль. Также могут быть установлены связи между предусматривающей повторное использование структурой документации и моделью функциональных возможностей семейства программных продуктов [23, 24], что полезно, так как позволит, например, автоматически удалить из документации описания функциональности после удаления этой самой функциональности из программного продукта. Из не связанных с программной инженерией областей подход может быть использован, например, при моделировании архитектур предприятий (Enterprise Architecture Management) [25], а также при работе с онтологиями [26, 27]: в данных моделях возможны непредусмотренные повторения с учетом того, что они включают в себя большие объемы информации, значительная часть которой (документы, комментарии, длинные имена сущностей моделей и т.д.) не структурирована. При этом данные модели хранятся в XML-формате, что позволяет применить к ним наш подход с целью выявления повторов и повышения качества моделей.

Эксперименты показывают, что даже после фильтрации у нас остается много не несущих смысла клонов. Некоторые из них, предположительно, достаточно легко вычленишь с помощью более мощной фильтрации, но часть все равно придется искать вручную. Повышение точности алгоритма – основной предмет дальнейшей работы. В частности, мы планируем в будущем решить вопрос с поиском терминов, короче 5 печатных символов.

Также стало ясно, что инструмент должен быть обладать большими удобствами для поиска клонов. Требуется также автоматизированная поддержка адаптивного повторного использования. Кроме того, несмотря на многообещающие первые результаты, нам не кажется, что мы предложили исчерпывающую семантическую классификацию для повторного использования в документации. Данная тема подлежит дальнейшим исследованиям и разработке.

Литература

1. Holmes R., Walker R.J. Systematizing pragmatic software reuse // *ACM Transactions on Software Engineering and Methodology*. 2013. V. 21. N 4. Art. N 20.
2. Czarnecki K. Software reuse and evolution with generative techniques // *Proc. of 22nd IEEE/ACM International Conference on Automated Software Engineering*. Atlanta, USA, 2007. P. 575.
3. Jarzabek S., Bassett P., Zhang H., Zhang W. XVCL: XML-based variant configuration language // *Proc. of International Conference on Software Engineering*. Portland, USA, 2003. P. 810–811.
4. Bassett P. The theory and practice of adaptive reuse // *Sigsoft Software Engineering Notes*. 1997. V. 22. N 3. P. 2–9.
5. Кознов Д.В., Романовский К.Ю. DocLine: метод разработки документации семейств программных продуктов // *Программирование*. 2008. Т 34. № 4. С. 41–53.
6. Romanovsky K., Koznov D., Minchin L. Refactoring the documentation of software product lines // *Lecture Notes in Computer Science*. 2011. V. 4980 LNCS. P. 158–170.
7. Кознов Д.В., Романовский К.Ю. Автоматизированный рефакторинг документации семейств программных продуктов // *Системное программирование*. 2009. Т. 4. С.128–150.
8. Шутак А.В., Смирнов М.Н., Смажеский М.А., Кознов Д.В. Поиск клонов при рефакторинге технической документации // *Компьютерные инструменты в образовании*. 2012. № 4. С. 30–40.
9. Rattan D., Bhatia R.K., Singh M. Software clone detection: asystematic review // *Information and Software Technology*. 2013. V. 55. N 7. P. 1165–1199.
10. Basit H.A., Smyth W.F., Puglisi S.J., Turpin A., Jarzabek S. Efficient token based clone detection with flexible tokenization // *Proc. 6th Joint Meeting of the European Software Engineering Conference and the ACM SIGSOFT Symposium on the Foundations of Software Engineering, ESEC/FSE2007*. Dubrovnik, Croatia, 2007. P. 513–516.
11. Walsh N., Muellner L. *DocBook: The Definitive Guide*. O'ReillyMedia, 1999. 644 p.
12. Linux Kernel Documentation [Электронный ресурс]. Режим доступа: github.com/torvalds/linux/tree/master/Documentation/DocBook, свободный. Яз. англ. (дата обращения 01.06.2014).
13. Wright C.H.G. Technical writing tools for engineers and scientist // *Computing in Science and Engineering*. 2010. V. 12. N 5. P. 98–103.
14. Фаулер М., Бек К., Брант Д., Апдайк У., Робертс Д. Рефакторинг: улучшение существующего кода : Пер. с англ. СПб: Символ-Плюс, 2013. 432 с.
15. Луговской Н.Л. Подход для проведения рефакторинга «Выделение функции» в инструменте KlocworkInsight // *Труды Института системного программирования РАН*. 2012. Т. 23. С. 107–132.
16. Ицыксон В.М., Моисеев М.Ю., Ахин М.Х., Захаров А.В., Цесько В.А. Алгоритмы анализа указателей для обнаружения дефектов в исходном коде программ // *Системное программирование*. 2009. Т. 4. С. 5–30.
17. Ахин М.Х., Ицыксон В.М. Обнаружение клонов исходного кода: теория и практика // *Системное программирование*. 2010. Т. 5. № 1. С. 145–163.

18. Зельцер Н.Г. Поиск повторяющихся фрагментов исходного кода при автоматическом рефакторинге // Труды Института системного программирования РАН. 2013. Т. 25. С. 39–50.
19. GNU General Public License v2.0 [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.gnu.org/licenses/gpl-2.0.html, свободный. Яз. англ. (дата обращения 01.06.2014).
20. Abadi A., Nisenson M., Simionovici Y. A traceability technique for specifications // Proc. 16th IEEE International Conference on Program Comprehension. 2008. P. 103–112.
21. Krueger C.W. Variation management for software production lines // Proc. 2nd Software Product Line Conference. San Diego, USA, 2002. P. 37–48.
22. Trung H.D., Jarzabek S. DME: Documentation Management Environment for Software Product Lines – Tool Demo Proposal [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.comp.nus.edu.sg/~stan/DME.pdf, свободный. Яз. англ. (дата обращения 01.06.2014).
23. Lee J., Muthig D. Feature-oriented variability management in product line engineering // Communications of the ACM. 2006. V. 49. N 12. P. 55–59.
24. Mei H., Zhang W., Gu F. A feature oriented approach to modeling and reusing requirements of software product lines // Proc. 27th Annual International Conference on Computer Software and Applications, COMPSAC'03. IEEE Computer Society, Washington, USA, 2003. P. 250–256.
25. Grigoriev L., Kudryavtsev D. ORG-master: combining classifications, matrices and diagrams in the enterprise architecture modeling tool // Proc. 4th Conference on Knowledge Engineering and Semantic Web, Communications in Computer and Information Science, CCIS. St. Petersburg, 2013. P. 250–258.
26. Гаврилова Т.А., Кудрявцев Д.В., Горовой В.А. Модели и методы формирования онтологий // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2006. № 46. С. 21–28.
27. Гаврилова Т.А. Об одном подходе к онтологическому инжинирингу // Новости искусственного интеллекта. 2005. № 3. С. 25–31.

- | | |
|---------------------------------------|--|
| <i>Луцив Дмитрий Вадимович</i> | – старший преподаватель, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия; ведущий инженер-программист, ЗАО «Ланит-Терком», dluciv@math.spbu.ru |
| <i>Кознов Дмитрий Владимирович</i> | – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия; dkoznov@yandex.ru |
| <i>Басит Хамид Абдул</i> | – доцент, Университет менеджмента Лахора, Пакистан, hamidb@lums.edu.pk |
| <i>Ли Оу Энг</i> | – преподаватель, Национальный университет Сингапура, issoel@nus.edu.sg |
| <i>Смирнов Михаил Николаевич</i> | – старший преподаватель, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия; директор департамента, ЗАО «Ланит-Терком», m.n.smirnov@math.spbu.ru |
| <i>Романовский Константин Юрьевич</i> | – старший преподаватель, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия; ведущий инженер-программист, ЗАО «Ланит-Терком», kromanovsky@gmail.com |
| <i>Dmitry V. Lutsiv</i> | – senior lecturer, Saint Petersburg State University; leading engineer-programmer, “Lanit-Tercom” Ltd., Saint Petersburg, Russia, dluciv@math.spbu.ru |
| <i>Dmitry V. Koznov</i> | – PhD, Associate professor, Associate professor, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, dkoznov@yandex.ru |
| <i>Hamid Abdul Basit</i> | – PhD, Associate professor, Lahore University of Management Sciences, Lakhora, Pakistan, hamidb@lums.edu.pk |
| <i>Ouh Eng Lieh</i> | – MS; Associate, National University of Singapore, Singapore, issoel@nus.edu.sg |
| <i>Mikhail N. Smirnov</i> | – senior lecturer, Saint Petersburg State University; Department Director, “Lanit-Tercom” Ltd., Saint Petersburg, Russia, m.n.smirnov@math.spbu.ru |
| <i>Konstantin Yu. Romanovsky</i> | – senior lecturer, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, kromanovsky@gmail.com |

*Принято к печати 22.05.14
Accepted 22.05.14*

УДК 004.56

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ СИСТЕМЫ МЕНЕДЖМЕНТА ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПО ВРЕМЕНИ РЕАКЦИИ СИСТЕМЫ НА ИНЦИДЕНТЫ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

Ф.Н. Шаго^а^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, dreamcast73@yandex.ru

Аннотация. Оценивание эффективности системы менеджмента информационной безопасности является важным этапом в циклической взаимосвязи видов деятельности системы менеджмента информационной безопасности, в ходе которого определяется соответствие системы заданным требованиям информационной безопасности организации. Исходя из анализа текущей практики оценивания эффективности систем менеджмента информационной безопасности, можно сделать вывод о том, что в большинстве случаев проводится независимое оценивание отдельных атрибутов информационной безопасности без учета их взаимодействия, в ходе измерений атрибутов не учитывается наличие неопределенности стохастического характера. Существует перечень взаимосвязанных мер и средств контроля и управления, однако конструктивные элементы измерений для оценки данных взаимодействий отсутствуют. Таким образом, возникает важная и актуальная задача совершенствования методологии оценки эффективности системы менеджмента информационной безопасности, решение которой возможно путем введения нового интегрального показателя эффективности системы, который бы позволил учесть вышеуказанные недостатки.

В работе предлагается использовать новый интегральный показатель эффективности – время реакции системы на инциденты информационной безопасности. Использование этого показателя позволит перейти от бинарной оценки эффективности системы «удовлетворяет – не удовлетворяет» к количественной. Предложенный показатель эффективности позволяет учесть неопределенности стохастического характера атрибутов мер и средств управления и контроля, дает количественную оценку состояния информационной безопасности, имеет ясную физическую трактовку для руководства организации и службы информационной безопасности. Динамика изменения показателя от проверки к проверке позволяет судить о состоянии системы менеджмента информационной безопасности в целом и о результативности принимаемых мер и средств управления и контроля. Методика расчета нового показателя эффективности системы менеджмента информационной безопасности основана на применении методологического аппарата теории планирования экспериментов. Достоинство методики – в том, что персоналу службы информационной безопасности предоставляется возможность управления измерениями атрибутов, обеспечивается одинаковая точность оценок параметров атрибутов в процессе измерений, с помощью коэффициентов регрессии выявляется степень взаимодействия атрибутов и их значимость в расчете показателя эффективности системы менеджмента информационной безопасности, а также формируется аналитическая модель показателя эффективности.

Ключевые слова: информационная безопасность, эффективность систем менеджмента информационной безопасности, показатель качества, оценка эффективности.

EFFECTIVENESS ASSESSMENT METHODOLOGY OF INFORMATION SECURITY MANAGEMENT SYSTEM THROUGH THE SYSTEM RESPONSE TIME TO INFORMATION SECURITY INCIDENTS

F.N. Shago^а^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, dreamcast73@yandex.ru

Abstract. Quality assessment of information security management system is an important step for obtaining baseline data for analysis of the security system control effectiveness, and evaluating implementation of the specified information security requirements of the organization. Proceeding from current analysis practice of information security management systems effectiveness assessment, it can be concluded that, in most cases, independent measurement of security control is carried out without regard to their interaction. The uncertainty of the stochastic nature of the measured security controls is not taken into account. There is a list of related measures for control and management; however, structural elements for measuring of these interactions are absent. Thus, there is an important and urgent task of improving the effectiveness assessing methodology for information security management system that can be solved by introducing a new integral effectiveness indicator of the system, which would give the possibility to take into account the above-mentioned shortcomings.

The author proposes the usage of a new integral efficiency indicator - system response time to information security incidents. This efficiency indicator will make it possible to pass from the binary effectiveness assessment of the system "approve or disapprove" to a quantitative one. New performance indicator gives the possibility to take into account the uncertainty of the stochastic nature of the attributes and measures of management and control, provides a quantitative assessment of the information security state and has a clear physical interpretation for the organization management and information security officers. Dynamics of the indicator change from test to test will assess the information security management system state in general and effectiveness of taken control and management measures. The method for calculating of the new information security management system performance indicator is based on the experimental design theory. Its advantages are: information security service staff has an opportunity to control the attributes measurement, the same accuracy of estimates for attribute parameters during the measurement is provided, interaction degree between attributes and their importance in the computation of the effectiveness of information security management is revealed by means of the regression coefficients, and also an analytical model of performance indicator can be obtained.

Keywords: information security, effectiveness of information security management system, ISMS quality index, ISMS efficiency assessment.

Введение

Выполнение мероприятий по оценке эффективности системы менеджмента информационной безопасности (СМИБ) связано с проведением большого объема работ для получения показателей качества СМИБ. Сбор информации о состоянии информационной безопасности (ИБ) организации в циклической взаимосвязи видов деятельности СМИБ осуществляется посредством проведения измерений. В ходе измерения атрибутов объектов измерений изучается документация, проводится интервьюирование сотрудников и технические тесты [1, 2]. Работа с документацией и интервьюирование являются, несомненно, важной частью проверок, однако обладают некоторыми недостатками – ручной сбор информации, низкая степень автоматизации, субъективность оценок, зависимость от уровня компетентности аудитора [2]. Технические тесты позволяют получить количественные оценки показателей качества СМИБ. Проводя тестирование, аудитор выступает в роли легального злоумышленника, внося искусственные нарушения в функционирование СМИБ. Технические методы тестирования могут проводиться с помощью широко известных автоматизированных средств (программный инструмент оценки состояния ИБ – CSET (Cyber Security Evaluation Tool – инструмент оценки кибербезопасности), сетевой сканер XSpider, т.п.). В итоге на основании полученных показателей качества руководством производится анализ эффективности деятельности СМИБ и определяются направления дальнейшего развития системы. В процессе анализа эффективности СМИБ, в соответствии с требованиями руководящих документов [3–5], необходимо оценивать полученные показатели качества мер и средств контроля и управления. В действующей практике показатели оцениваются независимо друг от друга. Методики расчета показателей качества СМИБ не учитывают наличие неопределенности измеряемых атрибутов стохастического характера – например, при оценке рисков во время планирования СМИБ, при оценке недостатков процессов функционирования действующей СМИБ, при использовании мер и средств контроля и управления ИБ, а также ошибки измерений. В конечном итоге оценка эффективности СМИБ сводится к принятию бинарного решения «удовлетворяет – не удовлетворяет» [6]. Таким образом, возникает важная и актуальная задача совершенствования методологии оценки эффективности СМИБ, решение которой возможно путем разработки интегрального показателя эффективности СМИБ, который бы позволил учесть вышеуказанные недостатки и в то же время имел ясную физическую трактовку для руководства организации и службы ИБ. В настоящей работе вводится понятие нового критерия эффективности СМИБ – времени реакции системы на инциденты ИБ, а также предлагается методологический аппарат его вычисления. Выбор в качестве критерия эффективности СМИБ времени реакции системы на инциденты ИБ доказывает руководителю организации рентабельность затрат на построение и развитие СМИБ и способствует повышению качества оценивания текущего состояния СМИБ и улучшению ИБ.

Обоснование интегрального показателя эффективности СМИБ

Для оценивания эффективности СМИБ необходимо проводить измерение показателей качества СМИБ [7]. Цель проводимых измерений заключается в получении оценки эффективности реализованных мер и средств контроля и управления и получении оценки эффективности реализованной СМИБ. Измерения проводятся повсеместно в циклической взаимосвязи видов деятельности СМИБ (их «входов-выходов»), на базе цикла «Планирование–Внедрение–Проверка–Действие» (PDCA, Plan–Do–Check–Act).

В соответствии с циклом деятельности СМИБ PDCA для проверки эффективности реализованной СМИБ необходимо управлять программой измерений для достижения установленных целей измерений на всех этапах деятельности [7, 8]. Особенно это важно для этапа «Внедрение». Измерения на этапе «Внедрение» оказывают существенное влияние на показатели качества СМИБ. Далее, на этапе «Проверка», полученные показатели качества сравниваются с пороговыми критериями, и по результатам проверки принимается решение о соответствии или несоответствии меры и средства контроля и управления СМИБ требованиям.

Регулярные измерения показателей качества СМИБ дают временной срез состояния системы, который будет оцениваться относительно предыдущих результатов измерений. Однако эта информация жестко привязана к времени измерения, и по совокупности полученных показателей невозможно определить, насколько изменилась эффективность СМИБ между периодами проверок. Проблема существующих механизмов получения показателей заключается в том, что при измерении атрибутов объектов измерения все атрибуты, кроме одного, остаются неизменными, их как бы «замораживают», измеряя последовательно в рассматриваемых пределах лишь один атрибут. Не учитывается наличие неопределенностей стохастического характера, например, при оценке рисков во время планирования СМИБ, при использовании мер и средств контроля и управления ИБ, а также недостатки процессов функционирования действующей СМИБ и ошибки измерений.

Как уже говорилось, в конечном итоге оценка показателя качества СМИБ сводится к принятию бинарного решения «удовлетворяет–не удовлетворяет». Таким образом, возникает важная и актуальная задача по разработке интегрального критерия эффективности СМИБ, который бы позволил учесть вышеуказанные недостатки и в то же время имел ясную физическую трактовку для руководства организации и

персонала службы ИБ. Решение этой задачи видится в разработке такого показателя эффективности СМИБ, который будет связан с организацией объективных и повторяемых процессов измерения. Данный показатель будет объективно отражать состояние СМИБ, и на его основании соответствующие заинтересованные стороны смогут определить потребности в усовершенствовании реализованной СМИБ, включая область ее применения, политики, цели, меры и средства контроля и управления, а также процессы и процедуры. В роли такого показателя эффективности СМИБ необходимо принять *время реакции системы на инциденты ИБ*.

Анализ методов оценки эффективности мер и средств управления и контроля СМИБ [5, 8–12] показал, что около 80% от общего перечня мер и средств управления и контроля оценивается по временным показателям – например, по времени обнаружения инцидента ИБ, времени внесения информации об инциденте ИБ в базу данных, времени блокирования несанкционированного действия нарушения ИБ, времени оповещения персонала службы ИБ организации об инциденте ИБ. В зависимости от того, какой компонент системы реагирует на инцидент (СОВ – защита периметра сети от вторжений, изменение политик безопасности, управление системой физического и логического доступа и множество других компонентов), меняется не только время реакции, но и оценка скорости реакции. Для некоторых ситуаций хорошим результатом является практически мгновенная реакция, изменение политик безопасности может потребовать несколько недель или даже месяцев.

Время реакции СМИБ на инциденты ИБ может выступать интегральным показателем эффективности СМИБ:

$$T_{рсИБ} = \sum_{i=1}^k (T_{обнИБ_i} + T_{блокИБ_i} + T_{регИБ_i} + T_{оповИБ_i}),$$

где k – количество атрибутов, подлежащих измерению; $T_{рсИБ}$ – время реакции СМИБ на инцидент ИБ; $T_{обнИБ_i}$ – время обнаружения инцидента ИБ; $T_{блокИБ_i}$ – время блокирования несанкционированных действий по нарушению ИБ; $T_{регИБ_i}$ – время регистрации события, связанного с инцидентом ИБ; $T_{оповИБ_i}$ – время оповещения персонала службы ИБ о выявленном инциденте ИБ.

Для расчета показателя необходимо разделение мер и средств управления и контроля для выполнения проверок на группы по времени реагирования на инцидент ИБ. Например, можно установить такой вид группирования:

- немедленный контроль (время реакции – несколько минут ($T_{рсИБ} \leq 10$ мин));
- суточный контроль (время реакции – в течение суток ($T_{рсИБ} \leq 24$ ч));
- контроль изменения политик ИБ (время реакции – в течение нескольких суток ($T_{рсИБ} \leq 10$ сут)).

Динамика изменения интегрального показателя $T_{рсИБ}$ от проверки к проверке позволит судить о состоянии системы в целом, о результативности принимаемых мер и средств управления и контроля. В формировании данного показателя будет учитываться уникальность СМИБ организации. Дополнительно получение показателя $T_{рсИБ}$ может быть встроено в обычные процессы функционирования СМИБ и выполняться через постоянные интервалы времени, определяемые руководством СМИБ.

Изменения, вносимые методикой получения интегрального показателя в модель измерений СМИБ, связывающую информационную потребность с соответствующими объектами измерений и их атрибутами, позволит получать воспроизводимые, объективные и пригодные результаты измерений (рисунок).

Методика получения показателя эффективности СМИБ позволит исследовать взаимное влияние показателей качества объектов измерений. В руководящих документах [5, 9] определен перечень взаимосвязанных конструктивных элементов измерений. Однако существующий перечень представляет только базовые взаимодействия и не учитывает особенности СМИБ организации. В рамках работы по совершенствованию оценки эффективности СМИБ и получения достоверных результатов измерения показателей качества СМИБ предлагается использование стохастических аналитических моделей, в частности, статистических. Данные модели предпочтительны потому, что учитывают вероятностную составляющую атрибутов (факторов), которые подлежат измерению; кроме того, случайное воздействие может подаваться на вход модели измерений как в процессе проведения измерений, так и от датчиков случайных чисел, применяемых в самой модели. Еще одним достоинством применения статистической модели является то, что в ней самой уже заложен алгоритм статистической обработки результатов измерений. Наиболее выгодным, с точки зрения достижения результативности измерений, является широкое использование в качестве аналитических моделей для показателя эффективности СМИБ модели регрессионного анализа. Преимущество данной модели относительно других статистических моделей (дисперсионного, корреляционного, параметрического анализа и др.) состоит в том, что, помимо получения вывода о причинно-следственном механизме исследуемых зависимостей, получают конкретные сведения о форме и виде зависимости. Помимо этого, аппарат регрессионного анализа широко представлен во всех современных программных средствах математической автоматизации (таких как семейство Mathcad, Scilab, GNU Oc-

tave, Mathematica, MATLAB и др.), и в автоматизированных средствах обработки статистических данных (STATISTICA, SYSTAT, JMP и т.д).

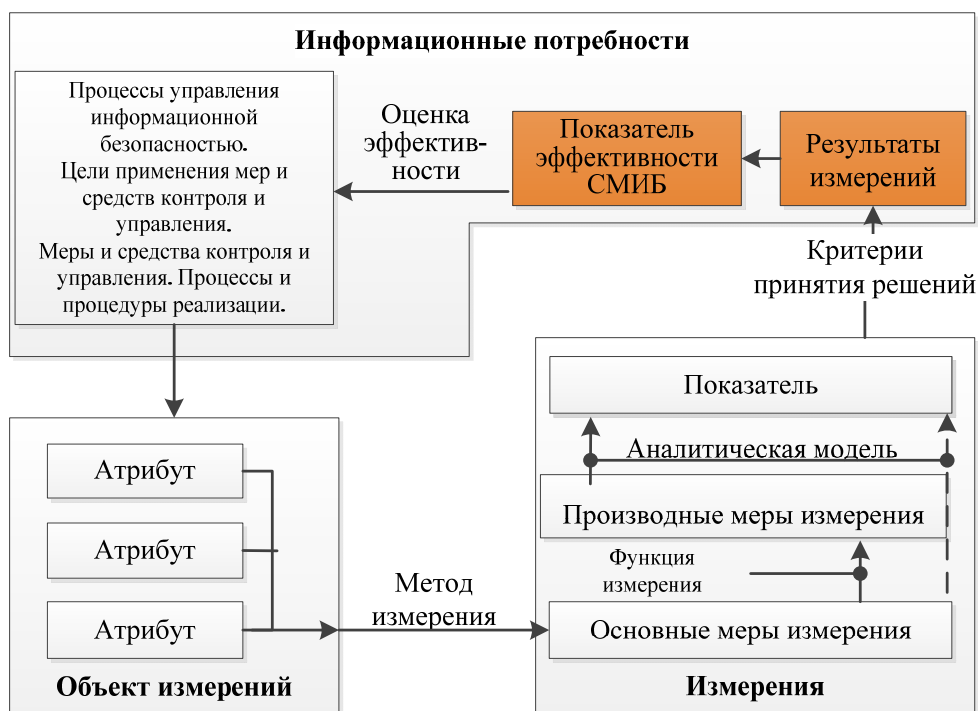


Рисунок. Изменение модели измерений СМИБ, связанные с получением обобщающего показателя эффективности СМИБ

Выбор аппроксимирующего полинома для показателя эффективности СМИБ

Для исследуемых мер и средств управления и контроля СМИБ функция отклика (аналитической модели), описывающей показатель эффективности СМИБ, трудно поддается простому аналитическому описанию [13, 14]. Целесообразно произвести аппроксимацию зависимой переменной в виде алгебраического полинома. Допустим, что необходимо изучить влияние k количественных атрибутов x_1, x_2, \dots, x_k на некоторый отклик η в определенной для измерений локальной области пространства атрибутов (факторов). Функцию отклика $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_k)$ можно с достаточной точностью представить в виде полинома степени $m \geq 2$ от k переменных [14]:

$$\eta = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i x_j + \dots + \sum_{i_1=1}^k \dots \sum_{i_m=1}^k b_{i_1, i_2, \dots, i_m} \cdot x_{i_1} \cdot x_{i_2} \cdot \dots \cdot x_{i_m}. \quad (1)$$

Коэффициенты b_0 и b_i описывающего полинома (1) характеризуют степень влияния рассматриваемых атрибутов измерений на функцию отклика. Например, аппроксимация полиномом второго порядка функциональной зависимости показателя эффективности от одного независимого атрибута (переменной) (однофакторная модель) может быть представлена в виде следующего уравнения регрессии:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_{11} x_1^2.$$

Аппроксимирующий полином второго порядка с учетом зависимости от двух атрибутов может быть представлен в виде

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2.$$

Более сложные СМИБ требуют применения полиномов с большим числом учитываемых атрибутов и большим порядком. Сформулировать однозначные рекомендации о выборе необходимой степени аппроксимирующего полинома трудно, поэтому одна и та же СМИБ вполне может быть описана различными аппроксимирующими полиномами. При выборе вида полинома или типа регрессионной модели необходимо руководствоваться характером исследуемого физического процесса, связанного с мерой и средством контроля и управления ИБ. Отметим, что выбор общего вида функции регрессии (параметризация модели) является ключевым и окажет существенное влияние на точность восстановления неизвестной функции отклика $\Psi(X)$ в дальнейшем. В настоящее время не существует системы стандартных методов и рекомендаций, образующих строгую теоретическую базу для эффективного выбора аппроксимирующего полинома. Выбор общего вида уравнения регрессии [14] должен быть связан с тремя основными моментами:

1. максимальное использование априорной информации о содержательной (физической, экономической и т.п.) сущности анализируемой зависимости;
2. предварительный анализ геометрической сущности анализируемой зависимости;

3. использование различных статистических приемов обработки исходных данных, предоставляющих выбор из нескольких сравниваемых вариантов.

На практике для аппроксимации неизвестной функции регрессии чаще применяются линейные уравнения регрессии. Зачастую использование линейной или полиномиальной регрессии не позволяет получить желаемую точность приближения. В этом случае приходится использовать другие виды зависимостей: гиперболическую, степенную, показательную и др. В ряде ситуаций применение этих зависимостей более удобно, так как путем преобразования удается привести их к линейному виду [14, 15].

При классическом (традиционном) методе измерений все атрибуты, кроме одного, остаются неизменными, их как бы «замораживают», изменяя последовательно в рассматриваемых пределах лишь один атрибут. Подобный метод обладает рядом недостатков, наиболее существенный из которых состоит в том, что при этом методе не удастся в полной мере выявить влияние взаимодействия атрибутов [16].

Проводя измерения в условиях, соответствующих некоторому значению вектора \mathbf{x} , можно получить результаты измерений, в общем случае представляющие собой случайные величины, поэтому обычно говорят о функциональной зависимости среднего значения искомой характеристики от контролируемых атрибутов. Эта зависимость в общем виде может быть представлена так:

$$E(y/\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}; \mathbf{B}),$$

где $E(y/\mathbf{x})$ – среднее значение искомой величины y ; \mathbf{x} – вектор-столбец, координаты которого – управляемые переменные, принадлежащие данному пространству атрибутов; $\eta(\mathbf{x}; \mathbf{B})$ – функция отклика, зависящая от неизвестных параметров $b_i \in \mathbf{B}$ ($i = 1, 2, \dots, m$).

Чтобы определить параметры b_i , необходимо выбрать в данном пространстве атрибутов некоторую совокупность точек, пригодных для выполнения измерений в процессе проверки. Если при выборе точек осуществлять одновременное варьирование несколькими переменными (x_1, x_2, \dots, x_k), то результаты проверок будут получены с учетом эффекта взаимодействия атрибутов.

Таким образом, задача, связанная с получением наилучшего представления о влиянии выбранных переменных на функцию отклика показателя эффективности СМИБ, сводится к выбору оптимального в некотором смысле расположения точек в пространстве атрибутов. Очевидно, что при различном подходе к выбору расположения точек значения оценок b_i могут отличаться друг от друга. Выбор наилучшего варианта модели измерений, приводящей к лучшим оценкам в смысле их близости к истинным значениям b_i , можно основывать в классе линейных оценок на сравнении дисперсионных матриц $\mathbf{D}(b)$ или некоторых комбинаций из их элементов.

Применение факторного планирования для расчета показателя эффективности СМИБ

Для построения функции отклика, описывающей показатель эффективности СМИБ, предлагается воспользоваться научно-методическим аппаратом теории планирования эксперимента. В литературе, посвященной теории планирования эксперимента [16, 17], можно встретить описание А-, Е-, G- и D-оптимальных планов, удовлетворяющих различным критериям. При достаточно большом числе учитываемых факторов (атрибутов) с целью уменьшения числа измерений прибегают к построению планов второго порядка, близких к D-оптимальным планам.

D-оптимальный план обеспечивает одинаковую точность оценок параметров на равных удалениях во всех направлениях от центральной точки измерения. Если ковариационная матрица оценок параметров имеет вид $c\mathbf{I}$, где c – постоянная, а \mathbf{I} – единичная матрица, то утверждается, что критерии оптимальности в смысле D, E, A совпадают. План, удовлетворяющий этим критериям, является ортогональным и ротатабельным [16, 17].

В ортогональных факторных планах каждый фактор варьирует симметрично относительно начала координат на двух уровнях. В выбранной области проведения измерений устанавливается основной уровень x_i^0 и определяется интервал варьирования. Основной уровень может либо соответствовать номинальным значениям параметров, либо выбираться в центре области их изменения, подлежащей проверке. Интервал варьирования J_{x_i} устанавливается симметрично относительно основного уровня по формуле

$$J_{x_i} = \frac{x_i^B - x_i^H}{2}, \quad (2)$$

где x_i^B, x_i^H – верхнее и нижние натуральные значения фактора.

Переход к безразмерной системе координат (нормировка) осуществляется по формулам

$$\frac{x_i^{\max} - x_i^0}{J_{x_i}} = +1, \quad \frac{x_i^{\min} - x_i^0}{J_{x_i}} = -1. \quad (3)$$

Из-за особенностей проверяемой СМИБ возможность варьирования некоторых атрибутов может быть существенно ограничена по отношению к возможности варьирования других атрибутов. Это может сказываться на адекватности математической модели. Для учета данного обстоятельства предлагается осуществлять расчет интервала варьирования в соответствии с формулой

$$J_{x_i} = q_{\min} \cdot \Delta x_i^{\alpha},$$

где

$$q_{\min} = \min_i \left\{ q_i = \frac{\Delta x_i^a}{\Delta x_i^S} \right\},$$

Δx_i^a – предельно возможный интервал изменения атрибута в условиях проверяемой СМИБ; Δx_i^S – предельно возможный интервал изменения атрибута.

Свойство ортогональности обеспечивает значительные упрощения последующих вычислений.

Подобные ортогональные факторные планы обладают рядом отличительных свойств. При выполнении условий и свойств составления плана коэффициенты уравнения регрессии b получаются с минимальными и равными ошибками.

Допустим, что в ходе измерений необходимо получить показатель эффективности СМИБ, учитывая взаимодействие двух ($k = 2$) мер и средств управления и контроля – «Контроль доступа в запрещенную зону» (п.А.9.1.2 приложения А ГОСТ [4]) и «Управление съемными носителями информации» (п.А.10.7.1 приложения А ГОСТ [4]). Для исследования выбрано уравнение регрессии

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2. \tag{4}$$

Количество различных экспериментов N определяется числом всех неповторяющихся комбинаций, которые можно составить из k рассматриваемых независимых переменных, имеющих по два уровня, и будет равно 2^k . Осуществление всех 2^k возможных и неповторяющихся комбинаций реализуется в *полном факторном плане*. Структура плана, соответствующая выбранному уравнению регрессии (4) и требованиям D-оптимального плана, представлена в табл. 1.

Опыт	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	y
1	+1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

Таблица 1. Матрица проведения измерений, отвечающая требованиям D-оптимального плана, в соответствии с выбранным для исследования уравнением регрессии (4)

Добавим к исследуемым атрибутам еще одну независимую переменную ($k = 3$) меру управления и контроля «Управление изменениями» (п.А.10.1.2 приложения А ГОСТ [4]), и изменим вид регрессионного уравнения:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3. \tag{5}$$

План проведения исследований для сочетаний различных уровней независимых переменных при $k = 3$ будет уже иметь вид (табл. 2).

Опыт	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$	y	\hat{y}
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1	9
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2	5
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3	6
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4	11
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5	7
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6	9
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7	8
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8	13
b_j	$b_0 = 8,5$	1	1	0,75	1,5	0,75	0,25	-0,75		

Таблица 2. Матрица проведения измерений, отвечающая требованиям D-оптимального плана, в соответствии с выбранным для исследования уравнением регрессии (5)

Несложно заметить, что в табл. 2 дважды повторена матрица для $k = 2$ (табл. 1), первый раз для значений x_3 на нижнем уровне (-1) и повторно для значений x_3 на верхнем уровне (+1).

Вычисление коэффициентов регрессии b производится с помощью простой формулы:

$$b_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ij} y_i. (j = 1, 2, \dots, m), \tag{6}$$

где N – число экспериментов, проведенных в соответствии с выбранным планом; x_{ij} – нормированное значение (3) атрибута j в зависимости от опыта i ; y_i – значение функции отклика, полученное в опыте i ; m – количество факторов и их сочетаний, представленных в матрице планирования. Для примера покажем расчет некоторых коэффициентов регрессии:

$$b_0 = \frac{9 \cdot (+1) + 5 \cdot (+1) + 6 \cdot (+1) + 11 \cdot (+1) + 7 \cdot (+1) + 9 \cdot (+1) + 8 \cdot (+1) + 13 \cdot (+1)}{8} = 8,5,$$

$$b_1 = \frac{9 \cdot (-1) + 5 \cdot (+1) + 6 \cdot (-1) + 11 \cdot (+1) + 7 \cdot (-1) + 9 \cdot (+1) + 8 \cdot (-1) + 13 \cdot (+1)}{8} = 1,$$

....

$$b_8 = \frac{9 \cdot (-1) + 5 \cdot (+1) + 6 \cdot (+1) + 11 \cdot (-1) + 7 \cdot (+1) + 9 \cdot (-1) + 8 \cdot (-1) + 13 \cdot (+1)}{8} = 0,75.$$

Коэффициенты b_i определяются независимо, что имеет существенное значение при переходе к более сложной форме уравнения связи (нет необходимости пересчитывать полученные ранее значения коэффициентов).

Допустим, что в ходе измерений в соответствии с матрицей эксперимента (табл. 2), в столбце « \hat{y} » были записаны значения времени реакции СМИБ (в минутах) на инциденты ИБ, при условиях совместного влияния трех факторов (атрибутов). После вычисления коэффициентов регрессии b_i уравнение регрессии (5) примет следующий вид:

$$\hat{y} = 8,5 + x_1 + x_2 + 0,75x_3 + 1,5x_1x_2 + 0,75x_1x_3 + 0,25x_2x_3 - 0,75x_1x_2x_3.$$

Далее проверяем значимость коэффициентов регрессии, а также адекватность полученной зависимости исследуемому процессу [16, 17].

К сожалению, существенным недостатком полных факторных планов является быстрый рост числа измерений с ростом числа факторов (в 2^k раз). В случае, когда взаимодействия второго и выше порядка отсутствуют или малы, целесообразно реализовать матрицу планирования, содержащую лишь часть полного факторного плана, в противном случае перейти к дробному факторному плану. Сущность применения такого планирования сводится к сокращению числа членов полинома за счет смешивания основных факторов с теми факторами, которые на основании априорных или экспертных оценок слабо влияют на изучаемый процесс [16–18]. Для рассмотренного выше уравнения регрессии, допустив, что взаимные смешения основных факторов ничтожны, можно ввести в план дополнительно до четырех факторов (атрибутов) (табл. 3).

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$	y
					x_4	x_5	x_6	x_7	

Таблица 3. Ввод новых атрибутов, для исследования влияния на функцию отклика показателя качества СМИБ, вместо сочетаний атрибутов, оказывающих слабое влияние на исследуемый процесс

Дробный факторный план (ДФП) имеет вид 2^{k-p} , где p – количество факторов, введенных посредством замещения исключаемых из рассмотрения взаимодействий, и существенно сокращает число измерений при проверке. В рассмотренном выше примере при построении полного факторного эксперимента для $k = 3$ необходимо проведение 8 измерений, если же ввести еще один фактор x_4 и приравнять x_4 двойному взаимодействию x_1x_2 , то количество опытов останется неизменным, а вместо полного факторного плана 2^4 получим полуреплику 2^{4-1} , что соответствует линейному уравнению регрессии

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4.$$

Коэффициенты регрессии в таком случае будут представлены в виде смешанных оценок генеральных коэффициентов: $b_1 = \beta_1 + \beta_{234}$, $b_2 = \beta_2 + \beta_{134}$, $b_3 = \beta_3 + \beta_{124}$, $b_4 = \beta_4 + \beta_{123}$, т.е. коэффициенты β_i , не удастся оценить отдельно [14].

Генерирующие соотношения можно составлять таким образом, чтобы в зависимости от наличия предварительных сведений получать полуреплики, сокращающие вдвое число опытов по сравнению с полным факторным экспериментом, или четвертьреплики, уменьшающие количество опытов в четыре раза, и т.д. Для определения того, какие оценки являются смешанными, используют определяющий контраст [16–18].

В соответствии с вышесказанным методика расчета показателя эффективности СМИБ включает в себя следующие процедуры.

1. Осуществить выбор требуемого количества атрибутов k и требуемого числа измерений N .
2. Исходя из априорных данных и экспертных оценок, выбрать аппроксимирующую модель, описывающую функциональную зависимость времени реакции СМИБ на инциденты ИБ, с учетом выбранных атрибутов.
3. Определить интервалы варьирования для атрибутов с учетом особенности СМИБ организации (2) по формуле (3).
4. Выбрать факторный план проведения измерений, полный (для $k \leq 3$) или дробный (для $k > 3$).
5. Составить матрицу плана, удовлетворяющую требованиям D-оптимального плана, определить правила получения коэффициентов регрессии b_i в соответствии с выбранным планом.
6. Провести измерения, варьируя параметры атрибутов, в соответствии с матрицей плана.
7. Рассчитать коэффициенты регрессии b_i по результатам измерений (6).
8. Проверить полученную модель показателя на значимость коэффициентов регрессии, а также на адекватность исследуемому процессу.

Таким образом, предложенный показатель эффективности позволяет учесть неопределенности стохастического характера атрибутов объектов измерения, получить количественную оценку состояния ИБ, имеет ясную физическую трактовку для руководства организации и службы ИБ. Динамика его изменения от проверки к проверке позволит судить о состоянии СМИБ в целом, о результативности прини-

маемых мер и средств управления и контроля. Предложенная методика оценки эффективности СМИБ заключается в применении методологического аппарата теории планирования экспериментов для расчета времени реакции СМИБ на инциденты ИБ. Достоинством методики является то, что она дает возможность управления измерениями атрибутов, обеспечивает одинаковую точность оценок параметров атрибутов в процессе измерений, с помощью коэффициентов регрессии позволяет выявить влияние взаимодействия атрибутов и их значимость в расчете показателя эффективности СМИБ, а также позволяет получить аналитическую модель показателя эффективности СМИБ.

Заключение

Оценивание эффективности СМИБ является важным этапом в циклической взаимосвязи видов системы. На этом этапе оценивается степень реализации заданных требований информационной безопасности организации. Организация данного процесса оказывает существенное влияние на точность и достоверность оценок показателей качества СМИБ.

В ходе решения задачи совершенствования методологии оценки эффективности СМИБ автором предлагается использование нового интегрального показателя эффективности – времени реакции системы на инциденты ИБ. Использование данного показателя эффективности позволит перейти от бинарной оценки эффективности системы «удовлетворяет – не удовлетворяет» к количественной.

Показаны роль и место нового показателя эффективности СМИБ в цикле деятельности системы, а также изменения, вносимые в модель измерений в связи с расчетом показателя. Предложен выбор статистической модели, описывающей функцию отклика нового показателя эффективности системы. Для расчета нового показателя эффективности СМИБ предложена методика, основанная на использовании аппарата теории планирования эксперимента, в частности, выбор уравнения регрессии, построение факторных планов и получение коэффициентов регрессии. Приведен пример построения матрицы измерений с участием трех атрибутов, рассчитаны коэффициенты регрессии для функции отклика, описывающей показатель эффективности СМИБ. Выбор в качестве показателя эффективности времени реакции системы на инциденты ИБ может служить обоснованием для руководителей организации, рентабельности затрат на построение и развитие СМИБ и способствует повышению качества оценивания эффективности системы.

Литература

1. ISO/IEC 19011:2011. Guidelines for auditing management systems. 11.11.2011. Geneva, International Organization for Standardization. 44 p.
2. Аксенов В.В. Аудит системы менеджмента информационной безопасности. Руководство [Электронный ресурс]. Режим доступа: itsec.by/wp-content/uploads/2012/10/Auditors-Guide-ISO-27001-on-Russian.pdf, свободный. Яз. рус. (дата обращения 20.04.2014).
3. ISO/IEC 27000:2013. Information security management systems – Overview and vocabulary. 14.01.2013. Geneva, International Organization for Standardization. 25 p.
4. ISO/IEC 27001:2013, Information security management systems – Requirements. 25.09.2013. Geneva, International Organization for Standardization. 23 p.
5. Приказ ФСТЭК России №17. Об утверждении требований о защите информации, не составляющей государственную тайну, содержащейся в государственных информационных системах. Введ. 11.02.2013. М.: ФСТЭК РФ. 37 с.
6. Зикратов И.А., Одегов С.В., Смирных А.В. Оценка рисков информационной безопасности в облачных сервисах на основе линейного программирования // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2013. № 1 (83). С. 141–144.
7. ГОСТ Р ИСО/МЭК 27004-2011. Информационная технология. Методы и средства обеспечения безопасности. Менеджмент информационной безопасности. Измерения. Введ. 01.01.2012. М.: Стандартинформ, 2012. 62 с.
8. Шаго Ф.Н., Зикратов И.А. Методика оптимизации планирования аудита системы менеджмента информационной безопасности // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2014. № 2 (90). С. 111–117.
9. Critical Security Controls for Effective Cyber Defense [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.sans.org/critical-security-controls/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 20.04.2014).
10. Зикратов И.А., Одегов С.В. Оценка информационной безопасности в облачных вычислениях на основе байесовского подхода // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2012. № 4 (80). С. 121–126.
11. Catteddu D., Hogben G. Cloud computing: benefits, risks and recommendations for information security. Heraklion: ENISA, 2009. 125 p.
12. Macaulay T. Upstream intelligence: anatomy, architecture, case studies and use-cases // Information Assurance Newsletter. 2011. V. 14. P. 18–22.

13. Мартыщенко Л.А., Ивченко В.П., Монастырский М.Л. Теоретические основы информационно-статистического анализа сложных систем. СПб: Лань, 1997. 320 с.
14. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика. Исследование зависимостей. М.: Финансы и статистика, 1985. 487 с.
15. Лебедев А.Н., Куприянов М.С., Недосекин Д.Д., Чернявский Е.А. Вероятностные методы в инженерных задачах: Справочник. СПб: Энергоатомиздат, 2000. 333 с.
16. Зедгенидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. М.: Наука, 1976. 390 с.
17. Бендат Дж., Пирсол А. Прикладной анализ случайных данных: Пер. с англ. М.: Мир, 1989. 540 с.
18. Спиридонов А.А. Планирование эксперимента при исследовании технологических процессов. М.: Машиностроение, 1981. 184 с.

Шаго Федор Николаевич – аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, dreamcast73@yandex.ru
Fedor N. Shago – postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, dreamcast73@yandex.ru

Принято к печати 24.04.14
Accepted 24.04.14

УДК 004.932

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ДВИЖУЩЕГОСЯ ЧЕЛОВЕКА В СИСТЕМАХ ВИДЕОНАБЛЮДЕНИЯ

А.Ю. Соломатин^а, А.С. Люберт^а, И.А. Зикратов^б^а ООО Смартэг, Санкт-Петербург, Россия^б Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, zikratov@cit.ifmo.ru

Аннотация. Предложен подход для решения задачи идентификации движущегося человека в системах видеонаблюдения. Задача решается в два последовательных этапа. На первом этапе в видеопотоке выделяется движение человека на фоне движения других объектов. На втором этапе проводится идентификация человека по изображению лица. Обнаружение движения человека осуществляется путем представления исходного видеопотока в виде временного ряда. Для этой цели применен математический аппарат исследования сингулярного спектра. Наличие движения определяется путем анализа периодических составляющих временного ряда, построенного на основе данных о цветовых и яркостных компонентах видеок кадров исходного видеопотока. Идентификация человека по изображению лица реализуется путем представления изображения лица в виде двумерной матрицы с последующим применением математического аппарата иммунокомпьютинга. Для идентификации человека по изображению лица вычисляется энергия связи между объектами. Эта величина характеризует степень близости входного изображения лица к лицам, находящимся в обучающей выборке. Представленное в работе решение задачи идентификации движущегося человека дает возможность работы с видеопотоком низкого качества, имеющим высокий уровень шума либо артефакты сжатия при кодировании. Достоинством метода является простота реализации. В отличие от традиционных методов компьютерного зрения, предложенный метод не требует значительных вычислительных затрат, благодаря сведению процедуры анализа к выполнению простых числовых операций. Метод также не требует предварительной фильтрации изображений видеок кадров, что позволяет значительно увеличить скорость работы.

Ключевые слова: видеонаблюдение, определение движения, анализ временных рядов, анализ периодических компонент, классификация объектов, идентификация физических лиц, иммунокомпьютинг.

MOVING PERSON IDENTIFICATION IN VIDEO SURVEILLANCE SYSTEMS

A.I. Solomatina^a, A.S. Lyubert^a, I.A. Zikratov^b^a Smartag LLC, Saint Petersburg, Russia^b ITMO University, Saint Petersburg, Russia, zikratov@cit.ifmo.ru

Abstract. The paper deals with an approach for a moving person identifying in video surveillance systems. The proposed solution consists of two successive stages. Selecting of a moving human from all other moving objects in a video stream takes place at the first stage. Human identification based on facial image takes place at the second stage. Detection of a human's movement is performed via representation of the original video stream in a form of time series. Mathematical apparatus of a singular spectrum is applied for that purpose. The presence of motion is determined by analyzing the periodic components of time series constructed from color and brightness data of the original components of initial video stream. Identification of a person based on his facial image is done through representation of a facial image via two-dimensional matrix with the subsequent application of immune computing mathematical apparatus. Then the binding energy is calculated which shows similarity between the input facial image and faces stored in the training set. The proposed solution for a problem of a moving person's identifying gives the opportunity to work with low quality video stream having a high level of noise or compression artifacts after encoding. The advantage of the method is implementation simplicity. Unlike traditional methods of computer vision, the proposed method does not require significant computational burden due to simple numerical operations. This method does not require pre-filtering of video images, therefore its performance speed is significantly increased.

Keywords: video surveillance, motion detection, time series analysis, periodic components analysis, object classification, face identification, immune computing

Введение

В настоящее время постоянно увеличивается число систем и камер видеонаблюдения, решающих определенный набор задач информационной безопасности. Одной из наиболее актуальных, особенно в коммерческом использовании, задач является идентификация движущегося человека при видеонаблюдении. Автоматизация решения этой задачи позволяет существенно снижать временные и трудовые затраты в момент осуществления видеосъемки, а также при анализе отснятого видеоматериала [1]. Кроме того, появляется возможность снижать влияние человеческого фактора в течение всего времени видеонаблюдения за охраняемым периметром.

Задачу идентификации движущегося человека в настоящей работе предлагается решать в два этапа:

1. определение движения человека в видеопотоке;
2. идентификация человека по изображению лица.

Этап выявления движения человека в системах видеонаблюдения основан на анализе периодических колебаний цветовых и яркостных компонент видеопотока, возникающих вследствие присутствия характерных фаз движения объекта. В качестве основного математического аппарата метода используется быстро развивающийся метод анализа временных рядов [2–5], применяющийся в различных областях, таких как климатология, геофизика, техника, обработка изображений, эконометрика и т.п.; для решения

задач общего назначения, таких как выделение тренда, обнаружение периодичностей, корректировка на сезонность, сглаживание и подавление шума.

Этап идентификации человека по изображению лица, попадающего в поле зрения видеокамер, основывается на способе формирования обучающей выборки и математическом аппарате иммунокомпьютинга. Выбор научно-методического аппарата иммунокомпьютинга не случаен и базируется на различных литературных источниках, в которых показано, что в реальных задачах распознавания образов иммунокомпьютинг превосходит конкурентов по простоте реализации, быстродействию и безошибочности распознавания [6–9].

В рамках решения частных задач исследования разработано несколько программных решений, наглядно демонстрирующих работоспособность предлагаемых методов для задачи идентификации движущегося человека в системах видеонаблюдения.

Обнаружение движения человека

Основная идея метода заключается в преобразовании исходного видеопотока в числовой временной ряд с последующим разложением на составляющие компоненты – тренд, периодические колебания и шум. Возможность определения наличия в кадре движения человека или подобного объекта обусловлена присутствием в его движении повторяющихся фаз (сгибание/разгибание конечностей, изменение освещенности отдельных областей объекта) [10]. В большинстве случаев частота изменения данных фаз совпадает с частотой колебаний частей тела субъекта, что позволяет классифицировать его по данным признакам.



Рис. 1. Фазы движения человека

На рис. 1 показана раскадровка тестового видео с изображением движущегося человека на белом фоне со скоростью движения порядка 130 шагов в секунду. На данном видеофрагменте наиболее четко выражены периодические фазы движения, что в совокупности с отсутствием заднего фона сцены позволяет исследовать характеристики движения посредством анализа временного ряда, составленного на основе данных видеопотока. В качестве исходных статистических данных видеокadra для построения временного ряда необходимо выбрать величину, наилучшим образом характеризующую содержимое данного видеокadra, а также позволяющую получить данное значение с наименьшей потерей производительности [11, 12]. В данном случае была выбрана величина, равная сумме всех точек видеокadra, представленных в оттенках серого:

$$F = \sum 0,299 R_{ij} + 0,587 G_{ij} + 0,114 B_{ij},$$

где R_{ij} , G_{ij} , B_{ij} – цветовые компоненты точек видеоизображения.

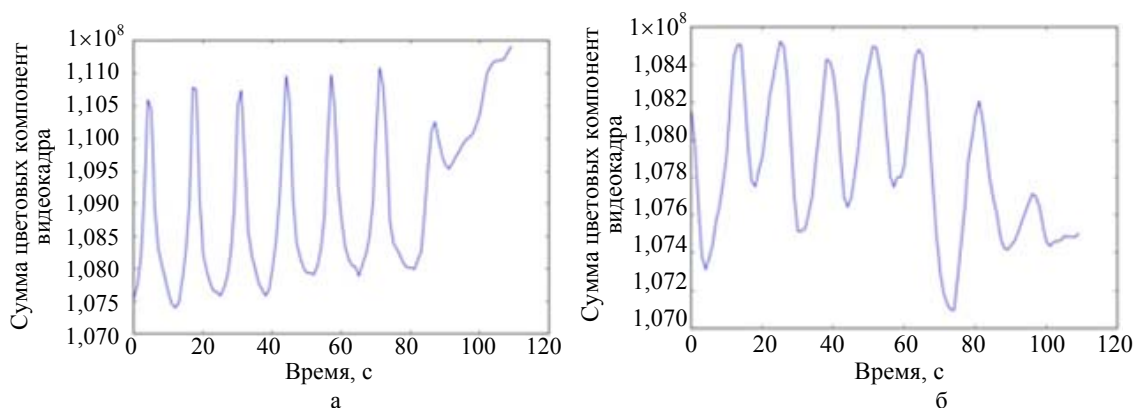


Рис. 2. Зависимость суммы цветовой компонент видеокadra при движении: перпендикулярно направлению обзора камеры (а); по направлению обзора камеры (б)

На рис. 2 показаны графики временного ряда, построенного на основе вышеуказанных видеофрагментов. На определенных интервалах временного ряда период колебаний совпадает с периодом фазы движения объекта, что показывает возможность анализа коротких фрагментов видеопотока на наличие движения путем разложения исходного временного ряда на периодические компоненты и отделения их от других составляющих ряда. При анализе реальных видеопотоков с камер видеонаблюдения кроме периодических колебаний, определяющих движение, необходимо также учитывать периодические составляющие, возникающие в момент изменения участка фона позади движущегося объекта. Компенсация этих колебаний необходима для правильного определения периодических составляющих, принадлежащих конкретному объекту. Таким образом, базовое разложение исходного временного ряда может быть представлено в виде следующей формулы:

$$F(t) = B - \sum_i G_i(t) + \sum_i M_i(t) + N,$$

где B – компонента величины яркости заднего фона; G_i – периодическая компонента изменения заднего фона за i -м объектом; M_i – периодическая компонента движения i -го объекта; N – компонента шума.

Описываемый в работе метод разложения исходного ряда базируется на анализе временных рядов SSA («Гусеница»). Последний может быть использован без предварительного задания модели ряда, а также позволяет разложить ряд в сумму интерпретируемых компонент, таких как тренд, периодические компоненты и шум, без знания параметрической формы этих компонент, что полностью удовлетворяет требованиям задачи разложения временного ряда видеопотока.

В базовом методе SSA определены два параметра. Первый – целое число L – длина окна; второй параметр является структурным – это способ группировки собственных троек (компонент сингулярного разложения траекторной матрицы ряда). Базовый алгоритм SSA состоит из 4 шагов:

1. вложение;
2. сингулярное разложение;
3. группировка;
4. диагональное усреднение.

На первом шаге процедура вложения переводит исходный временной ряд в последовательность многомерных векторов. Строится траекторная матрица \mathbf{X} исходного ряда размером $L \times K$ таким образом, что матрица \mathbf{X} является ганкелевой, т.е. \mathbf{X} имеет одинаковые элементы на антидиагоналях.

Результатом второго шага является сингулярное разложение матрицы (SVD, Singular Value Decomposition) траекторной матрицы ряда. Сингулярное разложение траекторной матрицы \mathbf{X} может быть записано как

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^d \mathbf{X}_i = \sum_{i=1}^d \sqrt{\lambda_i} \mathbf{U}_i \mathbf{V}_i^T,$$

где матрицы \mathbf{X}_i имеют ранг 1 и называются элементарными матрицами. Набор $(\sqrt{\lambda_i}, \mathbf{U}_i, \mathbf{V}_i)$ называется i -й собственной тройкой сингулярного разложения. Матрицы \mathbf{U}_i и \mathbf{V}_i называются левыми и правыми сингулярными векторами матрицы \mathbf{X} соответственно, $\sqrt{\lambda_i}$ – сингулярные числа.

На третьем шаге на основе разложения процедура группировки делит все множество индексов на непересекающиеся подмножества. Процедура выбора данных подмножеств называется группировкой собственных троек.

На последнем шаге базового алгоритма каждая матрица сгруппированного разложения ганкелизуется (усредняется по антидиагоналям), а затем полученная ганкелева матрица трансформируется в новый временной ряд длины N на основе взаимно-однозначного соответствия между ганкелевыми матрицами и временными рядами. Диагональное усреднение, примененное к каждой результирующей матрице, приводит восстановленные ряды. Таким образом, исходный ряд раскладывается в сумму восстановленных рядов:

$$x_n = \sum_{k=1}^m \bar{x}_n^{(k)}. \quad (1)$$

Равенство (1) является главным результатом алгоритма SSA для анализа временного ряда. Это разложение имеет смысл, если каждая из его компонент может быть интерпретируема как либо тренд, либо колебания (периодики), либо шум. Выбор параметров алгоритма SSA является одной из важных задач для повышения качества анализа видеопотока и должен производиться в зависимости от условий расположения устройств записи (расстояние до объектов, характер изменения заднего фона, уровень шумов).

Результаты тестирования метода представлены на рис. 3, а. В видеопотоке присутствует один медленно движущийся объект (человек) на статичном фоне. На рис. 3, б, представлен график временного ряда, построенного на основе видеопотока. На рис. 4, а, представлен график первых трех компонент разложения временного ряда методом SSA, в котором первые две компоненты представляют собой слабо меняющийся тренд, а третья отражает периодическое колебание, соответствующее движению объекта. Разложив данную компоненту в ряд Фурье, можно определить частоту движения объекта. На рис. 4, б, представлен график последних компонент разложения, соответствующих части периодических колебаний заднего фона и шумовых составляющих.

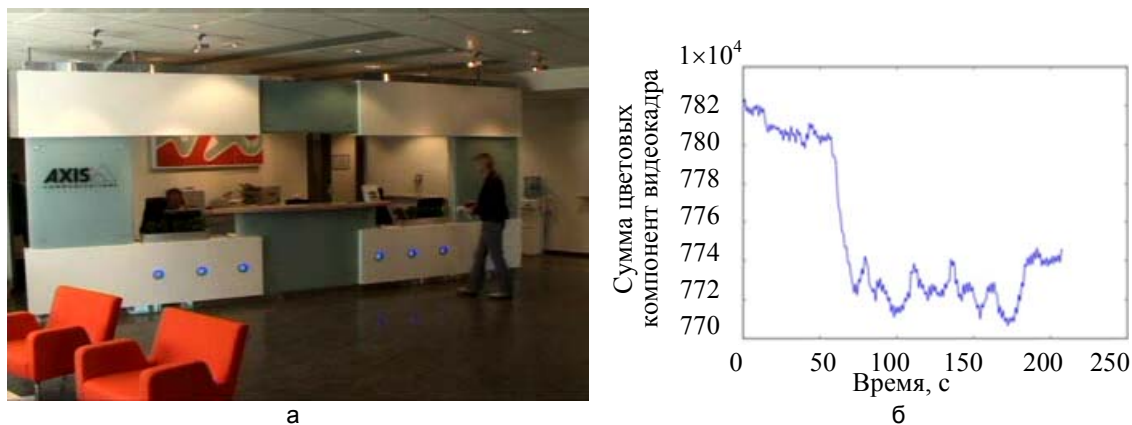


Рис. 3. Исходный видеофрагмент (а); временной ряд исходного видеофрагмента (б)

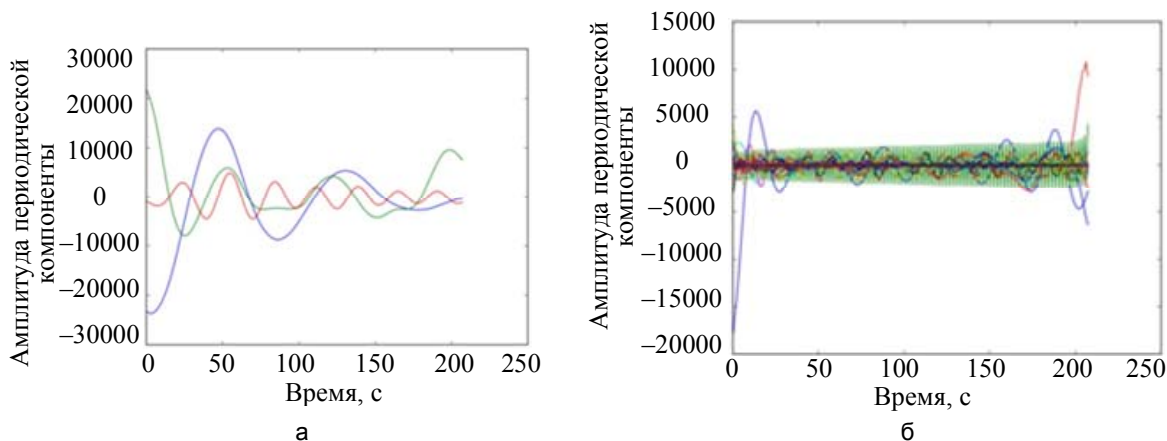


Рис. 4. Периодические компоненты разложения (а); шумовые компоненты разложения (б)

Подобным образом при правильном разложении временного ряда на независимые периодические составляющие может определяться наличие одновременного движения нескольких объектов. Для выполнения подобного разложения может потребоваться более тонкий подбор параметров метода SSA.

Идентификация человека по изображению лица

Иммунокомпьютинг изучает принципы обработки неструктурированной информации для решения сложных практических задач и позволяет с большой эффективностью решать такие задачи, как обучение с экспертом, самообучение, группировка и классификация, представление результатов вычислений в пространстве образов [6, 13, 14].

Математический базис, применяемый в рамках вычислительных процедур иммунокомпьютинга, основан на свойствах сингулярного разложения матриц. Сингулярное разложение является удобным методом при работе с матрицами, поскольку показывает геометрическую структуру матрицы и позволяет наглядно представить имеющиеся данные. Любая матрица A порядка $M \times N$, элементы которой – вещественные числа, может быть представлена в следующем виде, называемом сингулярным разложением матрицы:

$$A = USV^T. \tag{2}$$

В результате разложения получаются три матрицы. Диагональные элементы матрицы S являются сингулярными числами матрицы A , а столбцы матриц U и V^T содержат левые и правые сингулярные векторы для соответствующих им сингулярных значений на диагонали матрицы S .

Одна из наиболее часто решаемых задач с помощью иммунокомпьютинга – это задача распознавания объектов. В данных задачах для определения связи между объектами A и M вводится понятие энергии связи, которое используется в качестве аналога расстояния между объектами. Оно позволяет применить научно-методический аппарат иммунокомпьютинга в задачах идентификации физических лиц, поскольку соответствует общему подходу к построению систем идентификации, описанному в информационной теории идентификации. Согласно этой теории, общий подход к построению систем идентификации объектов осуществляется при помощи настраиваемой модели той или иной структуры, параметры которой могут меняться. Разность величин объекта и настраиваемой модели образует невязку [6, 15], которая определяет степень близости объектов друг к другу. В иммунокомпьютинге аналогом невязки является энергия связи.

Энергия связи между двумя объектами представляется следующим образом:

$$\varpi = -\mathbf{U}^T \mathbf{M} \mathbf{V}, \quad (3)$$

где \mathbf{U} и \mathbf{V}^T – левые и правые сингулярные векторы матрицы \mathbf{A} соответственно. Класс, к которому принадлежит входной образ \mathbf{M} , определяется минимальным значением энергии связи:

$$c = \min(\varpi). \quad (4)$$

Поскольку метод иммунокомпьютинга базируется на свойствах сингулярного разложения произвольных матриц, а такое разложение действительно для матриц порядка $M \times N$, следовательно, входные данные должны быть представлены в виде двумерного массива данных. Также стоит отметить, что на качество видеоизображения влияет множество разнообразных факторов, а это означает, что входные данные должны быть приведены к общему виду. Задача представления входных данных в виде двумерного массива и приведения изображений к общему виду может выполняться с применением разных методов предварительной обработки изображений. В рамках данного исследования предварительная обработка сводилась к преобразованию видеоизображений в монохроматичный формат и корректировке контрастности. На рис. 5 иллюстрируется корректировка контрастности входного изображения, из которого видно, что спектр значений градаций серого значительно расширился после применения метода корректировки контрастности.

Для осуществления процедуры идентификации физических лиц необходимо предварительно создать обучающую выборку. В общем случае обучающая выборка представляет собой множество объектов, заданных значениями признаков. В рамках данного исследования был разработан способ представления обучающей выборки, который описывает принадлежность входного изображения лица к тому или иному заранее известному лицу. Входное изображение лица было представлено в виде матрицы \mathbf{A} размерностью $M \times N$, элементы которой – вещественные числа. Из формулы (2) следует, что любая матрица такого типа может быть представлена с помощью сингулярного разложения. В результате разложения получают три матрицы. Столбцы матрицы \mathbf{U} и \mathbf{V}^T содержат левые и правые сингулярные векторы, которые записываются в качестве обучающей выборки.

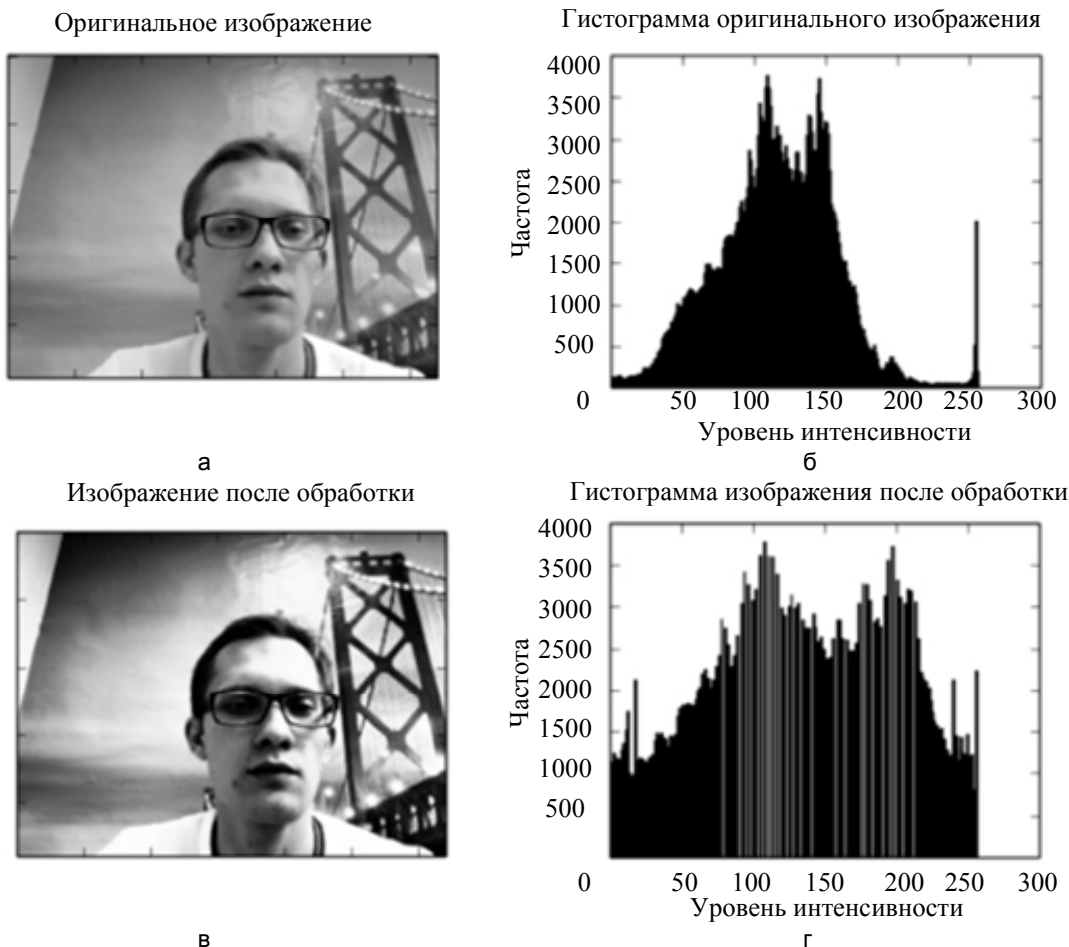


Рис. 5. Эквиализация гистограммы входного изображения: оригинальное изображение (а) и его гистограмма (б); изображение после обработки (в) и его гистограмма (г)

В процессе идентификации на вход поступает изображение неизвестного физического лица, которое представляется в виде матрицы M . Вычисляется энергия связи между входным изображением лица и элементами в обучающей выборке по формуле (3). Процесс идентификации лица определяется минимальным значением энергии связи по формуле (4). На основе полученного значения энергии связи делается предположение о принадлежности входного лица к одному из ранее известных лиц, находящихся в обучающей выборке.

Численный эксперимент

Входные данные в формате цветных изображений кодировались трехмерной матрицей A размерностью $100 \times 100 \times 3$. Предварительная обработка позволила представить данные в виде двумерной матрицы размерностью 100×100 . Пример матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} 238 & 228 & 208 & \dots & 33 & 28 & 30 \\ 229 & 220 & 189 & \dots & 31 & 28 & 34 \\ 227 & 216 & 134 & \dots & 32 & 35 & 66 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 105 & 102 & 106 & \dots & 6 & 5 & 8 \\ 100 & 102 & 99 & \dots & 7 & 6 & 7 \\ 97 & 100 & 102 & \dots & 7 & 6 & 6 \end{bmatrix}$$

В процессе сингулярного разложения матрица A декомпозировалась на три матрицы – U , S и V . Значения матриц U (левых сингулярных векторов) и V (правых сингулярных векторов) использовались в качестве обучающей выборки в математических процедурах расчета энергии связи.

Пример матрицы U :

$$U = \begin{bmatrix} -0.12361204 & \dots & -0.14145273 \\ -0.12486692 & \dots & 0.18439500 \\ \dots & \dots & \dots \\ -0.07879292 & \dots & 0.02843619 \\ -0.07667419 & \dots & 0.01900366 \end{bmatrix}$$

В процессе идентификации рассчитывалась энергия связи входного элемента с каждым элементом, находящимся в обучающей выборке. В результате формировался вектор значений, состоящий из энергий связи. Минимальное значение в массиве энергий связи характеризовало максимальную близость входного объекта к одному из объектов в обучающей выборке. Пример вектора со значениями энергий связи:

$$\omega = [-12916.46191993 \quad \dots \quad -13252.14918307].$$

Программное решение по идентификации физических лиц в видеопотоке визуализировало результат идентификации в процессе воспроизведения видео. Пример визуализации приведен на рис. 6.

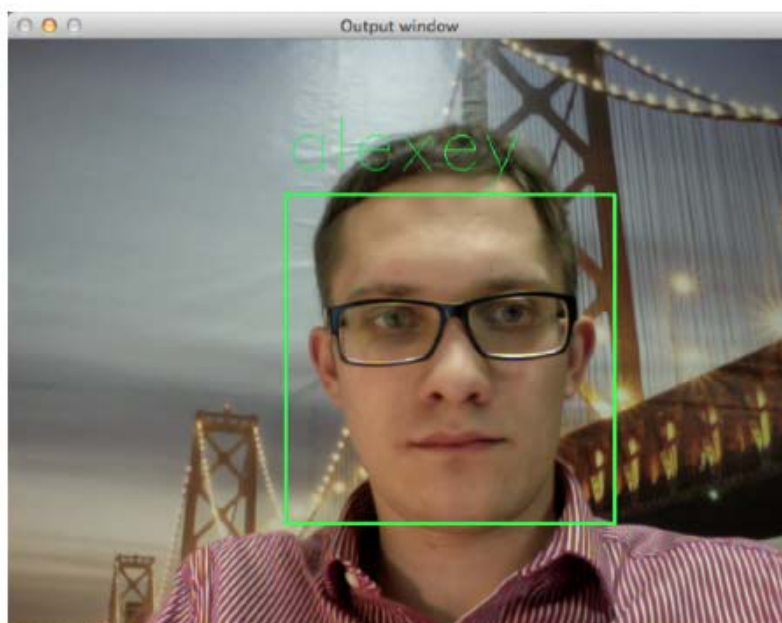


Рис. 6. Визуализация результата идентификации человека по изображению лица в видео

Тестирование проводилось с использованием следующего аппаратного обеспечения:

- ноутбук Lenovo ThinkPad X220;
- процессор – Intel Core i5 2520M 2,5 ГГц;

- объем оперативной памяти – 4 ГБ;
- видеокарта – Intel HD3000.

Данная конфигурация полностью удовлетворяет требованиям предложенного метода. Отсутствуют задержки, вызванные процедурами разложения временного ряда и идентификацией лиц в видеокадре.

Заключение

Рассмотрена задача идентификации движущегося человека, которая представляет научный и практический интерес в плане автоматизации процесса обработки видеоизображений. Новизна заключается в применении метода анализа временных рядов, а также математического аппарата иммунокомпьютинга для решения поставленной задачи.

Решение задачи идентификации движущегося человека заключается в последовательном выполнении двух этапов анализа – этапа определения движения человека и этапа идентификации человека по изображению лица.

В рамках решения первой подзадачи, связанной с определением движения человека, в работе было предложено представить исходный видеопоток в виде временного ряда с последующим применением к нему математического аппарата анализа временных рядов. В тексте приводятся примеры разложения ряда на набор интерпретируемых компонент, показывающих возможность использования рассмотренного метода на реальных данных с целью выделения информации о наличии движения человека на фоне движения остальных объектов в видеопотоке.

В рамках решения второй подзадачи, связанной с идентификацией человека по изображению лица, в работе предлагается представлять изображения лиц в виде двумерных матриц с применением методов предобработки изображений. Идентификация человека по изображению лица осуществляется путем применения математического аппарата иммунокомпьютинга, который позволяет вычислять энергию связи между двумя объектами. Применительно к поставленной подзадаче энергия связи характеризует близости входного изображения лица к лицам, находящимся в обучающей выборке.

Представленное решение задачи по идентификации движущегося человека имеет ряд ярко выраженных достоинств. Одно из главных достоинств – простота реализации, которая требует низких вычислительных затрат благодаря наличию простых математических операций, отсутствию необходимости предварительной фильтрации изображений видеокадров, а также возможности работы при высоком уровне шумов и низком качестве исходного видеопотока.

Программная реализация, полученная в рамках решения частных задач исследования, позволяет использовать предложенное решение как при анализе записанного видеофайла, так и при анализе видеопотока в режиме реального времени с небольшой задержкой, связанной с необходимостью заполнения массива исходных данных определенной длительности для построения временного ряда.

В работе не затронуты такие темы, как выбор оптимальных параметров анализа временных рядов в зависимости от условий расположения камеры видеонаблюдения для достижения наилучшей разделимости ряда, возможность анализа двух или более движущихся объектов, а также возможность классификации объектов по характеристикам движения. Также в рамках дальнейших научных исследований предполагается изучить работу предложенных методов на большой выборке изображений лиц и сравнить качество идентификации с известными методами.

Литература

1. Лукьяница А.А., Шишкин А.Г. Цифровая обработка видеоизображений. М.: Ай-Эс-Эс Пресс, 2009. 512 с.
2. Голяндина Н.Э. Метод «Гусеница»-SSA: анализ временных рядов: Учеб. пособие. СПб: СПбГУ, 2004. 76 с.
3. Голяндина Н.Э. Метод «Гусеница»-SSA: прогноз временных рядов: Учеб. пособие. СПб: СПбГУ, 2004. 56 с.
4. Аксау Н. Subspace-based spectrum estimation in frequency-domain by regularized nuclear norm minimization // *Signal Processing*. 2014. V. 99. P. 69–85.
5. Araujo I.G., Laier J.E. Operational modal analysis using SVD of power spectral density transmissibility matrices // *Mechanical Systems and Signal Processing*. 2014. V. 46. N 1. P. 129–145.
6. Соколова С.П., Соколова Л.А. Интеллектуальные информационные системы на основе иммунокомпьютинга: Учеб. пособие. СПб: ГУАП, 2009. 159 с.
7. Dasgupta D. *Artificial Immune Systems and their Applications*. Berlin: Springer-Verlag, 1999. 306 p.
8. Dasgupta D., Gonzalez F. Artificial immune systems in intrusion detection / In: Vemuri V.R. *Enhancing Computer Security with Smart Technology*. Auerbach, 2005. 288 p.
9. Tarakanov A., Nicosia G. Foundations of immunocomputing. Proc. IEEE Symposium on Foundations of Computational Intelligence, FOCI 2007. Honolulu, Hawaii, USA, 2007. P. 503–508.

10. Wiersma J. Human Movement Classification, 2007 [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.ai.rug.nl/~gert/as/download/scripties/jellewiersma.pdf>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 01.04.2014).
11. Кручинин А.Ю. Распознавание образов с использованием OpenCV, 2011 [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://recog.ru/library/opencv/opencvkruchinin.pdf>, свободный. Яз. рус. (дата обращения 01.04.2014).
12. Bradski G.R., Kaehler A. Learning OpenCV. Sebastopol: O'Reilly Media Inc., 2008. 571 p.
13. Tarakanov A.O., Skormin V.A., Sokolova S.P. Immunocomputing. Principles and Applications. NY: Springer-Verlang, 2003. 193 p.
14. Tarakanov A.O. Mathematical models of intrusion detection by an intelligent immunochip // Communications in Computer and Information Science. 2007. V. 1. P. 308–319.
15. Цыпкин Я.З. Информационная теория идентификации. М.: Наука, 1995. 336 с.

<i>Соломатин Алексей Юрьевич</i>	–	генеральный директор, ООО Смартэг, Санкт-Петербург, Россия, solomatin@gmail.com
<i>Люберт Андрей Сергеевич</i>	–	технический директор, ООО Смартэг, Санкт-Петербург, Россия, andrey@streamdialog.com
<i>Зикратов Игорь Алексеевич</i>	–	доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, zikratov@cit.ifmo.ru
<i>Alexei Yu. Solomatin</i>	–	General Manager, Smartag LLC, Saint Petersburg, Russia, solomatin@gmail.com
<i>Andrey S. Lyubert</i>	–	Chief Technical Officer, Smartag LLC, Saint Petersburg, Russia, andrey@streamdialog.com
<i>Igor A. Zikratov</i>	–	D.Sc., Professor, Department Head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, zikratov@cit.ifmo.ru

*Принято к печати 21.04.14
Accepted 21.04.14*

УДК 543.07+543.929

**ПРИМЕНЕНИЕ МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ АНАЛИЗА
ГОРЬКОСТИ ПРЕПАРАТОВ КИТАЙСКОЙ НАРОДНОЙ МЕДИЦИНЫ**

И.С. Ярошенко^{a, b}, Д.О. Кирсанов^{a, b}, А.В. Легин^{a, b}, П. Ванг^c, Д. Ха^c, Х. Ван^c, Х. Ван^d, Ю. Хе^d

^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, irina.s.yaroshenko@gmail.com

^b Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

^c Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай

^d Китайский медицинский Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай

Аннотация. Представлено исследование препаратов на основе лекарственных растений, используемых в традиционной китайской медицине для лечения и профилактики широкого спектра заболеваний. Цель работы – оценить возможности мультисенсорной системы при инструментальной оценке горькости анализируемых образцов. В данной работе 33 образца отваров лекарственных растений были оценены дегустаторами по шкале горькости от 0 до 6. Разработана методика анализа и проведены многократные измерения образцов с помощью мультисенсорной системы. Оценки дегустаторов являются референтными значениями при калибровке мультисенсорной системы. Построенная по полученным данным регрессионная модель продемонстрировала хорошую корреляцию откликов системы с горькостью, ощущаемой людьми. Параметры регрессионной модели позволяют сделать вывод о том, что мультисенсорная система способна предсказать горькость образцов лекарственных растений со средней ошибкой ± 1 по референтной шкале горькости. Относительная ошибка определения горькости составляет 14%, что является хорошим результатом для измерений такого типа (типичная ошибка дегустаторской оценки, как правило, составляет 15–30%).

Ключевые слова: мультисенсорная система, горькость, корреляция с человеческим восприятием, лекарственные травы.

**MULTISENSOR SYSTEM APPLICATION FOR PREPARATIONS BITTERNESS
EVALUATION IN TRADITIONAL CHINESE MEDICINE**

I.S. Yaroshenko^{a, b}, D.O. Kirsanov^{a, b}, A.V. Legin^{a, b}, P. Wang^c, D. Ha^c, H. Wan^c, H. Wan^d, Y. He^d

^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia, irina.s.yaroshenko@gmail.com

^b Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

^c Zhejiang University, Hangzhou, China

^d Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou, China

Abstract. This paper deals with the study of preparations based on medicinal plants used in traditional Chinese medicine for treatment and prevention of a wide range of diseases. The purpose of this research was evaluation of the capabilities of a multisensor system for instrumental assessment of the samples bitterness. 33 samples of medicinal plants were evaluated by tasters according to bitterness intensity from 0 to 6. Methodology of the analysis was developed and repeated measurements of the samples were performed by multisensor system. Tasters' assessments were used as reference data while multisensor system calibrating. A regression model built according to these data displayed good correlation of the system response with bitterness perceived by people. The parameters of the regression model give the possibility for concluding that the multisensor system is capable to predict the bitterness of the medicinal plants preparations with average precision equal to ± 1 of the reference bitterness scale. Relative error of bitterness determination is 14%, which is a good result for such type of measurements (typical error of the taster's assessment is, as a rule, in the range of 15-30 %).

Keywords: multisensor system, bitterness, correlation with human sensory perception, herbs.

Введение

В современной аналитической химии активно развивается направление, связанное с разработкой и применением химических сенсоров. С момента создания первого стеклянного электрода для определения pH (кислотности среды) появились самые разнообразные виды сенсоров: газовые, потенциометрические, вольтамперометрические, биосенсоры, оптоды и т.д. В общем случае химическими сенсорами считают датчики, реагирующие на изменение содержания компонентов среды, в которой они находятся или с которой контактируют [1]. Однако существует круг сенсоров, которые демонстрируют высокую чувствительность к определяемому компоненту не только в модельных растворах, но и в сложной многокомпонентной системе.

В конце XX века появился подход, заключающийся в использовании не отдельных высокоселективных сенсоров, а набора (массива) сенсоров с так называемой перекрестной чувствительностью. Каждый сенсор такой системы реагирует на присутствие сразу нескольких компонентов анализируемой среды [2]. Получаемая совокупность многомерных данных требует современной математической обработки. С этой целью применяются различные хемометрические подходы: метод главных компонент (МГК), проекция на латентные структуры (ПЛС), искусственные нейронные сети (ИНС) и др. На выходе пользова-

тель получает результат либо в виде ответа «да/нет» (например, при распознавании поддельных напитков), либо в виде набора количественных характеристик образца, в зависимости от способа калибровки системы [3].

Области практического применения мультисенсорных систем обширны и разнообразны. Одним из основных применений таких систем стала оценка вкуса, как его воспринимают люди, откуда родилось другое название подобного устройства – электронный язык. Дегустаторская оценка вкуса вообще и горькости лекарственных препаратов, в частности, является довольно субъективной. Она зависит как от личности дегустатора, так и от состояния его физического и психического здоровья. Именно поэтому перед учеными встала проблема создания инструментального подхода для оценки вкуса.

Целью работы является оценка возможности мультисенсорной системы при инструментальной оценке горькости (так, как ее ощущают люди), характерной для образцов препаратов китайской народной медицины.

Принцип работы мультисенсорной системы

Для успешного применения мультисенсорной системы необходимо, чтобы в состав массива входили сенсоры с перекрестной чувствительностью к различным типичным компонентам анализируемой среды. Разные сенсоры массива должны в разной степени откликаться на наличие и концентрацию в образце таких веществ. Отклик таких сенсоров должен отличаться высокой стабильностью и воспроизводимостью в реальных сложных многокомпонентных средах.

Химический сенсор имеет такие составляющие, как:

- чувствительная мембрана, которая дает отклик на изменение содержания определяемого компонента и преобразует энергию в электрический сигнал;
- токоотвод, который передает сигнал к измерительному прибору.

Этот сигнал и является аналитическим, поскольку содержит информацию о качественном и количественном составе среды.

В основном для мультисенсорных систем применяют два типа сенсоров (по способу передачи сигнала) – с жидким контактом и твердым контактом (рис. 1).

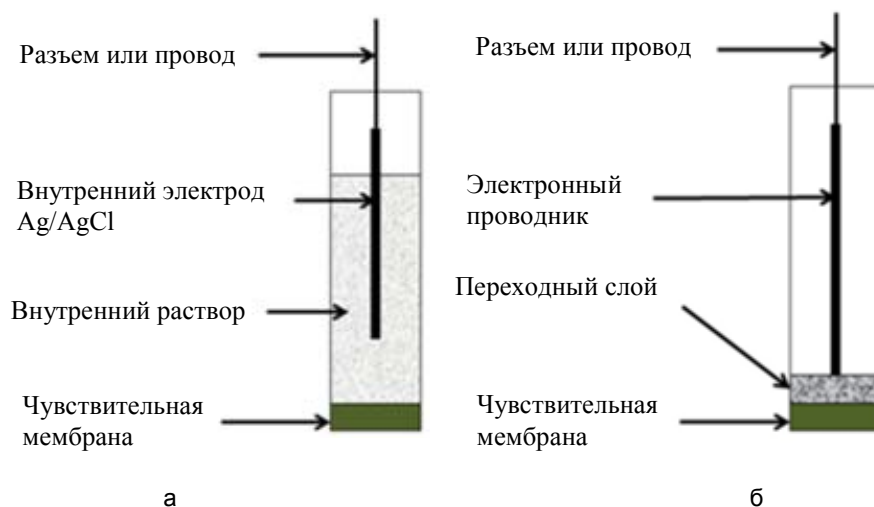


Рис. 1. Сенсоры с жидким (а) и твердым (б) контактом

Ключевые элементы сенсоров – это чувствительные мембраны, среди которых можно выделить три основных вида, в соответствии с физическим состоянием материала.

1. Твердые мембраны, изготовленные из монокристаллического или поликристаллического (порошкообразного) вещества, малорастворимого в воде и обладающего частичной ионной проводимостью.
2. Стекланные мембраны, в которых процессы формирования отклика протекают в тонком гелеобразном слое, образованном на внешней поверхности стекла, после выдерживания (кондиционирования) в соответствующем водном растворе.
3. Полимерные пластифицированные мембраны. Их получают введением ионофоров, нейтральных переносчиков и липофильных добавок в полимерную инертную (например, поливинилхлоридную) матрицу, эластичность и проводимость которой придает наличие пластификаторов. Полимерные мембраны имеют в составе катион- или анион-чувствительные лиганды, а также вещества, чувствительные к органическим веществам.

При попадании в матрицу такой мембраны дополнительного количества, например, катионов из раствора межфазный потенциал меняется, что регистрируется вольтметром и используется в качестве

аналитического сигнала. Измерения с массивом мультисенсорной системы, состоящим из таких сенсоров, в целом аналогичны таковым с отдельными электродами: измеряется ЭДС электрохимической ячейки, состоящей из массива сенсоров и электрода сравнения. Для измерений используют многоканальные вольтметры с высоким входным импедансом (более 10^{12} Ом). Управление измерениями и запись данных осуществляется с помощью компьютера (рис. 2).

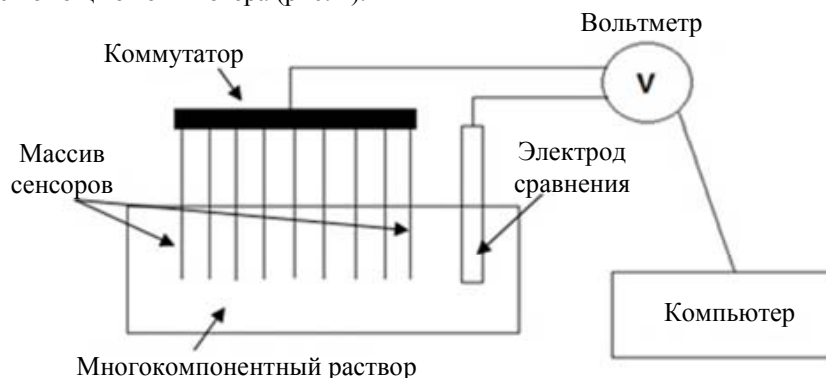


Рис. 2. Измерительная схема мультисенсорной системы на основе потенциометрических химических сенсоров

Обработка данных, полученных от мультисенсорной системы

Результатом анализа образца с помощью мультисенсорной системы является набор откликов сенсоров, характеризующих качественный и количественный состав образца. Полученная совокупность данных подвергается современным методам математической обработки многомерных данных для извлечения полезной аналитической информации.

При анализе многомерных данных используются различные подходы в зависимости от поставленной экспериментальной задачи:

- количественный анализ – численное предсказание концентраций веществ и различных свойств образца, например, его горькости, (регрессия на главные компоненты, ПЛС, метод ИНС и др.);
- качественный анализ – распознавание, классификация, отнесение неизвестного образца к известному классу (основные методы: МГК, формальное независимое моделирование аналогий классов, метод опорных векторов и др.)

Необходимо отметить сложность математического аппарата этих методов. Однако современное программное обеспечение позволяет довольно быстро обработать сколь угодно большие массивы данных [3].

Таким образом, применение мультисенсорной системы в сочетании с хемометрической обработкой полученных данных позволяет решить обширный круг самых разнообразных, часто весьма нетрадиционных аналитических задач.

Применение мультисенсорной системы

Можно выделить три основных направления, развивающих применение рассматриваемого подхода, который можно назвать междисциплинарным:

1. создание и усовершенствование новых материалов чувствительных мембран (физика и химия материалов);
2. поиск и применение новых алгоритмов для обработки многомерных данных (математическая статистика и программирование);
3. использование мультисенсорных систем для сложных и актуальных прикладных задач.

Чаще всего потенциометрическая мультисенсорная система применялась для анализа пищевых продуктов. В частности, решались задачи классификации напитков – чай, кофе, лимонад, сок [4]. Проведено множество исследований, посвященных вину как объекту анализа. Оценивали параметры вкуса в терминах восприятия человека [5, 6], содержание различных химических компонентов в вине, которые меняются при хранении [7, 8] и влияют на качество напитка [9]. Объектом анализа мультисенсорной системой неоднократно становилось пиво [10, 11], в котором определяли самые разнообразные вкусовые оттенки и сочетания – горькость, сладость, насыщенность, крепость и даже жженость и карамельность вкуса [10]. Референтные данные, получаемые от группы дегустаторов, конечно, являются в данном случае «отправными точками», по которым калибруется система. При этом следует отметить субъективность такого анализа, результаты которого зависят от личных вкусовых особенностей каждого дегустатора, его настроения, состояния здоровья и т.д. Инструментальный подход лишен такой субъективности, доказана корреляция с человеческим восприятием и показана перспективность такого способа оценки вкусовых качеств.

Проводили исследование молочной продукции. На крупных предприятиях необходимо следить за здоровьем животных, чтобы молоко от коровы, больной маститом, не попало в реализацию. Показано, что мультисенсорная система способна к распознаванию образцов молока от здорового и больного животного. Такой подход также является очень перспективным с практической точки зрения [12].

Такой же привлекательной мультисенсорная система выглядит для цели мониторинга биотехнологических процессов [13], в частности, при исследовании стадий брожения *Aspergillus niger* – довольно распространенного вида плесневых грибов [14].

Важной проблемой промышленного контроля является одновременное определение редкоземельных элементов в облученном ядерном топливе, для чего были разработаны новые сенсоры и системы, способные определять содержание нескольких лантаноидов (весь ряд от лантана до лютеция) одновременно [15–17].

Мультисенсорные системы являются очень перспективными для экологического контроля. Так, проводили исследование грунтовых вод на наличие неорганических загрязнителей, среди которых тяжелые металлы – медь, цинк, марганец, железо [18]. Проводили работу по оценке токсичности водной среды, где референтные данные для калибровки сенсорной системы были получены биологическими методами – исследовали поведение микроорганизмов в воде с различной степенью загрязнения. Доказано, что мультисенсорная система способна адекватно оценить токсичность воды, что в перспективе может с успехом заменить сложные методы с использованием биоты [19].

Применение мультисенсорной системы нельзя представить без методов обработки данных, которые постоянно совершенствуются [20–23].

Перед производителями фармацевтической продукции (лекарств) уже давно стоит проблема распознавания уровня горькости лекарственных препаратов, потому как именно от этого зависит способ и степень маскирования действующего вещества в готовой таблетке. Ранее для оценки горькости лекарств использовали людей или лабораторных крыс, которых сначала лишали воды на некоторое время, а затем давали растворы препаратов. По степени потребления растворов крысами оценивали горькость лекарств (чем большее количество раствора потребляется, тем он менее горький). Использование такой методики достаточно дорого и затруднительно. Показано, что мультисенсорная система способна заменить такой подход. Для примера была исследована группа веществ разной химической природы (неорганические и органические вещества), горькость которых была оценена крысами и людьми-дегустаторами. Доказана возможность применения мультисенсорной системы для оценки степени горькости этих веществ [24, 25]. Такой подход может применяться и для других сложных и разнородных объектов, в которых необходимо оценить горькость, как в настоящей работе.

Исследование горькости препаратов китайской народной медицины

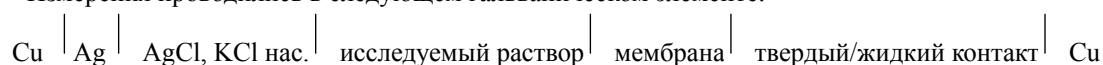
Образцы. В данном исследовании были проанализированы 33 образца лекарственных средств китайской народной медицины. Среди них – 10 различных видов препаратов различной концентрации и, следовательно, различной степени горькости. Горькость оценена специально обученными людьми по шкале от 0 до 6, где 0 – совсем не горько, 6 – невыносимо горько. Эти оценки были выставлены в соответствии со стандартной процедурой: индивидуальное вещество, гидрохлорид берберина, растворяют в воде в различных концентрациях на 6 уровнях. Эти уровни становятся стандартами горькости, относительно которых дегустаторы выставляют оценки всем остальным образцам.

Пробоподготовка. Стандартные растворы гидрохлорида берберина готовили растворением точных навесок в дистиллированной воде. Лекарственные травы в сухом виде заваривали горячей водой, затем фильтровали и центрифугировали для удаления твердых частиц. С помощью роторного испарителя полученную жидкость концентрировали (уменьшение объема жидкости за счет испарения растворителя). Затем различные объемы концентрированных жидкостей добавляли в одинаковое количество воды для получения образцов с различными концентрациями. Горькость полученного продукта и была оценена людьми и, в итоге, сенсорной системой.

Данные по образцам сведены в таблице.

Анализ образцов мультисенсорной системой. Для работы с образцами использовали массив перекрестно-чувствительных потенциометрических сенсоров, состоящий из 5 анион-чувствительных, 7 катион-чувствительных и 4 халькогенидных стеклянных сенсоров. Сенсоры были разработаны и подобраны на основании предыдущего опыта работы с различными образцами в Лаборатории химических сенсоров СПбГУ.

Измерения проводились в следующем гальваническом элементе:



Использовали стандартный рН-электрод и хлорсеребряный электрод сравнения. Показания снимали на многоканальном электронном цифровом вольтметре с высоким входным сопротивлением, подключенном к персональному компьютеру для сбора и обработки данных.

Измерения проводили согласно следующей методике. В ячейку для измерений помещали 20 мл образца и 80 мл дистиллированной воды (разбавление в 5 раз), опускали туда массив сенсоров, время анализа – 3 мин. Затем проводили процедуру отмывки системы последовательными измерениями потенциалов сенсоров в воде до постоянных значений – 1, 2 и 3 мин. Анализ образцов производили в случайном порядке, каждый образец повторяли минимум 3 раза.

Обработку данных проводили с помощью программного обеспечения «Unscrambler 9.7» (CAMO, Norway). Строили регрессионную модель методом ПЛС (рис. 3). Результаты построения калибровочной модели представляются в виде прямых для калибровки и проверки в координатах «введено/найдено» или «измеряемая/предсказанная величина». Наклон (slope) и квадрат коэффициента корреляции (R^2) описывают, насколько хорошо точки в калибровке и проверке ложатся на прямую. Чем ближе эти величины к единице, тем лучше данные описываются моделью. Параметр «оффсет» (offset) описывает смещение прямой относительно начала координат и должен быть максимально близок к нулю. Среднеквадратическое отклонение (RMSE, Root Mean Square Error) характеризует предсказательную силу модели. Она имеет размерность величины предсказания, по которой проводилась калибровка, и для хорошей модели должна быть минимальна.

Номер образца	Название	Концентрация образца, количество/объем воды	Значение горькости
1	Гидрохлорид берберина (<i>Berberine Hydrochloride</i>)	0,005 г / 500 мл	1
2		0,0125 г / 500 мл	2
3		0,025 г / 500 мл	3
4		0,05 г / 500 мл	4
5		0,125 г / 500 мл	5
6		0,25 г / 500 мл	6
7	Хризантема китайская (<i>Chinese Chrysanthemum</i>)	10 мл / 300 мл	0,7
8		50 мл / 300 мл	4,3
9		100 мл / 300 мл	5,5
10	Корень солодки (<i>Liquorice Root</i>)	10 мл / 350 мл	0,8
11		50 мл / 350 мл	2
12		200 мл / 350 мл	2,7
13	Ветки кассии (<i>Cassia Twig</i>)	10 мл / 350 мл	1,1
14		50 мл / 350 мл	2,5
15		200 мл / 350 мл	3,7
16	Хвойник китайский (<i>Chinese Ephedra</i>)	10 мл / 350 мл	1,5
17		25 мл / 300 мл	3,5
18		50 мл / 300 мл	4,7
19	Семена горького абрикоса (<i>Bitter Apricot Seeds</i>)	50 мл / 500 мл	1,3
20		100 мл / 300 мл	2
21	Реманния клейкая (<i>Rehmanniae Adhesive</i>)	20 мл / 300 мл	0,7
22		50 мл / 300 мл	0,8
23		100 мл / 300 мл	1,1
24	Корень одуванчика (<i>Dandelion Root</i>)	20 мл / 350 мл	0,8
25		50 мл / 350 мл	2,5
26		200 мл / 350 мл	4,3
27	Коптис китайский (<i>Chinese Coptis</i>)	20 мкл / 350 мл	0,8
28		100 мкл / 350 мл	2,2
29		200 мкл / 350 мл	4,3
30		1000 мкл / 350 мл	6
31	Смесь четырех трав: – хвойник китайский – 37,5% – семена горького абрикоса – 25% – корень солодки – 12,5% – ветки кассии – 25%	20 мл / 300 мл	2
32		50 мл / 300 мл	4,2
33		150 мл / 300 мл	5,3

Таблица. Данные по исследованным образцам китайской народной медицины

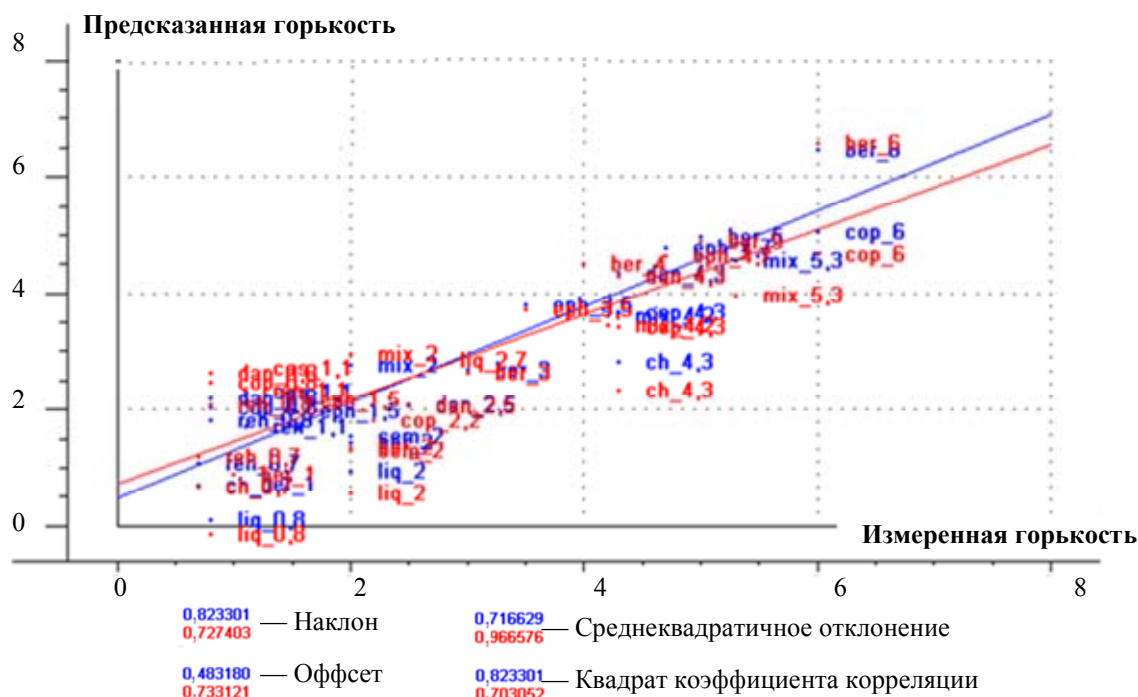


Рис. 3. ПЛС-регрессионная модель, построенная на данных от образцов лекарственных препаратов китайской народной медицины, как соответствие откликов мультисенсорной системы и значений при оценке горькости для этих же образцов

Таким образом, построенная в данном исследовании модель свидетельствует о том, что мультисенсорная система способна оценить горькость препаратов китайской народной медицины со средней относительной ошибкой ± 1 по шкале референтных значений.

Заключение

Потенциометрическая мультисенсорная система была применена в качестве аналитического инструмента для определения горькости препаратов китайской народной медицины.

Разработана методика измерений и проанализированы 33 образца лекарственных препаратов с помощью мультисенсорной системы. В качестве референтных значений горькости образцов для калибровки системы использовали оценки дегустаторов-людей. Построена регрессионная модель, связывающая данные мультисенсорной системы с оценками дегустаторов. Показано, что мультисенсорная система имеет возможность предсказать горькость образцов со средней ошибкой ± 1 по шкале референтных значений. Относительная ошибка определения горькости составляет при этом 14%, что является приемлемым для измерений такого типа (ошибка дегустаторской оценки может составлять до 30%).

Литература

1. Hulanicki A., Glab S., Ingman F. Chemical sensors definition and classification // *Pure and Applied Chemistry*. 1991. V. 63. N 9. P. 1247–1250.
2. Otto M., Thomas J. Model studies on multiple channel analysis of free magnesium, calcium, sodium and potassium at physiological concentration levels with ion-selective electrodes // *Analytical Chemistry*. 1985. V. 57. P. 2647–2651.
3. Esbensen K.H. *Multivariate Data Analysis in Practice*. 5th ed. Oslo, Norway: CAMO Software AS, 2001. 594 p.
4. Legin A., Rudnitskaya A., Vlasov Y.G., Di Natale C., Davide F., D'Amico A. Tasting of beverages using an electronic tongue // *Sensors and Actuators, B: Chemical*. 1997. V. 44. N 1-3. P. 291–296.
5. Legin A., Rudnitskaya A., Lvova L., Vlasov Y., Di Natale C., D'Amico A. Evaluation of Italian wine by the electronic tongue: recognition, quantitative analysis and correlation with human sensory perception // *Analytica Chimica Acta*. 2003. V. 484. N 1. P. 33–44.
6. Rudnitskaya A., Nieuwoudt H.H., Muller N., Legin A., du Toit M., Bauer F.F. Instrumental measurement of bitter taste in red wine using an electronic tongue // *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2010. V. 397. N 7. P. 3051–3060.
7. Rudnitskaya A., Schmidtke L.M., Delgadillo I., Legin A., Scollary G. Study of the influence of micro-oxygenation and oak chip maceration on wine composition using an electronic tongue and chemical analysis // *Analytica Chimica Acta*. 2009. V. 642. N 1-2. P. 235–245.

8. Schmidtke L.M., Rudnitskaya A., Saliba A.J., Blackman J.W., Scollary G.R., Clark A.C., Rutledge D.N., Delgadillo I., Legin A. Sensory, chemical, and electronic tongue assessment of micro-oxygenated wines and oak chip maceration: assessing the commonality of analytical techniques // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2010. V. 58. N 8. P. 5026–5033.
9. Kirsanov D., Mednova O., Vietoris V., Kilmartin P.A., Legin A. Towards reliable estimation of an «electronic tongue» predictive ability from PLS regression models in wine analysis // *Talanta*. 2012. V. 90. P. 109–116.
10. Rudnitskaya A., Polshin E., Kirsanov D., Lammertyn J., Nicolai B., Saison D., Delvaux F.R., Delvaux F., Legin A. Instrumental measurement of beer taste attributes using an electronic tongue // *Analytica Chimica Acta*. 2009. V. 646. P. 111–118.
11. Polshin E., Rudnitskaya A., Kirsanov D., Legin A., Saison D., Delvaux F., Delvaux F.R., Nicolai B.M., Lammertyn J. Electronic tongue as a screening tool for rapid analysis of beer // *Talanta*. 2010. V. 81. N 1-2. P. 88–94.
12. Mottram T., Rudnitskaya A., Legin A., Fitzpatrick J.L., Eckersall P.D. Evaluation of a novel chemical sensor system to detect clinical mastitis in bovine milk // *Biosensors and Bioelectronics*. 2007. V. 22. N 11. P. 2689–2693.
13. Rudnitskaya A., Legin A. Sensor systems - electronic tongues and electronic noses for the monitoring of biotechnological processes // *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology*. 2008. V. 35. N 5. P. 443–451.
14. Legin A., Kirsanov D., Rudnitskaya A., Iversen J.J.L., Seleznev B., Esbensen K.H., Mortensen J., Houmøller L., Vlasov Y. Multicomponent analysis of fermentation growth media using the electronic tongue (ET) // *Talanta*. 2004. V. 64. N 3. P. 766–772.
15. Kirsanov D., Khaydukova M., Tkachenko L., Legin A., Babain V. Potentiometric sensor array for analysis of complex rare Earth mixtures // *Electroanalysis*. 2012. V. 24. N 1. P. 121–130.
16. Legin A.V., Babain V.A., Kirsanov D.O., Mednova O.V. Cross-sensitive rare earth metal sensors based on extraction systems // *Sensors and Actuators, B: Chemical*. 2008. V. 131. N 1. P. 29–36.
17. Legin A.V., Kirsanov D.O., Babain V.A., Gall L.N., Gall N.R. Promising analytical techniques for HLW analysis / In: *Radioactive Waste: Sources, Types and Management* / Eds. Satoshi Yuan, Wenxu Hidaka. NY, USA, NOVA Science Publishers Inc, 2012. P. 77–96.
18. Rudnitskaya A., Ehlert A., Legin A., Vlasov Yu., Buttgenbach S. Multisensor system on the basis of an array of non-specific chemical sensors and artificial neural networks for determination of inorganic pollutants in model groundwater // *Talanta*. 2001. V. 55. N 2. P. 425–431.
19. Kirsanov D., Zadorozhnaya O., Krashennnikov A., Komarova N., Popov A., Legin A. Water toxicity evaluation in terms of bioassay with an Electronic Tongue // *Sensors and Actuators, B: Chemical*. 2013. V. 179. P. 282–286.
20. Legin A., Rudnitskaya A., Vlasov Y. Electronic tongues: new analytical perspective for chemical sensors // *Comprehensive Analytical Chemistry*. 2003. V. 39. P. 437–486.
21. Kirsanov D., Babain V., Agafonova-Moroz M., Lumpov A., Legin A. Combination of optical spectroscopy and chemometric techniques – a possible way for on-line monitoring of SNF reprocessing // *Radiochimica Acta*. 2012. V. 100. N 3. P. 185–188.
22. Yaroshenko I., Kirsanov D., Kartsova L., Bhattacharyya N., Sarkar S., Legin A. On the application of simple matrix methods for electronic tongue data processing: case study with black tea samples // *Sensors and Actuators, B: Chemical*. 2014. V. 191. P. 67–74.
23. Kirsanov D., Cetó X., Khaydukova M., Blinova Y., Del Valle M., Babain V., Legin A. A combination of dynamic measurement protocol and advanced data treatment to resolve the mixtures of chemically similar analytes with potentiometric multisensor system // *Talanta*. 2014. V. 119. P. 226–231.
24. Legin A., Rudnitskaya A., Clapham D., Seleznev B., Lord K., Vlasov Y. Electronic tongue for pharmaceutical analytics: quantification of tastes and masking effects // *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2004. V. 380. N 1. P. 36–45.
25. Rudnitskaya A., Kirsanov D., Blinova Y., Legin E., Seleznev B., Clapham D., Ives R.S., Saunders K.A., Legin A. Assessment of bitter taste of pharmaceuticals with multisensor system employing 3 way PLS regression // *Analytica Chimica Acta*. 2013. V. 770. P. 45–52.

- Ярошенко Ирина Сергеевна** – инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; аспирант, Санкт-Петербургский государственный университет, irina.s.yaroshenko@gmail.com
- Кирсанов Дмитрий Олегович** – кандидат химических наук, ведущий инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; доцент, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, d.kirsanov@gmail.com
- Легин Андрей Владимирович** – кандидат химических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; ведущий научный сотрудник, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, andrey.legin@gmail.com

- Ванг Пинг** – доктор, профессор, профессор, Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай, cnpwang@zju.edu.cn
- Ха Да** – аспирант, Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай, bmehighday@gmail.com
- Ван Хао** – аспирант, Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай, wh18162008@gmail.com
- Ван Хайтонг** – доктор, профессор, декан, Китайский медицинский Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай, wanhaitong@zjtcn.net
- Хе Ю** – доктор, профессор, профессор, Китайский медицинский Университет Чжэцзян, Ханчжоу, Китай, heyu0923@sina.com
- Irina S. Yaroshenko** – engineer, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; postgraduate, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, irina.s.yaroshenko@gmail.com
- Dmitry O. Kirsanov** – PhD, Leading engineer, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; Associate professor, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, d.kirsanov@gmail.com
- Andrey V. Legin** – PhD, Chief scientific researcher, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; Leading research scientist, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, andrey.legin@gmail.com
- Ping Wang** – D.Sc., Professor, Zhejiang University, Hangzhou, China, cnpwang@zju.edu.cn
- Da Ha** – postgraduate, Zhejiang University, Hangzhou, China, bmehighday@gmail.com
- Hao Wan** – postgraduate, Zhejiang University, Hangzhou, China, wh18162008@gmail.com
- Haitong Wan** – D.Sc., Professor, Dean, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou, China, wanhaitong@zjtcn.net
- Yu He** – D.Sc., Professor, Professor, Zhejiang Chinese Medical University, Hangzhou, China, heyu0923@sina.com

*Принято к печати 01.04.14
Accepted 01.04.14*

УДК 004.932.2

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОГРЕШНОСТИ БЕСКОНТАКТНОГО ИЗМЕРЕНИЯ ПЛОЩАДИ ДЕФЕКТОВ НА ПОВЕРХНОСТЯХ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ ПРИ ВИДЕОЭНДОСКОПИЧЕСКОМ КОНТРОЛЕ

А.В. Горевой^a, А.С. Мачихин^b, А.М. Перфилов^{c, d}^a МГТУ имени Н.Э. Баумана, Москва, Россия^b Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, Москва, Россия, aalexanderr@mail.ru^c ОАО «НПО Энергомаш им. акад. В.П. Глушко», Химки, Россия^d Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия,

Аннотация. Рассмотрена задача бесконтактного измерения площади поверхностных дефектов на объектах сложной формы при видеоэндоскопическом контроле. Впервые проанализированы основные факторы, определяющие погрешность подобных измерений. Основу предлагаемого метода анализа составляет оценка трехмерных координат точек поверхности по их двумерным проекциям, полученная с использованием проективной модели систем регистрации и минимизации расстояния Махаланобиса в плоскостях изображений. Аналитически для практически важных случаев цилиндрической и сферической поверхностей получены выражения для погрешности измерения ее площади, вызванной аппроксимацией набором треугольников. Показано, что при реальных значениях параметров оптико-электронной системы эндоскопического зонда величина этой составляющей погрешности для отдельного треугольника не превышает 1%. Получены выражения для ошибки измерения площади произвольной формы, вызванной неточностью измерения трехмерных координат отдельных точек с учетом и без учета априорной информации о форме поверхности. Проверка полученных выражений на данных реального эксперимента показала, что погрешность измерения площади сложной фигуры, заданной набором точек, в основном определяется отсутствием учета принадлежности этих точек к поверхности. Установлено, что использование априорной информации о форме исследуемой поверхности, которая зачастую доступна из конструкторской документации, могла бы во многих случаях радикально повысить точность измерения площади поверхностных дефектов. Представленные результаты справедливы для стереоскопического, теневого и фазового методов видеоэндоскопических измерений и могут быть эффективно использованы при разработке новых и модернизации существующих бесконтактных измерительных эндоскопических систем.

Ключевые слова: визуально-измерительный контроль, измерение площади поверхности, видеоэндоскопия, измерительный эндоскоп, погрешность измерений, триангуляция.

ACCURACY EVALUATION FOR THE NON-CONTACT DEFECT AREA MEASUREMENT AT THE COMPLEX-SHAPE SURFACES UNDER VIDEOENDOSCOPIC CONTROL

A.V. Gorevoy^a, A.S. Machikhin^b, A.M. Perfilov^{c, d}^a Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia^b Scientific and Technological Center of Unique Instrumentation RAS, Moscow, Russia, aalexanderr@mail.ru^c JSC «NPO Energomash named after academician V.P.Glushko», Khimki, Russia;^d ITMO University, Saint Petersburg, Russia

Abstract. The problem of non-contact surface defect area measurement at complex-shape objects under videoendoscopic control is considered. Major factors contributing to the measurement uncertainty are analyzed for the first time. The proposed method of accuracy analysis is based on the evaluation of 3D coordinates of surface points from 2D projections under assumption of projective camera model and Mahalanobis distance minimization in the image plane. Expressions for area measurement error caused by sum-of-triangles approximation are obtained analytically for practically important cases of cylindrical and spherical surfaces. It is shown that the magnitude of this error component for a single triangle does not exceed 1% for the real values of parameters of the endoscopic imaging system. Expressions are derived for area measurement uncertainty evaluation on arbitrary shape surfaces, caused by measurement errors of 3D coordinates of individual points with and without a priori information about surface shape. Verification of the obtained expressions with a real experiment data showed that area measurement error for a complex figure, given by a set of points, is mainly caused by ignoring the fact that these points belong to the surface. It is proved that the use of a priori information about investigated surface shape, which is often available from the design documentation, in many cases would radically improve the accuracy of surface defects area measurement. The presented results are valid for stereoscopic, shadow and phase methods of video endoscopic measurements and can be effectively used in development of new non-contact measuring endoscopic systems and modernization of existing ones.

Keywords: visual and measuring control, surface area measurement, videoendoscopy, measuring endoscope, measurement accuracy, triangulation.

Введение

В настоящее время визуально-измерительный контроль (ВИК) является обязательной процедурой при производстве, сборке и испытаниях многих промышленных объектов: авиационных и ракетных двигателей, трубопроводов, баллонов высокого давления и др. [1–3]. Основными целями ВИК являются анализ состояния поверхности, выявление и оценка размеров имеющихся дефектов (трещин, коррозии, отложений и т.п.).

При контроле состояния труднодоступных внутренних полостей неразборных или не подлежащих разборке объектов основными инструментами ВИК являются эндоскопы [2, 3]. Данные приборы позволяют не только визуализировать, но также зарегистрировать и обработать изображение исследуемого объекта. Для измерения трехмерных геометрических параметров выявляемых дефектов к настоящему времени разработано несколько методов, аппаратно и программно реализованных в современных зарубежных видеоэндоскопах: стереоскопический, многоточечный, теневой и фазовый [4, 5]. Все они основаны на вычислении координат точек объекта в трехмерном пространстве и не учитывают форму в окрестности этих точек, что приводит к значительным погрешностям при проведении геометрических измерений. При измерении линейных размеров повышение точности возможно за счет указания пользователем большего количества точек, а при измерении площадей это затруднительно. Площадь замкнутого многоугольника вычисляется как сумма площадей плоских треугольников, на которые этот многоугольник разбивается с помощью заданного разработчиком метода. Так как алгоритм разбиения неизвестен, то оценить точность проводимых измерений невозможно. Для иллюстрации данной проблемы на рис. 1 приведен пример измерения стереоскопическим методом одного и того же эталонного объекта в виде прямоугольника площадью 125 мм^2 на миллиметровой бумаге. Видно, что при одинаковом наборе заданных точек измерение на плоской поверхности (рис. 1, а) производится достаточно точно, а на цилиндрической (рис. 1, б) – с существенной погрешностью. Приведенные результаты не являются случайными и демонстрируют значения площади, наиболее близкие к истинному, полученные в серии из 10 независимых идентичных экспериментов.

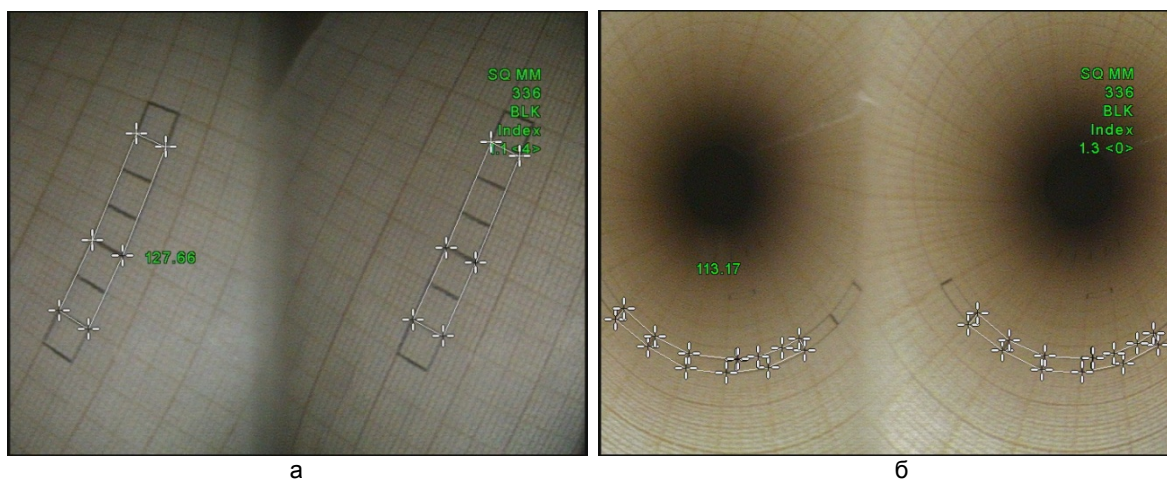


Рис. 1. Результаты измерения площади эталонного объекта на миллиметровой бумаге с помощью видеоэндоскопа стереоскопическим методом на плоской (а) и цилиндрической (б) поверхностях. Численно около выделенного многоугольника показана его площадь, измеренная в автоматическом режиме

Вычисление погрешности измерений является обязательной процедурой для обеспечения метрологической достоверности получаемых результатов [1, 6]. В настоящее время серийно выпускаемая видеоэндоскопическая техника не является специализированной, предназначена для решения широкого круга задач и поэтому требует существенной адаптации для достижения приемлемой точности проведения геометрических измерений дефектов на поверхности конкретного объекта. Данные о погрешности измерений, приводимые разработчиками, основаны лишь на известных результатах теоретических исследований триангуляционного метода или результатах экспериментального исследования тест-объектов простой формы [4, 7, 8]. Исходя из этого, как правило, для ВИК каждой поверхности узла подбираются оптимальные параметры регистрации и положение зонда относительно объекта, изготавливается механическая оснастка, строго регламентируется процесс измерения.

Так как все существующие измерительные видеоэндоскопы представляют собой не допускающие доработки законченные аппаратно-программные комплексы, алгоритмы обработки данных в которых скрыты разработчиками [5], то существует необходимость оценки погрешности измерений, исходя из условий эксперимента – положения и количества указанных пользователем точек, свойств исследуемой поверхности и прочих факторов.

Настоящая работа посвящена исследованию источников этой погрешности и разработке способа ее вычисления и возможности ее снижения за счет учета свойств исследуемой поверхности.

Постановка задачи

Для описания оптико-электронных систем (ОЭС) структурированной подсветки и регистрации введем геометрическую модель $\mathbf{p}_i = P_i \circ E_i(\mathbf{x})$, где \mathbf{x} и \mathbf{p}_i – координаты точек объекта в глобальной

системе координат (ГСК) и координаты их изображений для i -й ОЭС; $i = 1..N$, N – количество ОЭС; E_i – оператор преобразования координат из ГСК в систему координат (СК), связанную с i -й ОЭС; P_i – оператор преобразования, определяющего соответствие между координатами точек $A(x, y, z)$ в СК ОЭС и координатами их изображений $a_i(u, v)$ (рис. 2). Знаком « \circ » обозначена композиция операторов преобразований, т.е. их последовательное применение: $P_i \circ E_i(\mathbf{x}) \equiv P_i(E_i(\mathbf{x}))$. Количество ОЭС N определяется используемым методом измерения: при стереоскопическом используется 2 канала регистрации ($N = 2$), при теневом – один канал структурированной подсветки и один канал регистрации ($N = 2$), при фазовом – два канала структурированной подсветки и один канал регистрации ($N = 3$).

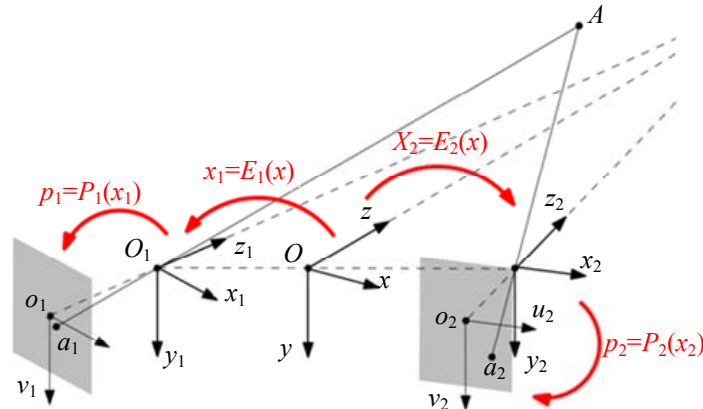


Рис. 2. Используемая геометрическая модель ОЭС ($N = 2$)

Преобразование P_i задает однозначное соответствие лучей $L(O, A)$ в пространстве предметов и точек в плоскости изображения $P: L(O, A) \rightarrow a(u, v)$. Для оценки трехмерных координат точки методом триангуляции модель ОЭС должна быть обратимой и предоставлять возможность получить обратное преобразование $P^{-1}: a(u, v) \rightarrow L(O, A)$. Такой моделью является проективная модель, которая достаточно точно описывает процесс формирования изображения ОЭС с полем зрения в пределах 60° [9]. В случае использования более широкоугольных ОЭС могут использоваться и другие модели, наиболее универсальной из которых является полиномиальная [10, 11].

Пространственное расположение в трехмерном евклидовом пространстве ОЭС проекции и регистрации описывается набором преобразований между СК, связанными с каждым из этих устройств. Выбрав одну из СК в качестве глобальной, зададим набор преобразований $(\mathbf{R}_i, \mathbf{t}_i)$, связывающих координаты точки в i -й СК $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)^T$ с ее координатами в ГСК \mathbf{x}_g выражением $\mathbf{x}_i = E_i(\mathbf{x}_g) = \mathbf{R}_i \mathbf{x}_g + \mathbf{t}_i$. Преобразование между двумя произвольными i -й и j -й СК определяется соотношениями [7, 12]

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{i \rightarrow j} &= \mathbf{R}_j \mathbf{R}_i^{-1}, \\ \mathbf{t}_{i \rightarrow j} &= \mathbf{t}_j - \mathbf{R}_j \mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{t}_i. \end{aligned} \tag{1}$$

Набор преобразований P_i и E_i , описывающих характеристики и взаимное расположение ОЭС, параметризуется вектором $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1^T, \dots, \mathbf{v}_N^T)^T$, компоненты которого определяются в процессе предварительной калибровки [7, 9–13].

Решаемая в настоящей работе задача – оценка трехмерных координат точки \mathbf{x} по N зарегистрированным изображениям $\mathbf{p}_i = P_i(\mathbf{x})$, $i = \overline{1, N}$ – может рассматриваться как определение координат пересечения лучей $L_i = P_i^{-1}(\mathbf{p}_i)$. Из-за наличия ошибок в определении координат сопряженных точек \mathbf{p}_i эти лучи являются скрещивающимися, а алгоритм триангуляции T используется для оценки параметра $\hat{\mathbf{x}}$, минимизирующей некоторый критерий C .

Используя ранее введенные обозначения, представим алгоритм триангуляции в виде

$$\hat{\mathbf{x}} = T(\mathbf{p}, \mathbf{v}) = \underset{\hat{\mathbf{x}}}{\operatorname{argmin}} (C(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{p}, \mathbf{v})). \tag{2}$$

Выбор критерия минимизации в общем случае не очевиден и в значительной мере зависит от априорных данных о положении точки \mathbf{x} , ее изображений \mathbf{p}_i , преобразованиях P_i и от характера ошибок в определении координат. Если отклонение измеренных координат изображения точки \mathbf{p}_i от их истинного

значения $\bar{\mathbf{p}}_i$ соответствует нормальному распределению $N(\mathbf{0}, \Sigma_{\mathbf{p}_i})$, то оптимальным является алгоритм, минимизирующий расстояние Махаланобиса в плоскостях изображений устройств регистрации, т.е. [7, 14]

$$C = \sum_{i=1}^N \|\mathbf{p}_i - P_i \circ E_i(\hat{\mathbf{x}})\|_{\Sigma}^2 = \sum_{i=1}^N (\mathbf{p}_i - \hat{\mathbf{p}}_i)^T \Sigma_{\mathbf{p}_i}^{-1} (\mathbf{p}_i - \hat{\mathbf{p}}_i), \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{p}}_i = P_i \circ E_i(\hat{\mathbf{x}})$ – оценка координат скорректированного положения изображения точки $\hat{\mathbf{x}}$ в плоскости изображений i -го устройства регистрации, а $\Sigma_{\mathbf{p}_i}^{-1}$ – обратная (с учетом ранга) матрица ковариации измерения координат для \mathbf{p}_i , причем $\Sigma_{\mathbf{p}} = \text{diag}(\Sigma_{\mathbf{p}_1}, \Sigma_{\mathbf{p}_2}, \dots, \Sigma_{\mathbf{p}_N})$. Оценка координат точки $\hat{\mathbf{x}}$, полученная в результате минимизации критерия (3) будет асимптотически несмещенной и эффективной в пределе для малых шумов, и такой алгоритм дает оценку с минимальной дисперсией, соответствующей неравенству Рао–Крамера [14].

На основе данной модели рассмотрим основные факторы, дающие вклад в погрешность измерения координат отдельных точек $\hat{\mathbf{x}}$ и площади в целом, и оценим их относительную величину.

Учет формы исследуемой поверхности

Проведем оценку погрешности измерения площади поверхности, ограниченной контуром, считая, что он задан набором точек, принадлежащих поверхности, а ограниченная контуром фигура разбивается на плоские треугольники, сумма площадей которых определяет искомую площадь поверхности. В таком случае оценку погрешности измерения площади можно рассматривать для одного треугольника. Ввиду отсутствия аналитического решения для произвольной поверхности ограничимся рассмотрением двух практически важных случаев – цилиндрической и сферической поверхностей.

Зададим цилиндр с радиусом r_0 , ось вращения которого совпадает с осью Oz (рис. 3, а) и рассмотрим треугольник ΔABC , у которого вершина A находится на оси Ox , сторона AB лежит в плоскости xOy , а сторона AC – в плоскости xOz параллельно оси Oz .

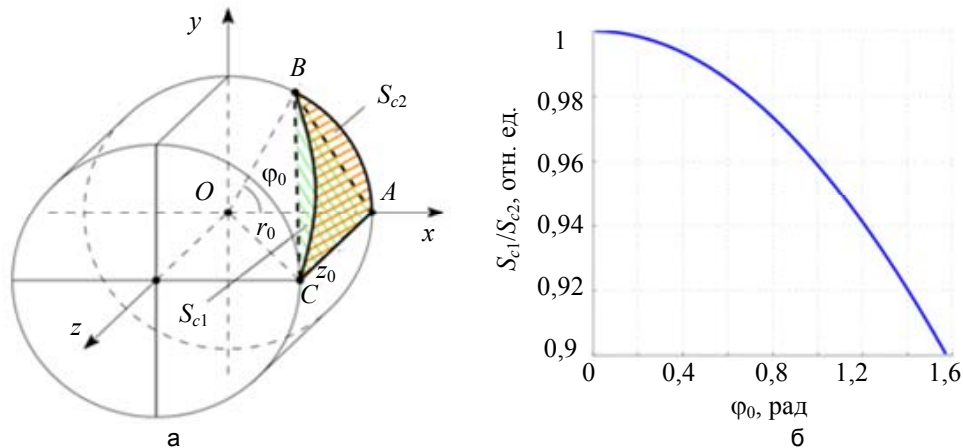


Рис. 3. К вычислению площади S_{c2} треугольника ΔABC на цилиндрической поверхности: система координат (а); зависимость S_{c1}/S_{c2} от полярного угла φ_0 (б)

Можно показать, что площадь треугольника ΔABC определяется по формуле

$$S_{c1} = \frac{1}{2} z_0 \sqrt{r_0^2 (1 - \cos \varphi_0)^2 + r_0^2 \sin^2 \varphi_0} = r_0 z_0 \sqrt{\frac{1 - \cos \varphi_0}{2}}. \quad (4)$$

Площадь поверхности цилиндра, ограниченной дугами AB и BC и прямой AC , можно определить следующим образом:

$$S_{c2} = \int_0^{z_0} \int_0^{\varphi_{BC}(z)} r \, d\varphi \, dz = r_0 \int_0^{z_0} \frac{(z_0 - z) \sin \varphi_0}{z + (z_0 - z) \cos \varphi_0} \, dz = r_0 z_0 \left(\frac{\pi}{2} - \arctg \left(\text{ctg} \frac{\varphi_0}{2} \right) \right). \quad (5)$$

При ограничении значения угла φ_0 диапазоном от 0 до π с учетом $\pi/2 - \arctg(\text{ctg}(\varphi_0/2)) = \varphi_0/2$ выражение (5) упрощается, тогда отношение площадей, найденных по формулам (4) и (5) будет равно

$$\frac{S_{c1}}{S_{c2}} = \frac{\sqrt{2 - 2 \cos \varphi_0}}{\varphi_0} = \frac{l/r_0}{\arccos(1 - 0,5(l/r_0)^2)}, \quad (6)$$

где $l = \|AB\|$. Из (6) видно, что погрешность измерения площади на поверхности цилиндра зависит только от отношения l/r_0 длины стороны AB к радиусу цилиндра r_0 .

Для случая измерения площади на сферической поверхности зададим сферу с радиусом r_0 , центр которой совпадает с началом координат O (рис. 4, а) и рассмотрим треугольник ΔABC , у которого вершина A находится на оси Ox , сторона AB лежит в плоскости xOy , а сторона AC – в плоскости xOz .

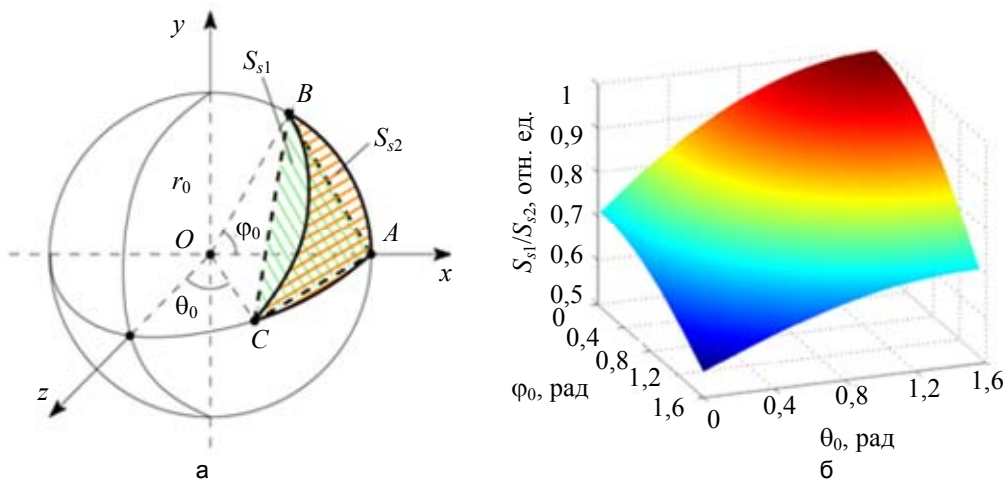


Рис. 4. К вычислению площади S_{s2} треугольника ΔABC на сферической поверхности: система координат (а); зависимость S_{s1}/S_{s2} от углов φ_0 и θ_0 (б)

ы

Записав координаты вершин треугольника ΔABC в сферической системе координат $A(r_0, 0, \pi/2)$, $B(r_0, \varphi_0, \pi/2)$, $C(r_0, 0, \theta_0)$ и в декартовой системе координат $A(r_0, 0, 0)$, $B(r_0 \cos \varphi_0, r_0 \sin \varphi_0, 0)$, $C(r_0 \sin \theta_0, 0, r_0 \cos \theta_0)$, вычислим площадь треугольника ΔABC :

$$S_{s1} = \frac{1}{2} \|AB \times AC\| = \frac{r_0^2}{2} \sqrt{\sin^2 \varphi_0 \cos^2 \theta_0 + (\cos \varphi_0 - 1)^2 \cos^2 \theta_0 + (\sin \theta_0 - 1)^2 \sin^2 \varphi_0}. \quad (7)$$

Для расчета площади поверхности сферы, ограниченной дугами AB , AC и BC , воспользуемся формулами сферической тригонометрии [15]. Сферический треугольник ΔABC является прямоугольным, так как угол при вершине A равен $\pi/2$. Углы при вершинах B и C можно найти по формулам

$$\begin{aligned} \angle B &= \arccos(\varphi_0 \arccos(\cos \varphi_0 \sin \theta_0)), \\ \angle C &= \arccos((\pi/2 - \theta_0) \arccos(\cos \varphi_0 \sin \theta_0)). \end{aligned} \quad (8)$$

Тогда искомую площадь S_{s2} сферического треугольника с учетом (8) можно вычислить как

$$S_{s2} = r_0^2 (\angle A + \angle B + \angle C - \pi) = r_0^2 (\angle A + \angle B - \pi/2). \quad (9)$$

Отношение площадей, найденных по формулам (7) и (9), не зависит от радиуса сферы r_0 , а определяется лишь величиной углов φ_0 и $(\pi/2 - \theta_0)$, которые опираются на стороны AB и AC , вершиной которых является центр сферы.

Из графиков на рис. 3, б, и рис. 4, б, видно, что при реальных значениях углов φ_0 и θ_0 погрешность измерения площади, вызванная аппроксимацией плоскими треугольниками, на цилиндрической и сферической поверхностях составляет менее 1%, что для измерений, показанных на рис. 1, соответствует приблизительно 1 мм^2 . Таким образом, погрешность измерения площади, вызванная аппроксимацией участка неплоской поверхности набором плоских треугольников, не является основной и ею не может определяться неточность измерения площади в эксперименте.

Учет погрешности измерения трехмерных координат точек

Для определения зависимости погрешности оценки трехмерных координат точки \hat{x} от погрешности определения координат изображений точек p , при использовании алгоритма триангуляции (2) воспользуемся теоремой, приведенной в работе [16]. После подстановки выражения для используемого критерия (3) и ряда преобразований получим выражения для частных производных смещения оценки и матрицы ковариации:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial \mathbf{p}^T}{\partial \mathbf{x}} \Sigma_p^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{x}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}^T}{\partial \mathbf{x}} \Sigma_p^{-1}, \quad (10)$$

$$\Sigma_x = \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{p}} \Sigma_p \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}^T}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial \mathbf{p}^T}{\partial \mathbf{x}} \Sigma_p^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{x}} \right)^{-1}, \quad (11)$$

где $\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{x}} = \left(\left(\frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{x}_1} \frac{\partial E_1}{\partial \mathbf{x}} \right)^T, \left(\frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{x}_2} \frac{\partial E_2}{\partial \mathbf{x}} \right)^T, \dots, \left(\frac{\partial P_N}{\partial \mathbf{x}_N} \frac{\partial E_N}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \right)^T$. Данные выражения получены для случая, когда

калибровка системы проведена без ошибок, а преобразования P_i и E_i определены точно. Аналогичные выражения, учитывающие погрешности калибровки, приведены в работе [17].

Далее, согласно выражениям (10) и (11), будут даны оценки погрешности измерения площади, вызванной неточностью измерения трехмерных координат точек, в показанном на рис. 1 эксперименте.

Учет формы поверхности при триангуляции

Рассмотрим работу алгоритма триангуляции с учетом принадлежности точек A поверхности определенного типа. Будем считать, что поверхность задана в параметрической форме: координаты точек \mathbf{x} , принадлежащих поверхности, можно выразить через вектор параметров положения $\mathbf{a} = (a, b)^T$ в виде функции $\mathbf{x} = S(\mathbf{a})$. В данном случае координаты точек \mathbf{x} приводятся в СК, связанной с задаваемой поверхностью, для перехода в ГСК будем использовать преобразование $\mathbf{x}_g = E_s(\mathbf{x}) = \mathbf{R}_s \mathbf{x} + \mathbf{t}_s$, для переходов в другие СК – выражение (1). Параметры, описывающие \mathbf{R}_s и \mathbf{t}_s , и дополнительные параметры, входящие в функцию $S(\mathbf{a})$, например, радиус цилиндрической или сферической поверхности, запишем в виде вектора параметров поверхности \mathbf{v}_s . С учетом введенных обозначений алгоритм триангуляции может быть представлен в виде

$$\hat{\mathbf{a}} = T(\mathbf{p}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_s) = \underset{\hat{\mathbf{a}}}{\operatorname{argmin}} (C(\hat{\mathbf{a}}, \mathbf{p}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_s)). \quad (12)$$

Для определения трехмерных координат точки \mathbf{x} по N зарегистрированным изображениям \mathbf{p}_i , как и ранее, оптимально использовать алгоритм, который минимизирует расстояние Махаланобиса (3) в плоскостях изображений устройств регистрации, т.е.

$$C = \sum_{i=1}^N \|\mathbf{p}_i - P_i \circ E_i \circ E_s \circ S(\hat{\mathbf{a}})\|_{\Sigma}^2 = \sum_{i=1}^N (\mathbf{p}_i - \hat{\mathbf{p}}_i)^T \Sigma_{p_i}^{-1} (\mathbf{p}_i - \hat{\mathbf{p}}_i). \quad (13)$$

Отличием выражений (12) и (13) от (2) и (3) является то, что в результате минимизации будет получена оценка параметров $\hat{\mathbf{a}}$, определяющих координаты точки на поверхности. Для перехода к трехмерным координатам в ГСК требуется применить известное преобразование $\hat{\mathbf{x}}_g = E_s(S(\hat{\mathbf{a}}))$.

Для определения зависимости погрешности оценки $\hat{\mathbf{x}}$ от погрешности определения \mathbf{p}_i при использовании алгоритма триангуляции (12), учитывающего принадлежности точек поверхности, следует сначала определить зависимость погрешности параметров $\hat{\mathbf{a}}$ от погрешности определения \mathbf{p}_i . Для этого воспользуемся той же теоремой, что и в предыдущем случае, и после подстановки выражения для используемого критерия (13) и ряда преобразований получим выражения для частных производных смещения оценки и матрицы ковариации:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{a}}}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial \mathbf{p}^T}{\partial \mathbf{a}} \Sigma_p^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{a}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}^T}{\partial \mathbf{a}} \Sigma_p^{-1}, \quad (14)$$

$$\Sigma_a = \frac{\partial \hat{\mathbf{a}}}{\partial \mathbf{p}} \Sigma_p \frac{\partial \hat{\mathbf{a}}^T}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial \mathbf{p}^T}{\partial \mathbf{a}} \Sigma_p^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{a}} \right)^{-1}, \quad (15)$$

где $\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{a}} = \left(\left(\frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{x}_1} \frac{\partial E_1}{\partial \mathbf{x}_g} \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{a}} \right)^T, \left(\frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{x}_2} \frac{\partial E_2}{\partial \mathbf{x}_g} \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{a}} \right)^T, \dots, \left(\frac{\partial P_N}{\partial \mathbf{x}_N} \frac{\partial E_N}{\partial \mathbf{x}_g} \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{a}} \right)^T \right)^T$.

Апостериорная матрица ковариации Σ_a оценки параметров положения точки $\hat{\mathbf{a}}$ на поверхности объекта получена для случая, когда калибровка системы проведена без ошибок и преобразования P_i , E_i определены точно. Кроме того, принято, что точно определены ориентация и параметры поверхности, т.е. преобразования E_s и S .

Применим выражения (10)–(15) для определения погрешности измерения стереоскопическим методом координат точек с помощью видеоэндоскопа в соответствии с экспериментом, результаты которого показаны на рис. 1, б. Используем следующие данные: размер приемника излучения $1/10''$ (752×576 пикселей), угловое поле каждой ОЭС 60° , базовое расстояние 3 мм, ось зонда совпадает с осью цилиндра радиусом 20 мм, а объект измерения находится на расстоянии 50 мм от торца зонда. Для иллюстрации вида найденных согласно (11) и (15) матриц ковариации Σ_x оценки трехмерных координат точки в ГСК можно использовать эллипсоид ковариации, главные оси которого определяются собственными векторами и собственными числами матрицы Σ_x . В случае нормального распределения такой эллипсоид ограничивает область пространства, в которой точка \hat{x} лежит с заданной вероятностью [18]. На рис. 5 показан результат расчета погрешности координат точек (эллипсоиды, соответствующие вероятности 90%) для двух рассмотренных алгоритмов триангуляции: классического, используемого в настоящее время (рис. 5, а), и алгоритма, учитывающего принадлежность точки цилиндрической поверхности (рис. 5, б).

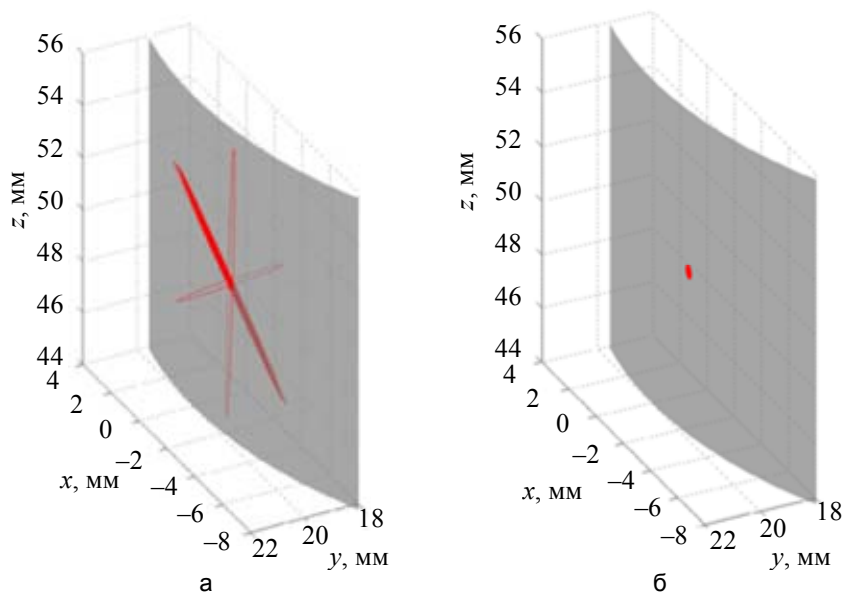


Рис. 5. Иллюстрация погрешности определения трехмерных координат точки \hat{x} для различных алгоритмов триангуляции: классический алгоритм (а); с учетом принадлежности точки цилиндрической поверхности (б)

Для обычного алгоритма триангуляции (алгоритм 1) СКО погрешности измерения координат точек составляет около $\sigma_r = 2,3$ мм в радиальном направлении (вдоль радиус-вектора точки в ГСК) и около $\sigma_t = 0,06$ мм в поперечном направлении. При использовании алгоритма, учитывающего принадлежность точки поверхности, (алгоритм 2) эллипсоид ковариации вырождается в эллипс, лежащий в плоскости, касательной к поверхности цилиндра в рассматриваемой точке (рис. 5, б). При этом СКО погрешности измерения координат точек в данной плоскости составляет около $\sigma_r = 0,12$ мм, т.е. на порядок меньше, чем при классическом алгоритме.

Считая погрешности оценки координат точек \hat{x}^1 , \hat{x}^2 и \hat{x}^3 , задающих на исследуемой поверхности произвольный плоский треугольник площадью $S_{\text{тр}} = \left\| \left(\mathbf{x}^2 - \mathbf{x}^1 \right) \times \left(\mathbf{x}^3 - \mathbf{x}^1 \right) \right\| / 2$, независимыми, получим выражение для определения дисперсии $\sigma_{S_{\text{тр}}}^2$ погрешности вычисления площади этого треугольника:

$$\sigma_{S_{\text{тр}}}^2 = \sum_{j=1,2,3} \frac{\partial S_{\text{тр}}}{\partial x^j} \Sigma_{x^j} \frac{\partial S_{\text{тр}}^T}{\partial x^j} . \tag{16}$$

Для случая, показанного на рис. 1, б, СКО погрешности измерения площади одного треугольника площадью $12,5 \text{ мм}^2$, согласно (16), составляет $\sigma_{S_{\text{тр}}} = 8,3 \text{ мм}^2$ для классического алгоритма триангуляции и $\sigma_{S_{\text{тр}}} = 0,5 \text{ мм}^2$ для алгоритма с учетом принадлежности точек цилиндрической поверхности. Вывод выражения для оценки погрешности измерения площади всей фигуры, указанной на рис. 1, б, аналогичен (16), но более сложен ввиду наличия общих вершин у соседних треугольников. Можно показать, что СКО погрешности измерения площади фигуры в этом случае составляет $\sigma_{S_{\Phi}} = 35,3 \text{ мм}^2$ для

первого и $\sigma_{s_p} = 1,9 \text{ мм}^2$ для второго алгоритмов соответственно. Таким образом, учет принадлежности точек цилиндрической поверхности позволяет значительно снизить погрешность измерения площади.

Заключение

В работе впервые проанализированы основные факторы, определяющие погрешность измерения площади поверхностных дефектов на объектах сложной формы при видеоэндоскопическом контроле. Показано, что интерполяция поверхности набором плоских треугольников, как правило, не является доминирующим фактором. Основная погрешность определяется отсутствием учета принадлежности отдельных точек к поверхности заданной формы. В связи с этим использование априорной информации о форме исследуемой поверхности, которая зачастую доступна из конструкторской документации, могло бы во многих случаях радикально повысить точность измерения площади поверхностных дефектов.

Представленные результаты справедливы для стереоскопического, теневого и фазового методов видеоэндоскопических измерений. Эти результаты могут быть эффективно использованы при разработке новых и модернизации существующих бесконтактных измерительных эндоскопических систем.

Литература

1. Клюев В.В., Соснин Ф.Р., Ковалев А.В. Неразрушающий контроль и техническая диагностика: Справочник / Под ред. В.В. Клюева. М.: Машиностроение, 2003. 656 с.
2. Чигорко А.Б., Чигорко А.А. Узлы и системы волоконно-оптических эндоскопов. Томск: ТПУ, 2007. 134 с.
3. Мачихин А.С. Современные технологии визуально-измерительного контроля авиационных двигателей // Двигатель. 2009. № 1. С. 26–28.
4. Мачихин А.С. Измерительные возможности современных видеоэндоскопов // Двигатель. 2009. № 3. С. 8–9.
5. Schick A., Forster F., Stockmann M. 3D measuring in the field of endoscopy // Proc. SPIE, 2011. V. 8082. Art. N 808216.
6. Иванов В.А., Марусина М.Я., Сизиков В.С. Обработка измерительной информации в условиях неопределенностей // Контроль. Диагностика. 2001. № 4. С. 40–43.
7. Hartley R.I., Zisserman A. Multiple View Geometry. 2nd ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000. 670 p.
8. Марусина М.Я. Инвариантный анализ и синтез в моделях с симметриями. СПб: СПбГУ ИТМО, 2004. 144 с.
9. Kannala J., Heikkilä J., Brandt S.S. Geometric camera calibration / In: Wah B.W. (ed.) Wiley Encyclopedia of Computer Science and Engineering. Hoboken, USA: Wiley, 2009. P. 1389–1400.
10. Ramalingam S. Generic Imaging Models: Calibration and 3D Reconstruction Algorithms. Ph. D. thesis. Santa Cruz, USA: Institut National Polytechnique de Grenoble, 2006. 192 p.
11. Kannala J., Brandt S.S. A generic camera model and calibration method for conventional, wide-angle, and fish-eye lenses // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2006. V. 28. N 8. P. 1335–1340.
12. Forsyth D.A., Ponce J. Computer Vision: a Modern Approach. 2nd ed. Upper Saddle River, USA: Prentice-Hall, 2012. 793 p.
13. Zhang Z. Flexible camera calibration by viewing a plane from unknown orientations // Proc. of IEEE International Conference on Computer Vision. 1999. V. 1. P. 666–673.
14. Kanatani K. Statistical Optimization for Geometric Computation: Theory and Practice. Mineola, USA: Dover Publications, 2005. 528 p.
15. Волынский Б.А. Сферическая тригонометрия / Под ред. В.В. Клюева. М.: Наука, 1977. 136 с.
16. Zhang Z. Determining the epipolar geometry and its uncertainty: a review // International Journal of Computer Vision. 1998. V. 27. N 2. P. 161–195.
17. Горевой А.В., Колочкин В.Я. Методы оценки погрешности измерения координат в комплексированных системах регистрации трехмерных образов объектов // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. № 9 (21). С. 45.
18. Johnson R.A., Wichern D.W. Applied Multivariate Statistical Analysis. 6th ed. Upper Saddle River, USA: Pearson Prentice Hall, 2007. 773 p.

<i>Горевой Алексей Владимирович</i>	– ассистент, соискатель, МГТУ имени Н.Э. Баумана, Москва, Россия, gogevoy.a@gmail.com
<i>Мачихин Александр Сергеевич</i>	– кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, Москва, Россия, aalexander@mail.ru
<i>Перфилов Алексей Михайлович</i>	– начальник сектора, ОАО «НПО Энергомаш им. акад. В.П. Глушко», Химки, Россия; соискатель, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, windows95@bk.ru

- Alexei V. Gorevoy* – assistant, applicant, Bauman Moscow State Technological University, Moscow, Russia, gorevoy.a@gmail.com
- Alexander S. Machikhin* – PhD, senior scientific researcher, Scientific and Technological Center of Unique Instrumentation RAS, Moscow, Russia, aalexanderr@mail.ru
- Alexei M. Perfilov* – Head of sector, JSC «NPO Energomash named after academician V.P.Glushko», Khimki, Russia; applicant, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, windows95@bk.ru

Принято к печати 21.05.14

Accepted 21.05.14

УДК 621.3.031

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ ЗАПАСАНИЯ ЭНЕРГИИ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ОБЛАСТЕЙ ПРИМЕНЕНИЯ СОВРЕМЕННЫХ СУПЕРМАХОВИКОВ

М.А. Соколов^а, В.С. Томасов^а, R.P. Jastrzębski^б

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, tomasov@ets.ifmo.ru

^б Лаппеенрантский технологический университет, Лаппеенранта, Финляндия

Аннотация. Выполнен обзор и сравнительный анализ отечественных и зарубежных литературных источников последних лет по различным накопителям энергии. Рассмотрены современные разработки и опыт применения в различных областях техники. Сформулированы сравнительные показатели накопителей энергии – эффективность, качество и стабильность. Приведены типичные характеристики таких накопителей, как электрохимические аккумуляторы, суперконденсаторы, гидроаккумулирующие электростанции, системы на основе сжатого воздуха и индуктивные сверхпроводящие накопители. Показаны преимущества и перспективы высокоскоростных супермаховиков как одного из способов запасания энергии в виде кинетической энергии вращения. Большая выходная мощность супермаховика позволяет использовать его в качестве буферного источника пиковой мощности. Показано, что супермаховики обладают большим жизненным циклом (более 20 лет) и экологичностью. Отличительной особенностью таких источников является их хорошая масштабируемость. Продемонстрировано, что супермаховики особенно эффективны в гибридных энергоустановках, работающих в режиме заряд/разряд и применяемых, в частности, на электротранспорте. Важнейшими факторами для космического применения супермаховиков являются их модульность, высокая эффективность, отсутствие механического трения и долгое время работы без обслуживания. Быстрое время реакции на изменения в сети и высокая выходная мощность могут использоваться для поддержания требуемого качества электроэнергии и общей надежности сети одновременно с выполнением задачи накопления энергии.

Ключевые слова: супермаховик, запасание энергии, хранение энергии, энергоэффективность, магнитные подшипники, возобновляемые источники.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

Работа выполнена в рамках разработки устройств запасания энергии для возобновляемых источников в Лаппеенрантском технологическом университете при проектировании умной системы электроснабжения «Green Campus» (научно-техническая программа ЕС «Horizon 2020»).

COMPARATIVE ANALYSIS OF ENERGY ACCUMULATION SYSTEMS AND DETERMINATION OF OPTIMAL APPLICATION AREAS FOR MODERN SUPER FLYWHEELS

M.A. Sokolov^а, V.S. Tomasov^а, R.P. Jastrzębski

^а Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, tomasov@ets.ifmo.ru

^б Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland

Abstract. The paper presents a review and comparative analysis of late years native and foreign literature on various energy storage devices: state of the art designs, application experience in various technical fields. Comparative characteristics of energy storage devices are formulated: efficiency, quality and stability. Typical characteristics are shown for such devices as electrochemical batteries, super capacitors, pumped hydroelectric storage, power systems based on compressed air and superconducting magnetic energy storage systems. The advantages and prospects of high-speed super flywheels as means of energy accumulation in the form of rotational kinetic energy are shown. High output power of a super flywheels energy storage system gives the possibility to use it as a buffer source of peak power. It is shown that super flywheels have great life cycle (over 20 years) and are environmental. A distinctive feature of these energy storage devices is their good scalability. It is demonstrated that super flywheels are especially effective in hybrid power systems that operate in a charge/discharge mode, and are used particularly in electric vehicles. The most important factors for space applications of the super flywheels are their modularity, high efficiency, no mechanical friction and long operating time without maintenance. Quick response to network disturbances and high power output can be used to maintain the desired power quality and overall network stability along with fulfilling energy accumulation needs.

Keywords: super flywheel, energy accumulation, energy storage, energy efficiency, magnetic bearings, renewable power sources.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation, Grant 074-U01. The work is performed within the development project devoted to energy storage devices for renewable power sources in Lappeenranta University of Technology for «Green Campus» smart grid system (EU Research and Innovation Program "Horizon 2020").

Введение

Современные тенденции развития многих областей науки и техники, таких как электроэнергетика, электротранспорт, электrorаспределительные сети, а также возобновляемые источники энергии, ставят новые задачи по улучшению как количественных, так и качественных характеристик энергосистем. Одной из таких задач является задача запасания электроэнергии для улучшения показателей эффективности, качества и стабильности источников электроэнергии. Методы запасания энергии различаются по многим параметрам, таким как выходная мощность, количество запасаемой энергии, время хранения, количество циклов

заряд/разряд, стоимость, массогабаритные показатели, а также по специфике внедрения. Все это ограничивает области их применения, а также требует внимания при проектировании энергосистем на их основе.

Современной энергоэффективной и высокотехнологичной альтернативой перечисленным способам хранения энергии является устройство запасаения кинетической энергии – супермаховик [1]. Возможность использования маховиков в качестве конкурентоспособного устройства хранения энергии появилась сравнительно недавно благодаря разработкам в областях композитных материалов, магнитных подшипников, электрических машин и полупроводниковой электроники.

Все перечисленные методы хранения энергии имеют свои достоинства и недостатки, которые необходимо учитывать при разработке и внедрении систем запасаения энергии для решения конкретных задач. По причине многих специфических особенностей супермаховиков, а также других представленных методов задача выбора оптимальной системы хранения энергии является нетривиальной и требует особого внимания. Целью настоящей работы является сравнение супермаховиков с другими методами запасаения энергии по различным параметрам и аспектам использования, а также определение оптимальных областей применения супермаховиков.

Обзор характеристик и специфики супермаховиков

Долгое время использование маховиков имело целью лишь обеспечение плавной работы машин и механизмов. Новейшие разработки последних лет позволили создать супермаховики – сложные высокотехнологичные устройства, главным назначением которых является запасаение энергии. Супермаховик запасаает энергию в виде кинетической энергии вращения. Количество энергии пропорционально инерции вращающегося тела J и квадрату угловой скорости вращения ω , согласно формуле

$$E_k = \frac{1}{2} J \omega^2. \quad (1)$$

Кинетическая энергия передается на маховик и от маховика при помощи мотор-генератора – обратимой электрической машины, чаще всего встроенной в конструкцию маховика. При работе в режиме двигателя электрическая энергия, подводимая к обмоткам статора, создает вращающий момент и увеличивает скорость вращения маховика. В режиме генератора имеет место обратный процесс – превращение кинетической энергии вращения в генераторный момент на валу и впоследствии в электрическую энергию. Для двустороннего обмена энергией мотор-генератор подключен к сети посредством обратимого преобразователя. Общий вид типичной конструкции супермаховика со встроенным мотор-генератором, подключенного к звену постоянного тока через инвертор напряжения, представлен на схеме (рисунок).

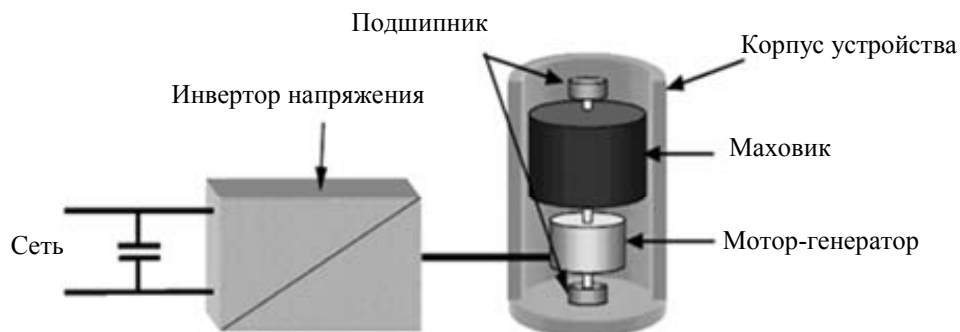


Рисунок. Общая схема супермаховика

До недавнего времени определенный круг технических проблем не позволял супермаховикам конкурировать с другими способами запасаения энергии. Прежде всего, это было связано с недостаточной энергоэффективностью, удельной энергоемкостью и максимальным временем хранения энергии. Все вышеперечисленное являлось причиной для неоправданного увеличения массогабаритных показателей, стоимости изготовления и эксплуатации, ограничения областей применимости и т.д.

Из формулы (1) видно, что запасаемая в маховике кинетическая энергия имеет линейную зависимость от момента инерции вращающейся массы и квадратичную зависимость от скорости вращения. Соответственно при росте скорости вращения, даже если масса и момент инерции маховика будут пропорционально уменьшаться, количество запасаемой энергии будет расти [2]. Это утверждение позволяет сделать вывод о том, что материал для изготовления маховика с высокой энергоемкостью должен иметь высокий предел прочности при низкой плотности для работы при высоких скоростях вращения. До недавнего времени самыми распространенными материалами для изготовления маховиков являлись конструкционные стали, которые при высокой плотности не обеспечивают достаточной прочности на разрыв для сохранения структурной целостности при высоких скоростях вращения. Внедрение современных композитных материалов для изготовления маховиков, таких как стекловолокно и карбоновое волокно, предел прочности ко-

торых превышает сталь до пяти раз [3], позволило значительно увеличить скорости вращения и энергоемкость системы. Сравнение композитных материалов с металлами представлено в табл. 1 [4].

Материал	Композитные материалы			Металлы (примерные значения)	
	Toray T800	Toray T700	Advantex E-glass	Углеродистая сталь	Титановые сплавы
Пределная прочность, МПа	3100	2800	1400	300–1300	400–1400
Плотность, кг/м ³	1600	1594	2146	7800	4500

Таблица 1. Типичные механические характеристики материалов маховика

Помимо этого, высокие скорости увеличивают нагрузки и создают повышенные требования к подшипниковым узлам конструкции. Для решения этой проблемы в качестве элемента опоры ротора супермаховика используются активные магнитные подшипники, что позволяет поддерживать ротор по принципу магнитной левитации [1]. Развитие более прогрессивных алгоритмов управления, а также микропроцессорной техники позволяет в реальном времени стабилизировать ротор при любых скоростях вращения и добиться полного отсутствия соприкосновения ротора с другими элементами конструкции и свести механическое трение к нулю [5]. Помимо решения уже упомянутой проблемы высоких скоростей вращения, магнитные подшипники обладают другими достоинствами, особенно важными для супермаховиков. Следствием полностью бесконтактной работы являются устранение механического износа и необходимости регулярного технического обслуживания, что увеличивает рентабельность и надежность системы.

Другой мерой уменьшения потерь и последним шагом к долговременному хранению энергии является помещение ротора в безвоздушное пространство. Это достигается созданием специальной оболочки, способной выдержать атмосферное давление снаружи и поддерживать определенный уровень вакуума внутри. Поддержание сверхнизкого давления в камере требует вакуумного насоса, что несколько увеличивает сложность и стоимость системы, но необходимо для устранения аэродинамических потерь и запаса энергии на длительный срок. Работа магнитных подшипников и электрической машины в вакуумной среде требует отдельного внимания при проектировании со стороны, во-первых, используемых материалов, а во-вторых – отвода тепловых потерь [6].

Высокие скорости вращения и требования эффективности также подразумевают создание эффективных высокоскоростных электрических машин и высокочастотных преобразователей. Исследования последних лет в области электрических машин позволяют создавать бесколлекторные машины на постоянных магнитах и реактивные электродвигатели, коэффициент полезного действия (КПД) которых достигает 95% в номинальном режиме [7]. Использование таких типов машин требует высокочастотного инвертора. Коммерческие модели инверторов в настоящее время поддерживают частоты до 500 Гц, что позволяет обеспечивать работу двухполюсных машин на скоростях до 30000 об/мин, а также имеют достаточно высокое быстродействие для компенсации пульсаций и скачков сетевого напряжения. Это свойство составляет важную особенность супермаховика и является одним из главных преимуществ по сравнению с аккумуляторами. КПД преобразования инвертора, использующегося для питания супермаховика, может достигать 95–98% [8]. При создании специализированных моделей инверторов частота питания может быть увеличена, а КПД доведен до верхней границы указанного диапазона.

Общий КПД, с учетом потерь при хранении энергии и эффективности преобразования, превосходит 85% и в некоторых случаях может достигать максимальных значений в 97% [9]. Пределная энергоемкость современных супермаховиков достигает 300 Вт·ч/кг [10]. По прогнозам развития композитных материалов и увеличения их предела прочности, показатель энергоемкости может быть увеличен до 800 Вт·ч/кг в ближайшие 5 лет, а долговременный прогноз теоретического максимума достигает значения 2700 Вт·ч/кг [11].

Краткий обзор других способов запаса энергии

Для сравнения супермаховиков с другими способами запаса энергии необходимо рассмотреть характерные параметры и особенности современных способов хранения энергии, использующихся на практике в различных областях.

Электрохимические аккумуляторы. Являются одним из самых известных способов хранения энергии и широко используются в этом качестве в различных приложениях. Аккумуляторы являются модульным, бесшумным и относительно дешевым устройством [12]. Привлекательным вариантом их также делает неприхотливость к рабочей среде, удобство и быстрота установки. Крупные аккумуляторные сис-

темы используют инвертор для преобразования постоянного тока аккумулятора в переменный ток поддерживаемой сети. Общая эффективность такой системы обычно находится в диапазоне 60–80% [12]. Относительно низкая эффективность преобразования объясняется тем, что аккумуляторы запасают энергию при помощи электрохимического процесса. Каждый цикл преобразования энергии неизбежно сопровождается выделением тепла, что уменьшает КПД преобразования и требует контроля температуры для предотвращения уменьшения долговечности или термического повреждения аккумулятора.

Другой проблемой является ограниченный жизненный цикл аккумулятора. Он определяется как число циклов заряда/разряда, которое батарея может обеспечить, и является фиксированной величиной для каждого типа аккумуляторов. Более того, жизненный цикл зависит от типичной глубины разряда, которой аккумулятор подвергается при работе. При относительно невысоких показателях глубины разряда жизненный цикл не изменяется, но может ухудшиться при глубоком разряде.

Электрохимические аккумуляторы также имеют строго ограниченную скорость разряда или выходную мощность, превышение которой может повредить аккумулятор. Это значение может составлять 10–25% от общей емкости аккумулятора [13], в зависимости от типа, что значительно ограничивает применимость аккумуляторных батарей в приложениях большой мощности.

Суперконденсаторы. Суперконденсаторы или ионисторы являются электрохимическим устройством, совмещающим достоинства аккумуляторных батарей и конденсаторов. Такой тип устройств запасания энергии известен примерно с 1960-х гг. [14]. Механизм запасания энергии суперконденсатором не включает химических реакций, что делает цикл заряд/разряд более быстрым, надежным, отличающимся от аккумуляторов значительно большим жизненным циклом – до сотен тысяч циклов заряд/разряд [15]. Суперконденсатор также отличается устойчивостью к внешним воздействиям – температурным диапазоном от -40°C до $+65^{\circ}\text{C}$, вибрационной и ударной стойкостью [14]. Главным недостатком и ограничительным фактором применения суперконденсаторов является относительно низкая плотность энергии. По сравнению с электрохимическими аккумуляторами, типичная плотность энергии может быть на порядок меньше. При этом суперконденсаторы при тех же параметрах могут иметь на порядок большую выходную мощность, что позволяет использовать их вместе с аккумуляторами, объединяя их достоинства и компенсируя недостатки.

Самостоятельно суперконденсаторы часто используются для кратковременного запасания небольших количеств энергии, улучшения качества электроэнергии и стабильности небольших сетей. Суперконденсаторы являются многообещающей альтернативой аккумуляторам при длительном жизненном цикле, быстром цикле заряд/разряд и эффективностью около 95% и выше [14, 16]. Главными проблемами суперконденсаторов остаются низкая плотность энергии и высокая стоимость [14].

Гидроаккумулирующие электростанции. Гидроаккумулирующие электростанции (ГАЭС) используются во всем мире в течение более чем 70 лет. Эти крупномасштабные системы хранения энергии являются наиболее широко применяемой технологией хранения энергии, используемой сегодня [12]. Примерно 280 проектов ГАЭС работают по всему миру, обеспечивая генерируемую мощность около 90 ГВт, что составляет около 3% мировой генерации электроэнергии [12, 17]. Такой тип электростанций работает по тому же принципу, что и обычные ГЭС, с той лишь разницей, что их генераторы могут также работать в режиме двигателя. Во время низкого потребления электроэнергии вода закачивается из нижнего резервуара в верхний, а во время высокого энергопотребления вращает турбину и производит электроэнергию по принципу гидрогенератора.

Такие системы способны запастись большим количеством энергии на длительное время при эффективности полного цикла около 70–80% [12, 17]. Количество запасаемой энергии зависит только от вместимости резервуара. Главным недостатком такого способа хранения энергии является использование больших площадей для создания резервуаров и необходимый перепад высот. Большинство подходящих участков земли уже использованы, а освоение новых сопряжено с нанесением большого вреда экологии региона. Также такие системы требуют длительного времени на создание и сопряжены с большими расходами на проектирование и реализацию.

Системы со сжатым воздухом. Сжатый воздух используется в качестве носителя для хранения энергии относительно недавно. Первая система, основанная на принципе сжатия и расширения воздуха, была построена в Huntorf, Германия, в 1978 г. Энергоемкость системы составляет 290 МВт в течение 4 часов. При этом полная эффективность преобразования составляет около 85% [12, 18]. Это объясняется тем, что такой тип электростанций чаще всего использует сжатый воздух в сочетании с одним из различных видов топлива для работы турбогенератора. Но электростанция со сжатым воздухом использует на две трети меньше топлива, по сравнению с обычными термоэлектростанциями, и способна начать работу в течение лишь нескольких десятков минут [18].

Основной особенностью системы запасания энергии со сжатым воздухом является герметичный и очень большой резервуар. Создание подземных резервуаров для сжатого воздуха сопряжено с большими трудностями, а небольшие резервуары, находящиеся на поверхности, как правило, ограничены в накоплении энергии лишь на несколько часов [12]. Чтобы получить большую эффективность и создать систе-

му, работающую без дополнительного топлива, разрабатываются новые гибридные технологии, совмещающие описанный принцип с использованием суперконденсаторов, гидравлики и пневматики.

Сверхпроводящие системы. Индуктивные сверхпроводящие накопители являются одной из самых современных и технически сложных технологий хранения энергии. Они представляют собой криогенные системы, охлаждающие электромагнитную катушку до создания эффекта сверхпроводимости, что, по сути, исключает потери энергии в проводниках. Энергия в такой системе хранится в виде магнитного поля, которое может быть высвобождено в виде постоянного тока, который, в свою очередь, преобразуется в переменный ток с частотой сети. Такой принцип позволяет добиться быстрой реакции и высокой выходной мощности, а эффективность таких устройств может достигать 95–98% [12]. Помимо больших ГАЭС, это единственная система, которая способна сглаживать и компенсировать энергопотребление мощных систем при высоком КПД. При больших потенциальных возможностях технологии главными недостатками таких систем являются сложность охлаждения катушки до сверхпроводящих температур и крайне высокая стоимость производства и эксплуатации.

Сравнительный анализ и рекомендации по применению супермаховиков

После краткого обзора различных способов запасаения энергии выполнено количественное сравнение их параметров (табл. 2) [19, 20].

Параметры	Система					
	Аккумулятор	Супер-конденсатор	ГАЭС	Сжатый воздух	Сверх-проводная катушка	Супер-маховик
Эффективность, %	70	95	75	85	95	90
Энергоемкость, Вт·ч/кг	150	15	–	–	200	300
Количество циклов	10 ³	10 ⁶	10 ⁴	10 ⁴	10 ⁶	10 ⁵
Жизненный цикл, лет	3–5	10	20	20	10	20+
Время заряда	ч	сек	ч	ч	мин	мин
Выходная мощность	средняя	высокая	очень высокая	очень высокая	высокая	высокая
Стоимость	низкая	средняя	очень высокая	очень высокая	очень высокая	высокая
Масштабируемость	высокая	средняя	низкая	низкая	средняя	высокая
Экологические проблемы	средние	низкие	высокие	средние	низкие	низкие

Таблица 2. Сравнение типичных характеристик и свойств различных способов запасаения энергии

Рассмотрение специфических особенностей супермаховиков, их достоинств и недостатков по сравнению с другими способами запасаения энергии позволяет дать некоторые рекомендации по их применению.

Большая выходная мощность супермаховика позволяет использовать его в качестве буферного источника пиковой мощности в сочетании с другим устройством, не способном компенсировать пиковую мощность, например, аккумуляторами.

Высокая эффективность и большой жизненный цикл супермаховика в сочетании с экологичностью делают его отличным комплементарным устройством для возобновляемых источников энергии, таких как ветрогенераторы и солнечные батареи. Нерегулярность генерации таких источников, зависящая от внешних факторов, может быть эффективно скомпенсирована супермаховиком. Хорошая масштабируемость позволяет создавать устройства хранения энергии как для локальных источников возобновляемой энергии небольшой мощности, так и для крупных электростанций.

Еще одной рекомендуемой областью применения супермаховиков являются электротранспорт и транспортные средства с гибридными электроустановками. Повышение эффективности за счет рекуперативного торможения требует устройства для сохранения энергии, способного часто работать в режиме заряд/разряд и при этом поддерживать требуемый уровень энергоемкости, надежности и эффективности. Супермаховики могут успешно использоваться для этой цели на современных электромобилях, электропоездах, общественном транспорте, метро и т.д.

Более узкая ниша потенциального применения – аэрокосмическая отрасль, которая также может воспользоваться многими перечисленными достоинствами супермаховиков. Модульность, высокая эф-

фektivность, отсутствие механического трения и долгое время работы без обслуживания – важные факторы для космического применения.

Малое время реакции на изменения в сети и высокая выходная мощность могут использоваться для поддержания требуемого качества электроэнергии и общей надежности сети одновременно с выполнением задачи накопления энергии.

Заключение

В работе рассмотрены различные системы хранения энергии, а также современное устройство запасаения кинетической энергии – супермаховик. Анализ их характеристик и сравнение типичных параметров и специфичных особенностей применения позволили определить оптимальные области применения супермаховиков и дать основные рекомендации по их использованию. Сделан вывод о том, что супермаховики являются перспективным способом как запасаения энергии, так и улучшения качества и надежности электроснабжения сетей.

Развитие областей науки и техники, ставших основной причиной развития и распространения супермаховиков, будет способствовать дальнейшему улучшению характеристик и прогрессу в данной отрасли. Экологическая нейтральность супермаховиков также является важным преимуществом и в будущем будет все больше способствовать их распространению, вместе с возобновляемыми источниками энергии и умными сетями электроснабжения.

Проведенный анализ и рекомендации по внедрению супермаховиков будут использованы при разработке устройств запасаения энергии для возобновляемых источников в Лаппеенрантском технологическом университете для проектирования умной системы электроснабжения «Green Campus» (научно-техническая программа ЕС «Horizon 2020»).

Литература

1. Гулия Н.В. Инерционные аккумуляторы энергии. Воронеж: ВГУ, 1973. 240 с.
2. Bolund B., Bernhoff H., Leijon M. Flywheel energy and power storage systems // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2007. V. 11. N 2. P. 235–258.
3. Daoud M.I., Abdel-Khalik A.S., Massoud A., Ahmed S., Abbasy N.H. On the development of flywheel storage systems for power system applications: a survey // *Proc. 20th International Conference on Electrical Machines (ICEM 2012)*. Marseille, France, 2012. P. 2119–2125.
4. Kamf T. High speed flywheel design: using advanced composite materials. Uppsala universitet, 2012.
5. Schweitzer G., Maslen E.H. *Magnetic Bearings: Theory, Design, and Application to Rotating Machinery*. Springer, 2009. 600 p.
6. Schmid J. Leerlauf im luftleeren Raum? *Mechatronik Sonderheft Antriebstechnik*. 2013. P. 14–15.
7. Pyrhonen J., Jokinen T., Hrabovcova V. *Design of Rotating Electrical Machines*. John Wiley & Sons, 2009. 538 p.
8. Eckroad S. Flywheels for Electric Utility Energy Storage. Technical Report. Electric Power Research Institute, Palo Alto, CA, EPRI report TR-108889, 1999.
9. Arghandeh R., Pipattanasomporn M., Rahman S. Flywheel energy storage systems for ride-through applications in a facility microgrid // *IEEE Transactions on Smart Grid*. 2012. V. 3. N 4. P. 1955–1962.
10. Wu S., Cui S., Song L. Optimal design of the rotor of air-core compulsator // *Proc. 16th International Symposium on Electromagnetic Launch Technology, EML 2012*. Beijing, China, 2012. Art. N 6325021.
11. Roe G. Boeing flywheel energy storage technology [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.uaf.edu/files/acep/BoeingFlywheelOverview_06_20_2012.pdf, свободный. Яз. англ. (дата обращения 25.06.14).
12. Schainker R.B. Executive overview: energy storage options for a sustainable energy future // *IEEE Power Engineering Society General Meeting*. 2004. V. 2. P. 2309–2314.
13. Smith S.C., Sen P.K., Kroposki B. Advancement of energy storage devices and applications in electrical power system // *IEEE Power and Energy Society General Meeting: Conversion and Delivery of Electrical Energy in the 21st Century*. Pittsburgh, USA, 2008. Art. N 4596436.
14. Maxwell Technologies Ultracapacitors [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.maxwell.com/ultracapacitors, свободный. Яз. англ. (дата обращения 26.03.2014).
15. Ultra Capacitor [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.ultracapacitors.org свободный. Яз. англ. (дата обращения 26.03.2014).
16. Barton J.P., Infield D.G. Energy storage and its use with intermittent renewable energy // *IEEE Transactions on Energy Conversion*. 2004. V. 19. N 2. P. 441–448.
17. Leonard W., Grobe M. Sustainable electrical energy supply with wind and pumped storage – a realistic long-term strategy or utopia // *IEEE Power Engineering Society General Meeting*. 2004. V. 2. P. 1221–1225.

18. Schainker R.B., Nakhamkin M. Compressed air energy storage (CAES): overview, performance and cost data for 25 Mw to 220 Mw plants // IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems. 1985. V. PAS-104. N 4. P. 791–795.
19. Pena-Alzola R., Sebastian R., Quesada J., Colmenar A. Review of flywheel based energy storage systems // Proc. of International Conference on Power Engineering, Energy and Electrical Drives. Malaga, Spain, 2011. Art. N 6036455.
20. Yu Y., Wang Y., Sun F. The latest development of the motor/generator for the flywheel energy storage system // Proc. of International Conference on Mechatronic Science, Electric Engineering and Computer, MEC 2011. Jilin, China, 2011. P. 1228–1232.

<i>Соколов Максим Алексеевич</i>	– студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, maxisokolov@yandex.ru
<i>Томасов Валентин Сергеевич</i>	– кандидат технических наук, доцент, зав. кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, tomasov@ets.ifmo.ru
<i>Jastrzebski Rafal</i>	– кандидат технических наук, Лаппеенрантский технологический университет, Лаппеенранта, Финляндия, Rafal.Jastrzebski@lut.fi
<i>Maksim A. Sokolov</i>	– student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, maxisokolov@yandex.ru
<i>Valentin S. Tomasov</i>	– PhD, Associate professor, Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, tomasov@ets.ifmo.ru
<i>Rafal P. Jastrzebski</i>	– PhD, Academy Research Fellow, Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland, Rafal.Jastrzebski@lut.fi

Принято к печати 21.04.14
Accepted 21.04.14

УДК 532.529

МНОГОСЕТОЧНЫЙ МЕТОД УСКОРЕНИЯ СХОДИМОСТИ ПРИ РЕШЕНИИ
ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХК.Н. Волков^{a, b}^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия^b Университет Кингстона, Лондон, Великобритания, k.volkov@kingston.ac.uk

Аннотация. Разработан подход к эффективной реализации численных методов и вычислительных алгоритмов, предназначенных для моделирования течений невязкого и вязкого сжимаемого газа в областях сложной геометрической конфигурации. Развивается метод ускорения сходимости итерационного процесса, основанный на использовании многосеточных технологий решения систем разностных уравнений большой размерности. Уравнения Эйлера и Навье–Стокса дискретизируются на структурированных и неструктурированных сетках при помощи схем высокой разрешающей способности по времени и по пространству. Многосеточный метод реализуется на основе стандартного C/F разбиения переменных и метода стандартной интерполяции. Предложен подход, позволяющий преодолеть проблемы, связанные с хранением коэффициентов матрицы разных знаков. Возможности разработанных средств численного моделирования демонстрируются на примере задачи обтекания профиля. Приведены результаты расчетов течений невязкого и вязкого газа на структурированных и неструктурированных сетках при использовании различных составных компонентов многосеточной технологии. Сравнение скорости вычислений и факторов сходимости на структурированных и неструктурированных сетках показало экономичность разработанного подхода, а также слабую зависимость показателей качества от числа узлов сетки. Выбор оптимального числа внутренних итераций позволил сократить время счета на 10%. Результаты работы могут быть использованы при разработке вычислительных пакетов, предназначенных для решения задач газовой динамики в областях сложной формы.

Ключевые слова: вычислительная газовая динамика, неструктурированная сетка, многосеточный метод, сходимость, ускорение.

MULTI-GRID METHOD OF CONVERGENCE SPEEDING-UP FOR THE SOLUTION
OF GAS DYNAMICS PROBLEMS ON UNSTRUCTURED MESHESK.N. Volkov^{a, b}^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia^b Kingston University, London, United Kingdom, k.volkov@kingston.ac.uk

Abstract. An approach for effective implementation of numerical methods and computational algorithms is developed to simulate flows of non-viscous and viscous compressible gas in the complex domains. The convergence speeding-up method of iterative process is discussed based on the usage of multi-grid technologies to the solution of large systems of finite difference equations. Euler and Navier-Stokes equations are quantized on structured and unstructured meshes with high-resolution schemes in time and space. Multi-grid method is implemented on the basis of standard C/F splitting of variables and standard interpolation method. A specific approach is proposed to overcome the problems related to storing the matrix coefficients of different signs. A problem of flow around an airfoil is used to demonstrate the possibilities of computational tools developed. The results computed for non-viscous and viscous gas on structured and unstructured meshes are presented with the usage of various components of multi-grid technology. Comparison of computation speed and convergence factors on structured and unstructured meshes showed the economy of the developed approach and weak dependence of quality characteristics on the number of mesh points. The choice of optimal inner iterations number made it possible to decrease computation time for 10%. Obtained results can be applied while software creation for fluid dynamics problems in the complex configuration domains.

Keywords: computational fluid dynamics, unstructured mesh, multi-grid method, convergence, speeding-up.

Введение

Для расчетов течений жидкости и газа в областях сложной формы, характерных для современных технических устройств и технологических приложений, широкое применение находит метод конечных объемов на неструктурированных сетках. Расчеты течений жидкости и газа на неструктурированных сетках сталкиваются с рядом проблем, связанных с медленной скоростью сходимости итерационного процесса и существенными затратами процессорного времени, необходимого для получения сеточно-независимого и сходящегося решения.

Дискретизация уравнений Эйлера или Навье–Стокса порождает систему разностных уравнений с разреженной матрицей большого размера, которая решается тем или иным методом. При дискретизации уравнений на неструктурированных сетках матрица коэффициентов является несимметричной и не имеет диагонального преобладания. В этом случае классические итерационные методы либо перестают работать, либо приводят к медленной скорости сходимости [1, 2]. Проблемы, возникающие при численном

решении уравнений Эйлера и Навье–Стокса и приводящие к медленной сходимости, показаны на рис. 1. (символы E и NS соответствуют уравнениям Эйлера и уравнениям Навье–Стокса). При решении уравнений Эйлера дискретная жесткость является следствием использования скалярного шага по времени. Основным источником трудностей решения уравнений Навье–Стокса состоит в использовании сеток с растянутыми и скошенными ячейками в пограничном слое [3]. Дополнительные трудности возникают при моделировании турбулентных течений. Для улучшения сходимости используется матричный шаг по времени и метод направленного округления сетки [4, 5].

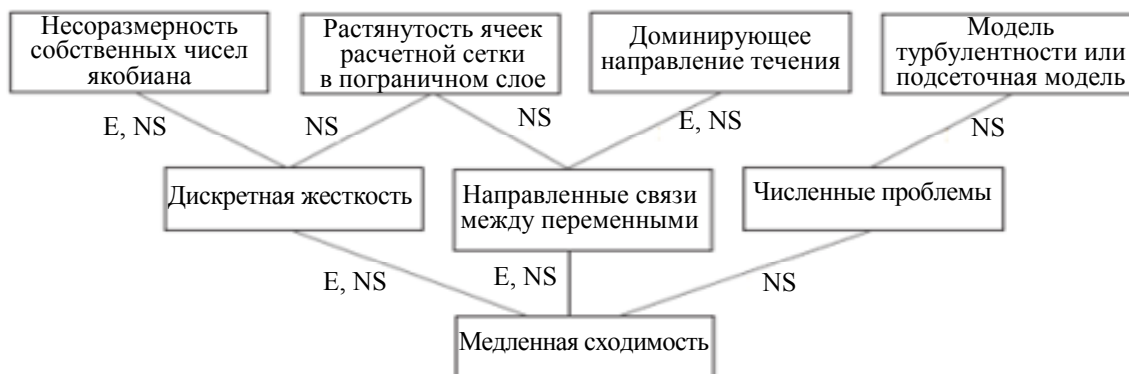


Рис. 1. Причины медленной сходимости итерационного процесса

Имеются два подхода к ускорению газодинамических расчетов, один из которых связан с ускорением сходимости [6, 7] (применение многосеточных технологий, методов предобусловливания и стабилизации численного решения), а другой – с использованием средств, предоставляемых современными параллельными системами обработки данных, включая графические процессоры общего назначения [8].

В настоящей работе обсуждается реализация и применение алгебраического многосеточного метода для решения задач газовой динамики, описываемых уравнениями Эйлера и Навье–Стокса. В отличие от геометрического подхода [5], реализация алгебраического многосеточного метода не требует информации о геометрии решаемой задачи, используя лишь структуру матрицы коэффициентов системы разностных уравнений.

В многосеточном методе обычный итерационный процесс комбинируется с коррекцией решения на последовательности грубых сеток. Одна итерация многосеточного метода (многосеточный цикл) включает в себя предварительное сглаживание (pre-smoothing); расчет невязки на текущем уровне сетки; ограничение и коррекцию невязки на грубой сетке; продолжение и интерполяцию ошибки на подробную сетку; коррекцию решения на подробной сетке с использованием поправки, интерполируемой с грубой сетки; заключительное сглаживание для погашения высокочастотных компонент погрешности, появляющихся после интерполяции на подробную сетку.

Многосеточный метод устанавливает лишь структуру вычислительного алгоритма, эффективность которого зависит от адаптации его отдельных компонентов к решаемой задаче [9]. Многообразие имеющихся подходов связывается с поиском компромисса между общей эффективностью алгоритма и объемом требуемой вычислительной работы. Имеющиеся реализации многосеточных методов различаются способом построения операторов ограничения и продолжения, выбором сглаживающей процедуры, реализацией многосеточного цикла, способом построения последовательности сеток. В отличие от имеющихся реализаций, в разработанном подходе используется метод, позволяющий преодолеть проблемы, связанные с наличием как положительных, так и отрицательных связей между переменными. Возможности подхода демонстрируются на примере расчета обтекания профиля на структурированных и неструктурированных сетках.

Реализация многосеточного метода

Конечно-объемная дискретизация уравнений Эйлера или Навье–Стокса на фиксированном сеточном уровне приводит к решению системы разностных уравнений

$$\mathbf{A}_h \mathbf{u}^h = \mathbf{f}^h. \quad (1)$$

Матрица \mathbf{A} размером $n \times n$ состоит из коэффициентов a_{ij} ($i, j=1, \dots, n$), связанных с дискретизацией. Вектор \mathbf{u} длиной n состоит из неизвестных узловых значений искомой функции. Вектор \mathbf{f} длиной n составлен из коэффициентов, обусловленных дискретизацией, а также из известных значений вектора решения, задаваемых граничными условиями.

Построение сеточных уровней. Вместо матрично-векторной терминологии используются термины, связанные с последовательностью фиктивных сеток, под узлами которых понимаются узлы направ-

ленного графа, соответствующего данной матрице. Узел сетки $i \in \Omega^h$ (имеет смысл переменной u_i^h) связан с переменной $j \in \Omega^h$, если $a_{ij}^h \neq 0$. Множество переменных, соседних с переменной i , имеет вид

$$N_i^h = \{j \in \Omega^h : j \neq i, a_{ij}^h \neq 0\} \quad (i \in \Omega^h).$$

Используя сеточную терминологию, уравнение $\mathbf{A}_h \mathbf{u}^h = \mathbf{f}^h$ можно рассматривать как фиктивное сеточное уравнение на подробной сетке Ω^h , а уравнение $\mathbf{A}_H \mathbf{u}^H = \mathbf{f}^H$ – как фиктивное сеточное уравнение на грубой сетке $\Omega^H \subset \Omega^h$. Под $\Omega^h = \{1, 2, \dots, n\}$ понимается множество индексов неизвестных. Множество Ω^H имеет меньшее число элементов и соответствует грубой сетке.

Переменные на грубом сеточном уровне строятся как некоторое подмножество переменных, принадлежащих подробной сетке [10–12]. Множество переменных подробной сетки разделяется на два несвязанных подмножества $\Omega^h = C^h \cup F^h$, где C^h – множество переменных, которые принадлежат грубой сетке (C -переменные), F^h – множество переменных, которые принадлежат подробной сетке (F -переменные).

Сеточному уровню Ω^k ($k = 1, 2, \dots, M-1$) соответствуют подмножества C^k и F^k . Каждому сеточному уровню соответствуют сеточные операторы $\mathbf{A}^1, \mathbf{A}^2, \dots, \mathbf{A}^M$ (при этом $\mathbf{A}^1 = \mathbf{A}$), а также операторы интерполяции $\mathbf{P}^k = \mathbf{I}_{k+1}^k$ и ограничения $\mathbf{R}^k = \mathbf{I}_k^{k+1}$, где $k = 1, 2, \dots, M-1$. Оператор ограничения представляет собой транспонированный оператор интерполяции $\mathbf{R}^k = (\mathbf{P}^k)'$ (под ' понимается операция транспонирования). Для построения матрицы системы на грубом сеточном уровне вычисляется произведение Галеркина $\mathbf{R}^k \mathbf{A}^k \mathbf{P}^k$. Сглаживание погрешности на каждом сеточном уровне производится при помощи сглаживающего оператора \mathbf{S}^k ($k = 1, 2, \dots, M-1$). Процесс огрубления повторяется до тех пор, пока размер системы не уменьшается до уровня, когда становится эффективным прямой метод ее решения (например, метод исключения Гаусса).

Для выбора матричных коэффициентов, используемых для построения грубого сеточного уровня, вводятся понятия сильного влияния переменных и сильной зависимости между переменными [11, 12]. Переменная i сильно зависит от переменной j , а переменная j имеет сильное влияние на переменную i , если матричный коэффициент a_{ij} по величине превосходит все внедиагональные коэффициенты матрицы (standard coarsening)

$$-a_{ij} > \theta \max_{k \neq i} (-a_{ik}). \quad (2)$$

Параметр $0 < \theta < 1$ в соотношении (2) контролирует число сильных связей между переменными (обычно $\theta = 0,25$). Множество S_i представляет собой множество всех переменных j , имеющих сильные связи с переменной i (множество переменных, от которых переменная i сильно зависит):

$$S_i = \left\{ j : j \neq i, -a_{ij} > \theta \max_{k \neq i} (-a_{ik}) \right\}.$$

Имеющиеся теоретические подходы относятся к решению скалярных эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных [13], дискретизация которых приводит к системе разностных уравнений с M -матрицей (в этом случае скорость сходимости метода не зависит от размера задачи). При наличии как отрицательных, так и положительных коэффициентов, стоящих вне главной диагонали, используются следующие определения:

$$a_{ij}^- = \begin{cases} a_{ij}, & \text{if } a_{ij} < 0, \\ 0, & \text{if } a_{ij} \geq 0, \end{cases} \quad a_{ij}^+ = \begin{cases} 0, & \text{if } a_{ij} \leq 0, \\ a_{ij}, & \text{if } a_{ij} > 0. \end{cases}$$

При этом имеется два несвязанных подмножества переменных

$$N_i^- = \{j \in N_i : a_{ij}^- < 0\}, \quad N_i^+ = \{j \in N_i : a_{ij}^+ > 0\}.$$

Наличие связей между переменными различного знака в уравнении (1) усложняет реализацию метода и приводит к замедлению сходимости.

Интерполяция на подробную сетку. Интерполяция погрешности решения $\mathbf{e}^h = \mathbf{I}_H^h \mathbf{e}^H$ определяется в виде

$$\mathbf{e}_i^h = \left(\mathbf{I}_H^h \mathbf{e}^H \right)_i = \begin{cases} e_i^H, & \text{if } i \in C^h, \\ \sum_{k \in P_i^h} w_{ik}^h e_k^H, & \text{if } i \in F^h, \end{cases} \quad (3)$$

где $P_i^h \subset C^h$ представляет собой множество переменных, участвующих в интерполяции. При интерполяции с грубой на подробную сетку погрешность решения e_i^h полагается равной e_i^H , если переменная i является C -переменной, и взвешенной сумме переменных из множества P_i^h , если переменная i принадлежит подмножеству F . Множество P_i^h является малым подмножеством множества C -переменных, находящихся в некоторой близости от переменной i , что гарантирует разреженность матрицы \mathbf{A}_H . С другой

стороны, множество P_i^h содержит достаточное число переменных, с которыми переменная i является сильно связанной.

Для простоты верхний индекс h опускается, а вместо (3) используется соотношение

$$e_i = \sum_{k \in P_i} w_{ik} e_k \quad (i \in F). \quad (4)$$

Локальное приближение для алгебраически гладкой погрешности решения имеет вид

$$e_i = -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j \in N_i} a_{ij} e_j \quad (i \in \Omega). \quad (5)$$

Реализация метода заключается в построении подходящего C/F разбиения, а также в определении множества интерполяционных переменных $P_i \subset C$ ($i \in F$) и весовых множителей w_{ik} таких, что соотношение (4) дает приемлемое приближение для любой алгебраически гладкой погрешности.

Точная процедура интерполяции дается соотношением (5), полагая $P_i = N_i$ и $w_{ik} = -a_{ik}/a_{ii}$. Подход требует построения такого C/F разбиения, что для каждой переменной $i \in F$ все переменные, соседние с переменной i , содержались бы в подмножестве C , и приводит к построению прямого метода решения системы разностных уравнений [11, 12]. Для построения эффективной вычислительной процедуры требуется построение малых подмножеств P_i , чтобы обеспечить разреженность оператора Галеркина и достичь высокой скорости сходимости.

Для прямой интерполяции (direct interpolation) $P_i \subset N_i$, а оператор интерполяции строится из соотношения (5) при известном подмножестве переменных, не участвующих в интерполяции (часть суммы, соответствующая алгебраически гладкой ошибке, для которой $j \in N_i \setminus P_i$).

Для матриц общего вида используются коэффициенты a_{ij}^+ и a_{ij}^- и подмножества N_i^+ и N_i^- , а положительные коэффициенты добавляются к коэффициентам, стоящим на главной диагонали. Процедура интерполяции определяется соотношением

$$\tilde{a}_{ii} e_i + \alpha_i \sum_{k \in P_i} a_{ik}^- e_k = 0, \quad (6)$$

где

$$\tilde{a}_{ii} = a_{ii} + \sum_{j \in N_i} a_{ij}^+, \quad \alpha_i = \frac{\sum_{j \in N_i} a_{ij}^-}{\sum_{k \in P_i} a_{ik}^-}.$$

Такой подход приводит к положительным весовым коэффициентам

$$w_{ik} = -\alpha_i \frac{a_{ik}^-}{\tilde{a}_{ii}} \quad (i \in F, k \in P_i).$$

В общем случае при построении процедуры интерполяции учет положительных связей в соотношении (6) оказывается более важным, чем учет отрицательных связей [11, 12] (для положительных связей погрешность решения изменяется наиболее медленно). Для некоторой переменной $i \in F$, имеющей как отрицательные, так и положительные связи, предполагается, что $N_i^- \neq \emptyset$ и $N_i^+ \neq \emptyset$, а C/F разбиение является таким, что как минимум одна связь любого знака принадлежит подмножеству C . Выбираются два множества интерполяционных переменных таких, что $\emptyset = P_i^- \subset C \cap N_i^-$ и $\emptyset = P_i^+ \subset C \cap N_i^+$.

Для улучшения процедуры интерполяции предполагается, что имеется такое C/F разбиение, при котором для каждой переменной $i \in F$ множество интерполяционных переменных $P_i \subset N_i \cap N_i^+$ является данным. Вместо непосредственного приближения неинтерполяционной части уравнения для переменной i в соотношении (5), производится исключение погрешностей решения e_j для всех переменных $j \notin P_i$, имеющих сильные связи с переменной i в уравнении j . Стандартная интерполяция (standard interpolation) приводит к расширению множества интерполяционных переменных (уменьшение разреженности оператора Галеркина), но оказывается достаточно эффективной на практике.

Сглаживание. Применение сглаживающей процедуры общего вида дает

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{S} \mathbf{u}_n + (\mathbf{I} - \mathbf{S}) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{f}. \quad (7)$$

В качестве сглаживающего оператора выбирается матрица $\mathbf{S} = \mathbf{I} - \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A}$, где \mathbf{Q} – нижняя треугольная часть матрицы \mathbf{A} . В качестве сглаживающей процедуры в соотношении (7) широкое применение находит метод Гаусса–Зейделя.

Показатели эффективности. Сходимость многосеточного метода зависит от изменения нормы погрешности решения

$$\|\mathbf{e}^k\|_{A_h} = (\mathbf{A}_h \mathbf{e}^k, \mathbf{e}^k)^{1/2}.$$

Скорость сходимости характеризуется уменьшением нормы невязки на двух соседних циклах $\rho = \|\mathbf{r}^{k+1}\|/\|\mathbf{r}^k\|$. Фактор сходимости получается при помощи осреднения скорости сходимости по всем многосеточным циклам (при достижении заданного уровня невязки) или при помощи осреднения по заданному числу циклов, если заданный уровень невязки в расчетах не достигается. Фактор асимптотической сходимости рассчитывается по отношению к норме невязки на первом многосеточном цикле.

Фактор сложности выражается в виде числа операций, которые необходимо выполнить на одной итерации, и требуемой для этого памяти. Операторная сложность (operator complexity) служит индикатором памяти, требуемой для реализации многосеточного метода

$$C_o = \sum_k \frac{|\mathbf{A}^{(k)}|}{|\mathbf{A}^{(1)}|},$$

где $|\mathbf{A}^{(k)}|$ – число ненулевых коэффициентов на уровне k .

Фактор сложности сетки (grid complexity) показывает, насколько быстро производится огрубление сетки:

$$C_G = \sum_k \frac{n_k}{n_1},$$

где n_k – число переменных (узлов сетки) на уровне k .

Сложность многосеточного цикла (cycle complexity) характеризуется параметром

$$C_c = \sum_k \frac{|\mathbf{A}^{(k)}|}{|\mathbf{A}^{(1)}|} \mu_k \gamma^k,$$

где $\mu_k = \mu_1 + \mu_2$. Параметр γ соответствует типу многосеточного цикла ($\gamma = 1$ для V-цикла и $\gamma = 2$ для W-цикла). Объединение фактора сходимости и сложности многосеточного цикла дает объем вычислительной работы, приходящейся на единицу точности, $C_w = -C_c/\log \rho$.

Результаты расчетов

Рассмотрим невязкое и вязкое обтекание профиля NACA0012 при числе Маха невозмущенного потока $M_\infty = 0,8$ и при различных углах атаки ($\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 1,25^\circ$). Расчетная область приводится на рис. 2. На входной границе задаются условия невозмущенного течения, а на выходной границе – условия свободного вытекания. На верхней и нижней границах расчетной области используются условия скольжения. При этом $R = 10C$, $H = 10C$ и $L = 30C$, где C – хорда профиля.

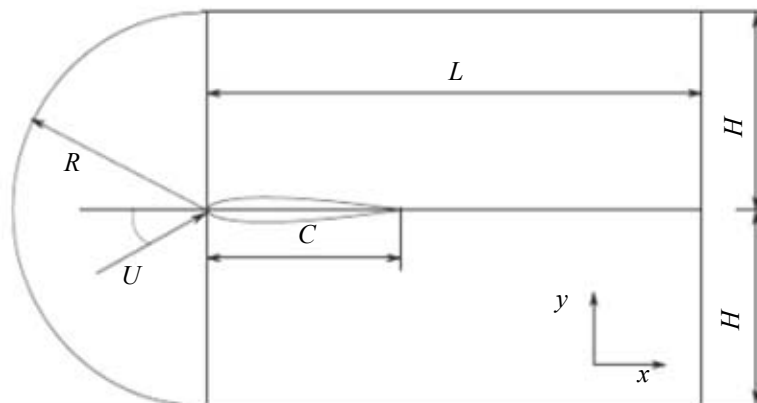


Рис. 2. Расчетная область

Многосеточная процедура реализуется в рамках V-цикла ($\mu_1 = 2$ и $\mu_2 = 1$). Для интегрирования по времени используется трех- (RK3) и пятишаговый (RK5) метод Рунге–Кутты, а для дискретизации невязких и вязких потоков – схема MUSCL и центрированная разностная схема. Детали конечно-объемной дискретизации обсуждаются в работе [14]. Для построения C/F разбиения применяется метод стандартного огрубления. В качестве интерполяции используется метод стандартной интерполяции, а для сглаживания – метод Гаусса–Зейделя. Для вычисления произведения Галеркина, хранения разреженных матриц и реализации операций матричной алгебры используется формат ELLPACK.

Расчеты проводятся как на структурированной сетке (вариант 1, сетка типа O), так и на неструктурированной сетке с треугольными ячейками (вариант 2) различной разрешающей способности. Расчетные сетки приводятся на рис. 3 (показана часть расчетной области). При решении вязкой задачи узлы сетки сгущаются около поверхности профиля для надлежащего разрешения пограничного слоя. Максимальное отношение сторон ячеек сетки составляет 500.

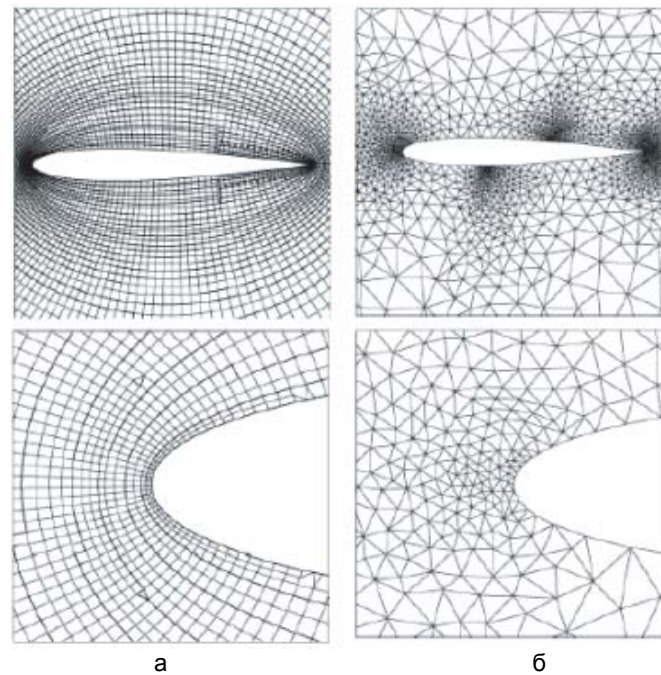


Рис. 3. Структурированная (а, вариант 1) и неструктурированная (б, вариант 2) сетки

Для невязкой задачи распределения коэффициента давления по поверхности профиля показаны на рис. 4 и имеют практически одинаковый вид как на структурированной, так и на неструктурированной сетках. Решение дает сильный скачок на верхней поверхности профиля (при $x/L = 0,68$) и слабый скачок на его нижней поверхности (при $x/L = 0,32$). Для условий задачи интегрирование давления по поверхности профиля дает коэффициенты трения и подъемной силы ($C_x = 0,0227$ и $C_y = 0,3527$), хорошо согласующиеся с данными [15].

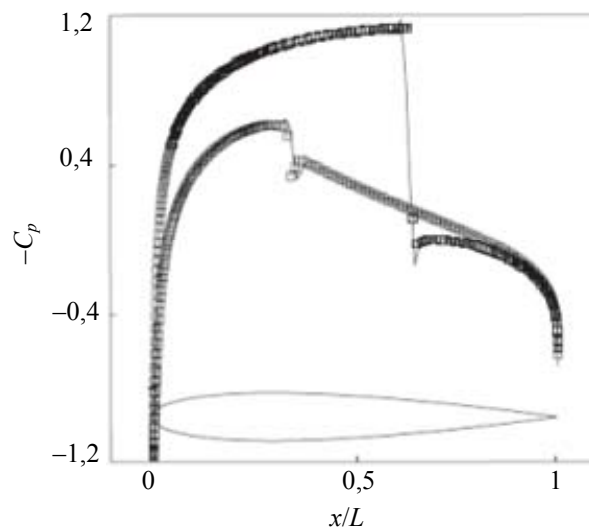


Рис. 4. Распределения коэффициента давления по поверхности профиля, полученные на структурированной (сплошная линия) и неструктурированной (значки \square) сетках

История сходимости на структурированной и неструктурированной сетках показана на рис. 5. В отличие от осциллирующей сходимости на структурированной сетке, решение задачи на неструктурированной сетке дает гладкое изменение невязки. Уровень сходимости (минимальный уровень невязки) примерно одинаковый в обоих случаях.

Информация о сходимости многосеточной процедуры приводится в табл. 1. Качество огрубления сетки характеризуется параметрами, представляющими собой общее число ячеек и узлов сеток различной разрешающей способности (параметры C_{Gv} и C_{Gc}). Зависимость скорости сходимости от разрешения сетки относительно слаба.

Моделирование вязкого обтекания профиля проводится при числе Рейнольдса $Re=500$ (число Рейнольдса рассчитывается по хорде профиля). Решение вязкой задачи дает распределение коэффициента давления по поверхности профиля, слабо отличающееся от решения, показанного на рис. 4. Коэффициенты

сопротивления и подъемной силы принимают значения $C_x = 0,0225$ и $C_y = 0,3536$. Относительное различие результатов решения невязкой и вязкой задачи составляет 0,88% для коэффициента сопротивления и 0,26% для коэффициента подъемной силы. Информация о сходимости многосеточной процедуры приводится в табл. 2. Скорость сходимости при нулевом угле атаки оказывается лучше, чем при угле атаки $\alpha = 1,25^\circ$.

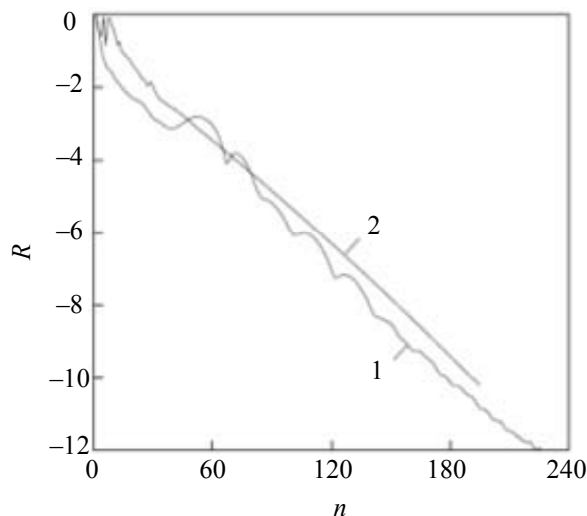


Рис. 5. Изменение невязки в зависимости от числа многосеточных циклов на структурированной (линия 1) и на неструктурированной (линия 2) сетках

Размер	Число уровней	C_{Gv}	C_{Gc}	ρ при $\alpha=0^\circ$		ρ при $\alpha=1,25^\circ$	
				RK3	RK5	RK3	RK5
2607	2	1,58	1,34	0,24	0,18	0,28	0,18
5258	3	1,64	1,36	0,34	0,24	0,25	0,17
10273	4	1,67	1,36	0,25	0,24	0,24	0,17
20621	5	1,64	1,36	0,34	0,21	0,23	0,21

Таблица 1. Фактор сходимости при решении уравнений Эйлера

Размер	Число уровней	C_{Gv}	C_{Gc}	ρ при $\alpha = 0^\circ$		ρ при $\alpha = 1,25^\circ$	
				RK3	RK5	RK3	RK5
8872	2	1,64	1,37	0,42	0,37	0,26	0,21
18416	3	1,88	1,44	0,43	0,37	0,61	0,57
36388	4	1,67	1,37	0,41	0,35	0,52	0,45

Таблица 2. Фактор сходимости при решении уравнений Навье–Стокса

На подробной сетке применение алгебраического многосеточного метода дает фактор сходимости, равный 0,55 для уравнений Эйлера и 0,81 для уравнений Навье–Стокса. Для геометрического многосеточного метода, реализованного в работе [5], асимптотический фактор сходимости составляет 0,80 для уравнений Эйлера и 0,91 для уравнений Навье–Стокса.

В большинстве реализаций полагается, что $\theta = 0,25$, а числу уровней сетки присваивается максимальное возможное значение [10, 16]. На практике коэффициент θ изменяется в достаточно широких пределах (обычно от 0,2 до 0,4). Значение $\theta = 0,25$ соответствует интерполяции по четырем точкам на подробной сетке (в геометрическом методе этому значению соответствует увеличение шага сетки в два раза при переходе от подробной сетки к грубой). Изменение параметра θ от 0,2 до 0,4 дает максимальное увеличение времени счета на 7,5% на структурированной сетке. Оптимальным значением на неструктурированной сетке является 0,0625. Выбор оптимального числа внутренних итераций позволяет сократить время счета на 10% в зависимости от граничных условий задачи.

Заключение

Предложен подход к эффективной реализации многосеточной процедуры на неструктурированных сетках. К особенностям реализации относятся подход, связанный с хранением положительных и отрицательных связей между переменными, а также реализация операций с разреженными матрицами в формате ELLPACK. Полученные результаты показывают, что применительно к решению задач механики жидкости алгебраический многосеточный метод позволяет ускорить сходимость итерационного процесса, требуя сравнительно небольших модификаций программного кода. Алгебраический многосеточный метод

оказывается чувствительным к изменению сетки и ее разрешению на самом грубом сеточном уровне. Оценки показывают, что выбор параметров в алгебраическом многосеточном методе позволяет сократить общее время счета на 10%. Подходящий выбор операторов продолжения и ограничения позволяет сгладить высокочастотные моды погрешности решения при переходе к более грубому сеточному уровню. Учет сильных связей между переменными в процедуре интерполяции приводит к ускорению сходимости, в то время как слабые связи оказывают негативное влияние на сходимость, увеличивая объем вычислительной работы. Зависимость подхода от свойств сглаживающей процедуры сравнительно слаба.

В отличие от геометрического подхода, алгебраический метод допускает сравнительно простую программную реализацию в рамках существующего программного кода. Дополнительной реализации и модификации требуют структуры данных, предназначенные для хранения разреженных матриц, а также реализация операций матричной алгебры с разреженными матрицами. Вместе с тем, метод построения последовательности сеток и его адаптация к решаемой задаче (невязкая/вязкая, ламинарная/турбулентная) во многом определяют успех применения многосеточной технологии ускорения сходимости.

Литература

1. Brandt A. Guide to multigrid development // Lecture Notes in Mathematics. 1982. V. 960. P. 220–312.
2. Wesseling P. An introduction to multigrid methods. Chichester: John Wiley & Sons, 1992. 152 p.
3. Pierce N.A., Giles M.B., Jameson A., Martinelli L. Accelerating three-dimensional Navier-Stokes calculations // Proc. 13th Computational Fluid Dynamics Conference. 1997. P. 676–698.
4. Волков К.Н. Блочное предобуславливание уравнений Эйлера и Навье-Стокса при моделировании низкоскоростных течений на неструктурированных сетках // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2009. Т. 49. № 10. С. 1868–1884.
5. Волков К.Н. Многосеточные технологии для решения задач газовой динамики на неструктурированных сетках // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2010. Т. 50. № 11. С. 1938–1952.
6. Cagnone J.S., Sermeus K., Nadarajah S.K., Laurendeau E. Implicit multigrid schemes for challenging aerodynamic simulations on block-structured grids // Computers and Fluids. 2011. V. 44. N 1. P. 314–327.
7. Colin Y., Deniau H., Boussuge J.-F. A robust low speed preconditioning formulation for viscous flow computations // Computers and Fluids. 2011. V. 47. N 1. P. 1–15.
8. Brodtkorb A.R., Hagen T.R., Satra M.L. Graphics processing unit (GPU) programming strategies and trends in GPU computing // Journal of Parallel and Distributed Computing. 2013. V. 73. N 1. P. 4–13.
9. Cleary A.J., Falgout R.D., Henson V.E., Jones J.E., Manteuffel T.A., McCormick S.F., Miranda G.N., Ruge J.W. Robustness and scalability of algebraic multigrid // SIAM Journal on Scientific Computing. 2000. V. 21. N 5. P. 1886–1908.
10. Ruge J., Stuben K. Algebraic multigrid (AMG) / In: Multigrid Methods (Frontiers in Applied Mathematics) / Ed. S.F. McCormick. Philadelphia: SIAM, 1987. V. 3. P. 73–130.
11. Stuben K. A review of algebraic multigrid // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2001. V. 128. N 1–2. P. 281–309.
12. Stuben K. An introduction to algebraic multigrid. In: Multigrid / Ed. U. Trottenberg, C. Oosterlee, A. Schuller. London: Academic Press, 2001. P. 413–532.
13. Yang U.M. Parallel algebraic multigrid methods – high performance preconditioners // Lecture Notes in Computational Science and Engineering. 2006. V. 51. P. 209–236.
14. Волков К.Н. Дискретизация уравнений Навье-Стокса на неструктурированной сетке при помощи метода контрольного объема и разностных схем повышенной разрешающей способности // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. Т. 48. № 7. С. 1250–1273.
15. AGARD-AR-211: Test cases for inviscid flow field methods // Advisory Reports. 1986.
16. Suero R., Pinto M.A.V., Marchi C.H., Araki L.K., Alves A.C. Analysis of algebraic multigrid parameters for two-dimensional steady-state heat diffusion equations // Applied Mathematical Modelling. 2012. V. 36. N 7. P. 2996–3006.

- Волков Константин Николаевич** – доктор физико-математических наук, научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; старший лектор, Университет Кингстона, Лондон, Великобритания, k.volkov@kingston.ac.uk
- Konstantin N. Volkov** – D.Sc, scientific researcher, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; Senior Lecturer, Kingston University, London, United Kingdom, k.volkov@kingston.ac.uk

Принято к печати 15.05.14
Accepted 15.05.14

УДК 517.984.7

РАСШИРЕНИЕ ТЕНЗОРНОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ НА ПРИМЕРЕ ОПЕРАТОРА ДИРАКА

А.А. Бойцев^а, Х. Нейдхардт^б, И.Ю. Попов^а

^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, boitsevanton@gmail.com

^б Weierstrass Institute for applied analysis and stochastics, Берлин, Германия

Аннотация. Рассмотрен способ расширения оператора, представляющего сумму тензорных произведений. Применен подход граничных троек. Один из операторов предполагается плотно заданным симметрическим оператором с равными индексами дефекта, а второй – ограниченным и самосопряженным. Для построения самосопряженных расширений рассматриваемого оператора строится граничная тройка, берущая за основу граничную тройку симметрического оператора. По граничной тройке симметрического оператора строятся гамма-поле и функция Вейля. Выражения, связывающие гамма-поле и функцию Вейля симметрического оператора с гамма-полем и функцией Вейля рассматриваемого оператора, позволяют использовать обобщенную резольвентную формулу Крейна для получения всех самосопряженных расширений и в данном случае. Теоретические результаты применяются к конкретному, с физической точки важному оператору – оператору Дирака. Для оператора Дирака построена граничная тройка, а также отвечающие ей гамма-поле и функция Вейля. С помощью формулы Крейна получены самосопряженные расширения. Полученные результаты могут быть использованы для корректного описания взаимодействия квантовых систем.

Ключевые слова: метод граничных троек, оператор Дирака, самосопряженные расширения.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01), при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект 14.Z50.31.0031), а также при поддержке грантов Президента Российской Федерации (контракты 14.124.13.2045-МК и 14.124.13.1493-МК).

EXTENSION OF TENSOR PRODUCT FOR OPERATORS ON THE DIRAC OPERATOR EXAMPLE

A.A. Boitsev^a, H. Neidhardt^b, I.Yu. Popov^a

^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia, boitsevanton@gmail.com

^b Weierstrass Institute for Applied Analysis and Stochastics, Berlin, Germany

The paper deals with extension method for the operator which is a sum of tensor products. Boundary triplets approach is used. One of the operators is considered to be densely defined and symmetric with equal deficiency indices, the other one is considered to be bounded and self-adjoint. For self-adjoint extensions construction of the mentioned operator, its boundary triplet is constructed in terms of boundary triplet of symmetric operator. Gamma-field and the Weyl function are obtained using the boundary triplet of symmetric operator. Formulas, connecting gamma-field and the Weyl function of symmetric operator with gamma-field and the Weyl function of the studied operator make it possible to use generic resolvent Krein-type formula for all self-adjoint extensions in this case as well. Theoretical results are applied to the Dirac operator, interesting from the physical point of view. Boundary triplet, gamma-field and the Weyl function are constructed for the Dirac operator. The self-adjoint extensions are obtained by Krein formula. Received results can be useful for correct description of quantum systems interaction.

Keywords: boundary triplets approach, Dirac operator, self-adjoint extensions.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation (grant 074-U01), the Russian Ministry of Education and Science (project 14.Z50.31.0031) and the RF President Grants (contracts 14.124.13.2045-МК and 14.124.13.1493-МК).

Введение

Операторы, представляющие из себя сумму тензорных произведений, часто возникают в вопросах квантовой механики. Исследование спектральных свойств самосопряженных операторов (наблюдаемых) является ключевым в описании поведения квантовой системы. Фундаментальное отличие квантовой физики от классической проявляется в наличии взаимодействия между частями сложной системы. К настоящему времени представлено много физических моделей взаимодействия, но все они работают с приближениями. До сих пор нет корректного математического описания взаимодействия подсистем.

В то же время в работах М. Крейна и Н. Наймарка [1, 2] описываются фундаментальная теория расширения симметрических операторов и теория обобщенных резольвент. С точки зрения физики, расширение симметрического оператора дает параметризованный набор самосопряженных операторов, из которого при правильном выборе параметров можно получить оператор, корректно описывающий взаимодействие систем.

Цель настоящей работы – получить взаимодействие между квантовыми системами, используя теорию расширений и метод граничных троек [3–14]. Мы будем рассматривать оператор S , имеющий вид $S = A \otimes I_T + I_A \otimes T$, где A – плотно заданный симметрический оператор в гильбертовом пространстве \mathcal{H}_A , а T – ограниченный и самосопряженный оператор. Результаты для такого типа операторов получены в

работе [15], мы продемонстрируем применение ранее полученных результатов на примере оператора Дирака с граничным условием вида $f(0) = 0$:

$$S = -ic \frac{d}{dx} \otimes I_T + I_A \otimes \begin{pmatrix} \frac{c^2}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{c^2}{2} \end{pmatrix},$$

$$f(0) = 0.$$

Линейные отношения

Линейное отношение Θ в \mathcal{H} – это замкнутое линейное подпространство $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$. Множество всех линейных отношений в \mathcal{H} обозначим $\tilde{C}(\mathcal{H})$. За $C(\mathcal{H})$ обозначим множество всех замкнутых (не обязательно плотно заданных) операторов в \mathcal{H} . Сопоставляя каждому оператору $T \in C(\mathcal{H})$ его график $\text{gr}(T)$, мы получим, что $C(\mathcal{H})$ является подпространством $\tilde{C}(\mathcal{H})$.

Необходимость рассмотрения множества $\tilde{C}(\mathcal{H})$ в теории операторов мотивируется следующими соображениями: в отличие от множества $C(\mathcal{H})$, множество $\tilde{C}(\mathcal{H})$ замкнуто по отношению к взятию сопряженного и обратного отношений Θ^* и Θ^{-1} , которые определяются следующими соотношениями:

$$\Theta^* = \left\{ \begin{pmatrix} k \\ k' \end{pmatrix} : (h', k) = (h, k'), \forall \begin{pmatrix} h \\ h' \end{pmatrix} \in \Theta \right\} \text{ и } \Theta^{-1} \{ \{g, f\} : \{f, g\} \in \Theta \}.$$

Линейное отношение Θ называется симметрическим, если $\Theta \subset \Theta^*$, и самосопряженным, если $\Theta = \Theta^*$.

Граничные тройки

Мы напомним некоторые основные факты, относящиеся к граничным тройкам. Пусть S – плотно заданный симметрический оператор с равными индексами дефекта $n_{\pm}(S) = \dim(R_{\pm i})$, где $R_z = \ker(S^* - z)$, $z \in C_{\pm}$, действующий на сепарабельном гильбертовом пространстве \mathcal{H} .

Определение 1 [7]. Замкнутое расширение \tilde{S} оператора S называется правильным, если $\text{dom}(S) \subset \text{dom}(\tilde{S}) \subset \text{dom}(S^*)$. Два правильных расширения \tilde{S}' и \tilde{S} называются дизъюнктными, если $\text{dom}(\tilde{S}') \cap \text{dom}(\tilde{S}) = \text{dom}(S)$, а к тому же трансверсальными, если $\text{dom}(\tilde{S}') + \text{dom}(\tilde{S}) = \text{dom}(S^*)$.

Обозначим множество всех правильных расширений S , пополненное остальными расширениями S и S^* , как Ext_S . Любое самосопряженное или максимальное диссипативное (аккумулятивное) расширение является правильным.

Определение 2 [7]. Тройка $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$, где \mathcal{H} – вспомогательное гильбертово пространство, $\Gamma_0, \Gamma_1 : \text{dom}(S^*) \rightarrow \mathcal{H}$ – линейные отображения, называется граничной тройкой оператора S^* , если выполнено соотношение

$$(S^* f, g) - (f, S^* g) = (\Gamma_1 f, \Gamma_0 g) - (\Gamma_0 f, \Gamma_1 g), \quad f, g \in \text{dom}(S^*), \quad (1)$$

и отображение $\Gamma = (\Gamma_0, \Gamma_1)^T : \text{dom}(S^*) \rightarrow \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ сюръективно.

Граничная тройка $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$ для оператора S^* всегда существует, если $n_+(S) = n_-(S)$. Также стоит заметить, что $n_{\pm}(S) = \dim(\mathcal{H})$ и $\ker(\Gamma_0) \cap \ker(\Gamma_1) = \text{dom}(S)$.

С каждой граничной тройкой Π сопоставляют два канонических самосопряженных расширения $S_j = S^*|_{\ker(\Gamma_j)}$, $j \in \{0, 1\}$. Для любого расширения $S_0 = S_0^* \in \text{Ext}_S$ найдется (вообще говоря, не единственная) граничная тройка $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$ оператора S^* такая, что $S_0 = S^*|_{\ker(\Gamma_0)}$.

С помощью подхода граничных троек мы можем параметризовать все правильные расширения следующим образом.

Теорема 1 [5, 8]. Пусть $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$ – граничная тройка для оператора S^* . Тогда отображение

$$Ext_S \ni \tilde{S} \rightarrow \Gamma \text{dom}(\tilde{S}) = (\Gamma_0 f, \Gamma_1 g)^T : f \in \text{dom}(\tilde{S}) = \Theta \in \tilde{C}(\mathcal{H}) \quad (2)$$

устанавливает биекцию между Ext_S и $\tilde{C}(\mathcal{H})$. Мы пишем $\tilde{S} = S_\Theta$, если \tilde{S} отвечает Θ по биекции (2). Кроме того, верны следующие предложения:

1. $S_\Theta^* = S_{\Theta^*}$, кроме того, $S_\Theta^* = S_\Theta$ в том и только том случае, когда $\Theta = \Theta^*$.
2. S_Θ является симметрическим (самосопряженным) в том и только том случае, когда Θ – симметрическое (самосопряженное) отношение.
3. Расширения S_0 и S_Θ дизъюнкты (трансверсальны) в том и только том случае, если найдется замкнутый (ограниченный) оператор B такой, что $\Theta = \text{gr}(B)$. В таком случае биекция принимает вид $S_\Theta = S_{\text{gr}(B)} = S^* \upharpoonright \ker(\Gamma_1 - B\Gamma_0)$.

В частности, $S_j = S^* \upharpoonright \ker(\Gamma_j) = S_{\Theta_j}$, $j \in \{0, 1\}$, где $\Theta_0 = \{0\} \times \mathcal{H}$ и $\Theta_1 = \mathcal{H} \times \{0\} = \text{gr}(O)$, где O – нулевой оператор в \mathcal{H} . Также стоит отметить, что $\tilde{C}(\mathcal{H})$ содержит тривиальные линейные соотношения $\{0\} \times \{0\}$ и $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, которые параметризуют расширения S и S^* соответственно для любой граничной тройки Π .

Гамма-поле, функция Вейля и формула Крейна

Напомним некоторые факты, касающиеся гамма-поля и функции Вейля.

Определение 3 [4, 5]. Пусть $\Pi = \{\mathcal{H}, \Gamma_0, \Gamma_1\}$ – граничная тройка для оператора S^* и $S_0 = S^* \upharpoonright \ker(\Gamma_0)$. Операторнозначные функции $\gamma(\cdot) : \rho(S_0) \rightarrow [\mathcal{H}, \mathcal{H}]$ и $M(\cdot) : \rho(S_0) \rightarrow [\mathcal{H}]$, определяемые соотношениями $\gamma(z) = (\Gamma_0 \upharpoonright R_z)^{-1}$, $M(z) = \Gamma_1 \gamma(z)$, $z \in \rho(S_0)$, называются гамма-полем и функцией Вейля, отвечающими граничной тройке Π , соответственно.

Очевидно, что функция Вейля может быть определена и другим образом, как $M(z)\Gamma_0 f_z = \Gamma_1 f_z$, $f_z \in R_z$, $z \in \rho(S_0)$.

Также следует заметить, что гамма-поле и функция Вейля голоморфны на $z \in \rho(S_0)$.

Для любого правильного (не обязательно самосопряженного) расширения $\tilde{S}_\Theta \in Ext_S$ с непустым резольветным множеством $\rho(\tilde{S}_\Theta)$ имеет место следующая формула Крейна [4, 5]:

$$(S_\Theta - z)^{-1} - (S_0 - z)^{-1} = \gamma(z)(\Theta - M(z))^{-1} \gamma^*(\bar{z}), \quad z \in \rho(S_0) \cap \rho(S_\Theta). \quad (3)$$

Данная формула расширяет стандартную формулу Крейна, которая справедлива для канонических расширений, на любые $\tilde{S}_\Theta \in Ext_S$ с $\rho(\tilde{S}_\Theta) \neq \emptyset$. Кроме того, ввиду определения гамма-поля и функции Вейля, данная формула имеет прямую связь с граничными тройками.

Ранее полученные результаты

Пусть A – плотно заданный симметрический оператор на сепарабельном гильбертовом пространстве H_A , а T – ограниченный самосопряженный оператор, заданный на сепарабельном гильбертовом пространстве \mathcal{H}_T . Рассматривается оператор $S = A \otimes I_T + I_A \otimes T$. Данный оператор определяется как замыкание оператора $A \odot I_T + I_A \odot T$ так, что

$$\text{dom}(A \odot I_T + I_A \odot T) = \left\{ f = \sum_{k=1}^n g_k \otimes h_k : g_k \in \text{dom}(A), h_k \in \mathcal{H}_T \right\}$$

и

$$(A \odot I_T + I_A \odot T)f = \sum_{k=1}^n (A g_k \otimes h_k + g_k \otimes T h_k), \quad f \in \text{dom}(A \odot I_T + I_A \odot T).$$

Оператор S оказывается замкнутым симметрическим оператором [9].

Теорема 2 [15]. Если $\Pi_A = \{\mathcal{H}_A, \Gamma_0^A, \Gamma_1^A\}$ – граничная тройка оператора A^* , тогда $\Pi_S = \{\mathcal{H}, \Gamma_0^S, \Gamma_1^S\}$ – граничная тройка для оператора S^* , где

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_T, \quad \Gamma_0^S = \Gamma_0^A \otimes I, \quad \Gamma_1^S = \Gamma_1^A \otimes I.$$

Для гамма-поля и функции Вейля верны следующие результаты.

Теорема 3 [15]. Пусть $\Pi_A = \{\mathcal{H}_A, \Gamma_0^A, \Gamma_1^A\}$ – граничная тройка оператора A^* с гамма-полем $\gamma_A(z)$. Если $\Pi_S = \{\mathcal{H}, \Gamma_0^S, \Gamma_1^S\}$ – граничная тройка для оператора S^* , то гамма-поле $\gamma_S(z)$, отвечающее граничной тройке Π_S допускает представление

$$\gamma_S(z) = \int_a^b d\widehat{E}_T(\lambda) \gamma_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} = \int_a^b \gamma_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} d\widehat{E}_T(\lambda),$$

где $z \in \mathbb{C}_\pm$, $\sigma(T) \subset [a, b)$.

Теорема 4 [15]. Пусть $\Pi_A = \{\mathcal{H}_A, \Gamma_0^A, \Gamma_1^A\}$ – граничная тройка оператора A^* с функцией Вейля $M_A(z)$. Если $\Pi_S = \{\mathcal{H}, \Gamma_0^S, \Gamma_1^S\}$ – граничная тройка для оператора S^* , то функция Вейля $M_S(z)$, отвечающая граничной тройке Π_S , допускает представление

$$M_S(z) = \int_a^b d\widehat{E}_T(\lambda) M_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} = \int_a^b M_A(z-\lambda) \otimes I_{\mathcal{H}_T} d\widehat{E}_T(\lambda),$$

где $z \in \mathbb{C}_\pm$, $\sigma(T) \subset [a, b)$.

Расширение оператора Дирака

Рассмотрим оператор Дирака

$$S = -ic \frac{d}{dx} \otimes I_T + I_A \otimes \begin{pmatrix} \frac{c^2}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{c^2}{2} \end{pmatrix},$$

заданный на $\mathcal{H}_S = L_2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$. Симметрическое сужение данного оператора может быть получено сужением оператора $-i \frac{d}{dx}$, а именно условием на область определения $f(0) = 0$. Пользуясь приведенными выше результатами (теоремы 2–4), получим граничную тройку Π_S , гамма-поле и функцию Вейля для оператора S^* . Для этого сначала построим граничную тройку Π_A . Интегрируя по частям, имеем:

$$(A^* f, g) - (f, A^* g) = ic(f(0+) \bar{g}(0+) - f(0-) \bar{g}(0-)).$$

Легко проверить, что операторы

$$\Gamma_0^A f = -i\sqrt{2c} \frac{f(0-) - f(0+)}{2}, \quad \Gamma_1^A = -\sqrt{2c} \frac{f(0-) + f(0+)}{2}$$

являются сюръективными и удовлетворяют соотношению (1).

Тем самым, на основании теоремы 2, граничная тройка Π_S запишется соотношениями $\Gamma_0^S = \Gamma_0^A \otimes I$, $\Gamma_1^S = \Gamma_1^A \otimes I$. Чтобы вычислить гамма-поле, необходимо построить дефектные элементы оператора A , имеющего индексы дефекта (1, 1). Его можно записать следующим образом:

1. Если $\text{Im}(z) > 0$, то

$$f_+(x) = \begin{cases} e^{\frac{ix}{c}}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}.$$

2. Если $\text{Im}(z) < 0$, то

$$f_-(x) = \begin{cases} 0, & x \geq 0 \\ e^{\frac{ix}{c}}, & x < 0 \end{cases}.$$

Теперь мы можем выписать гамма поле $\gamma_A(z)$:

$$\gamma_A(z) = \begin{cases} -i\sqrt{\frac{2}{c}}, & \text{Im}(z) > 0 \\ i\sqrt{\frac{2}{c}}, & \text{Im}(z) < 0 \end{cases}.$$

Гамма-поле $\gamma_S(z)$ получается из теоремы 3. Для функции Вейля $M_A(z)$ верно выражение

$$M_A(z) = \begin{cases} i, \operatorname{Im}(z) > 0 \\ -i, \operatorname{Im}(z) < 0 \end{cases}.$$

Теперь на основании теоремы 4 мы можем написать, что $M_S(z) = M_A(z - T)$. Используя формулу (3), мы получим множество всех самосопряженных расширений оператора S .

Заключение

В работе проведен обзор результатов, полученных для оператора $S = A \otimes I_T + I_A \otimes T$, где A – плотно заданный, симметрический оператор, а T – ограниченный и самосопряженный оператор. В частности, оператор Дирака попадает под данный вид. Мы построили гамма-поле и функцию Вейля для этого оператора, используя технику граничных троек. С помощью формулы Крейна получена параметризация всех самосопряженных расширений.

Литература

1. Крейн М.Г., Лангер Г.К. Дефектные подпространства и обобщенные резольвенты в пространстве Π_k // Функциональный анализ и его приложения. 1971. № 3. С. 54–69.
2. Наймарк М.А. Линейные дифференциальные операторы. М.: Наука, 1969. 528 с.
3. Baumgartel H., Wollenberg M. Mathematical scattering theory. Berlin: Akademie-Verlag, 1983.
4. Derkach V.A., Malamud M.M. On the Weyl function and Hermite operators with lacunae // Dokl. Ak. Nauk USSR. 1987. V. 293. N 5. P. 1041–1046.
5. Derkach V.A., Malamud M.M. Generalized resolvents and the boundary value problems for Hermitian operators with gaps // Journal of Functional Analysis. 1991. V. 95. N 1. P. 1–95.
6. Derkach V.A., Malamud M.M. The extension theory of Hermitian operators and the moment problem // Journal of Mathematical Sciences. 1995. V. 73. N 2. P. 141–242.
7. Gorbachuk V.I., Gorbachuk M.L. Boundary value problems for operator differential equations. Kluwer, Dordrecht, 1990. 364 p.
8. Malamud M.M. Some classes of extensions of a Hermitian operator with lacunae // Ukraine Mat. Zh. 1992. V. 44. N 2. P. 215–233.
9. Malamud M.M., Neidhardt H. Sturm-liouville boundary value problems with operator potentials and unitary equivalence // Journal of Differential Equations. 2012. V. 252. N 11. P. 5875–5922.
10. Smudgen K. Unbounded self-adjoint operators on Hilbert space. Springer, 2012. 432 p.
11. Malamud M.M., Malamud S.M. Spectral theory of operator measures in a Hilbert space // Algebra i analiz. 2003. V. 15. N 3. P. 1–77.
12. Gorbachuk M.L. Self-adjoint boundary problems for a second-order differential equation with unbounded operator coefficient // Functional Analysis and Its Applications. 1971. V. 5. N 1. P. 9–18.
13. Birman M.S. Existence conditions for wave operators // Izv. Akad. Nauk SSSR. 1963. N 27. P. 883–906.
14. Маламуд М.М., Найдхардт Х. О теоремах Като-Розенблума и Вейля-неймана // Доклады Академии Наук. 2010. Т. 432. № 2. С. 162–166.
15. Boitsev A.A., Neidhardt H., Popov I.Yu. Weyl function for sum of operators tensor product // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics. 2013. V. 4. N 6. P. 747–759.

Бойцев Антон Александрович	– студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, boitsevanton@gmail.com
Нейдхардт Хаген	– доктор физико-математических наук, научный сотрудник, Weierstrass Institute for applied analysis and stochastics, Берлин, Германия, Hagen.neidhardt@wias-berlin.de
Попов Игорь Юрьевич	– доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, popov1955@gmail.com
Anton A. Boitsev	– student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, boitsevanton@gmail.com
Hagen Neidhardt	– D.Sc., Scientific researcher, Weierstrass Institute for Applied Analysis and Stochastics, Berlin, Germany, Hagen.neidhardt@wias-berlin.de
Igor Yu. Popov	– D.Sc., Professor, Department head, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, popov1955@gmail.com

Принято к печати 02.06.14
Accepted 02.06.14

УДК 541.64:539.2

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕПТИДНЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ

И.М. Неелов^{a, b}, А.А. Мистонова^a, А.Ю. Хватов^a, В.В. Безродный^a

^a Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия;

^b Университет г. Хельсинки, Хельсинки, Финляндия, i.neelov@mail.ru

Аннотация. Методы компьютерного моделирования применены для исследования конформационных свойств некоторых заряженных гомополипептидов в разбавленных водных растворах. С помощью метода молекулярной динамики изучены полноатомные модели полилизина и полиаспарагиновой кислоты с явным учетом воды и противоионов. Рассчитаны размеры, форма, функции распределения, временные корреляционные функции радиуса инерции и расстояний между концами пептидных цепей. Получены характеристики сольватации рассмотренных полиэлектролитов. Установлено, что полиаспарагиновая кислота имеет в разбавленном водном растворе более компактную структуру и более сферическую форму, чем полилизин. Показано, что это связано с различным взаимодействием между рассмотренными полипептидами и молекулами воды (в частности, количеством и качеством водородных связей, образованных этими пептидами с водой), а также с различием в количестве ионных пар, образуемых заряженными группами пептидов и противоионами. Полученные результаты необходимо учитывать при создании различных изделий на основе исследованных пептидов и их применении в различных промышленных и биомедицинских приложениях.

Ключевые слова: полиэлектролиты, пептиды, компьютерное моделирование, метод молекулярной динамики.

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF PEPTIDE POLYELECTROLYTES

I.M. Neelov^{a, b}, A.A. Mistonova^a, A.Yu. Khvatov^a, V.V. Bezrodny^a

^a ITMO University, Saint Petersburg, Russia;

^b University of Helsinki, Helsinki, Finland, i.neelov@mail.ru

Abstract. The paper deals with investigation of the conformational properties of some charged homopolypeptides in dilute aqueous solutions by computer simulation. A method of molecular dynamics for the full-atomic models of polyaspartic acid and polylysine with explicit account of water and counter-ions is used for this purpose. For systems containing these polypeptides we calculated time trajectories and the size, shape, distribution functions and time correlation functions of inertia radius and the distances between the ends of peptide chains. We have also calculated the solvation characteristics of considered polyelectrolytes. We have found out that polyaspartic acid in dilute aqueous solution has more compact structure and more spherical shape than polylysine. We have shown that these differences are due to different interaction between the polypeptides and water molecules (in particular, the quality and quantity of hydrogen bonds formed by these peptides with water), and the difference in an amount of ion pairs formed by the charged groups of the peptides and counter-ions. The obtained results should be taken into account for elaboration of new products based on the investigated peptides and their usage in various industrial and biomedical applications.

Keywords: polyelectrolytes, peptides, computer simulation, molecular dynamics method.

Введение

Полиэлектролиты (ПЭ) – это полимеры с ионизируемыми группами, которые диссоциируют в водном растворе [1]. ПЭ широко используются во многих приложениях как суперабсорбенты, стабилизаторы и флокулянты, структурообразователи и загустители, а также для получения полимер-полимерных комплексов [2]. Одними из наиболее широко используемых синтетических ПЭ являются полиакриловая и полиметакриловая кислоты [3, 4]. В последние годы одной из важнейших задач является переход к использованию экологически чистых биосовместимых и биоразлагаемых полимеров и, в частности, биоразлагаемых ПЭ. Для этой цели могут быть использованы как природные, так и синтетические макромолекулы, а также их смеси и сополимеры. Одним из возможных вариантов является использование пептидных ПЭ и, в частности, заряженных гомополипептидов. Например, такой гомополипептид, как полилизин, широко используется в медицине в качестве подложки для выращивания клеточных культур, для доставки противораковых препаратов, в качестве невирусных векторов для доставки ДНК в клетки и других целей. Полиаспарагиновая кислота также широко используется во многих биомедицинских приложениях, например, при создании новых лекарственных препаратов и средств доставки для них [5], при создании трансплантатов, а также для опреснения морской воды [6].

Теоретические исследования и моделирование полиэлектролитных систем обычно проводятся на основе крупномасштабных (coarse-grained) моделей, которые хорошо описывают глобальные свойства этих систем. В то же время применимость этих моделей для реальных ПЭ на масштабах порядка размеров молекулы не вполне очевидна. В настоящее время в литературе имеется небольшое количество работ, посвященных моделированию ПЭ на основе детальных молекулярных моделей. В начале 2000-х г.г. была опубликована серия работ по ПЭ на основе полиэтиленоксида (ПЭО) для топливных ячеек [7–10]. В этих работах методом МД на полноатомных моделях исследовались структура ПЭО в водном растворе и коэффициенты диффузии различных ионов в этой системе. В последние годы появились работы, посвященные моделированию методом молекулярной динамики (МД) полиакриловой и полиметакриловой кислот (ПАК и ПМАК соответственно) [11] и полиаспарагиновой кислоты [12] на полноатомных моде-

лях. В первой из них [11] проведено сопоставление радиусов инерции ПАК и ПМАК и взаимодействия заряженных COO^- групп с молекулами воды при разных степенях ионизации (соотношениях COO^- и COOH групп) рассматриваемых ПЭ. Во второй работе [12] проведено сопоставление свойств полиаспарагиновой кислоты с незаряженными (COOH) и заряженными (COO^-) боковыми группами и показано, что в первом случае основная цепь имеет конформацию клубка, а в последнем – более вытянутую конформацию из-за сильных электростатических взаимодействий между заряженными COO^- группами.

В настоящей работе проведено моделирование на полноатомных моделях двух противоположно заряженных гомополипептидов (полилизина и полиаспарагиновой кислоты) в разбавленных водных растворах. Для этих молекул получены основные структурные характеристики (размеры, форма, расстояния между концами, функции распределения расстояний между концами пептидной цепи и временные корреляционные функции для этих расстояний), а также исследованы закономерности сольватации и образования водородных связей и ионных пар в рассмотренных системах.

Модель и метод расчета

Моделирование проводили методом молекулярной динамики для обеих систем, включающих в себя один гомополипептид (полилизин или полиаспарагиновую кислоту, состоящие из 32-х аминокислотных остатков каждый), молекулы воды и 32 противоиона (хлора для полилизина или натрия для полиаспарагиновой кислоты). Системы помещали в кубическую ячейку размером 9 нм с периодическими граничными условиями. Начальные конформации для обоих пептидов с одинаковыми углами внутреннего вращения в каждом аминокислотном остатке ($\varphi = -135^\circ$, $\psi = 135^\circ$, $\theta = 180^\circ$) задавали с помощью программного пакета HyperChem [13], и они соответствовали вытянутой конформации основной цепи в β -листе (β -sheet). Полученные структуры оптимизировали вначале в вакууме методом молекулярной механики на полноатомной модели с силовым полем Amber. Дальнейшую минимизацию энергии и моделирование проводили с использованием пакета GROMACS 4.5.5 [14] и одного из наиболее современных силовых полей AMBER_99SB_ildn [15]. Потенциальная энергия в этом силовом поле состоит из энергий деформации валентных связей и углов, углов внутреннего вращения, ван-дер-ваальсовых и электростатических взаимодействий. Каждый МД расчет длительностью 150 нс включал в себя уравнивание системы в течение 50 нс и основной расчет длительностью 100 нс при температуре 300 К, во время которого рассчитывались средние величины, функции распределения и временные корреляционные функции. Более детальное описание параметров моделирования приводится в наших предыдущих работах по моделированию систем на основе лизиновых мономеров [16–19].

Результаты и их обсуждение

Конформации молекул полилизина с противоионами хлора и полиаспарагиновой кислоты с противоионами натрия в конце молекулярно-динамического моделирования длительностью 150 нс приведены на рис. 1. Обе макромолекулы имеют довольно вытянутую конформацию, хотя молекула полилизина (рис. 1, а) выглядит более вытянутой, чем полиаспарагиновая кислота (рис. 1, б). При этом видно, что контрионы хлора (рис. 1, а) находятся в основном в растворе, в то время как большинство противоионов натрия находятся непосредственно на поверхности полиаспарагиновой кислоты (рис. 1, б).

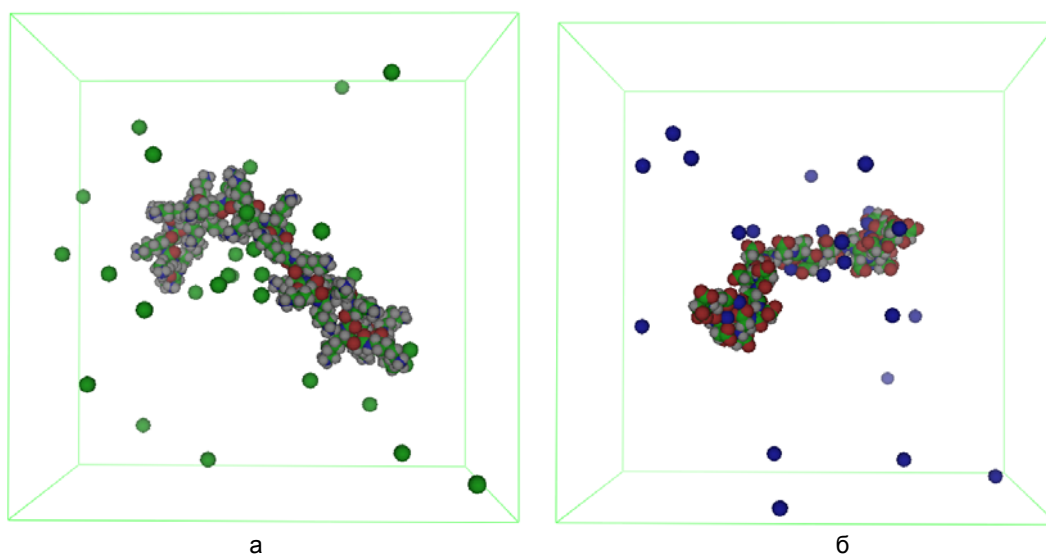


Рис. 1. Конформации полилизина (с противоионами хлора) (а) и полиаспарагиновой кислоты (с противоионами натрия) (б) в конце моделирования методом МД в течение 150 нс (молекулы воды не показаны для ясности). Длина ребра периодической кубической ячейки в обоих случаях равна 9 нм

Для характеристики конформационного состояния, размеров и формы полипептидов в таблице приводятся усредненные по всей рассчитанной траектории величины: радиусы инерции цепей и собственные значения тензора инерции этих цепей, а также расстояния между концами пептидных цепей.

	R_g , нм	R_g^{11} , нм	R_g^{22} , нм	R_g^{33} , нм	R , нм
<i>Lys</i> ₃₂	0,225	0,077	0,214	0,223	0,491
<i>Asp</i> ₃₂	0,180	0,071	0,169	0,177	0,421

Таблица. Среднеквадратичные значения радиуса инерции цепи R_g , трех собственных значений тензора инерции цепи R_g^{11} , R_g^{22} , R_g^{33} и расстояния между концами основной цепи R для полилизина (*Lys*₃₂) и полиаспарагиновой кислоты (*Asp*₃₂) со степенью полимеризации $N=32$

Полилизин имеет более длинные линейные боковые группы и на 10% бóльшую молекулярную массу мономерного звена, чем полиаспарагиновая кислота, поэтому естественно предположить, что радиус инерции полилизина будет больше, чем у полиаспарагиновой кислоты с той же степенью полимеризации N (в нашем случае $N=32$). Действительно, усредненный по траектории среднеквадратичный радиус инерции исследованного полилизина равен 0,225 нм, в то время как радиус инерции полиаспарагиновой кислоты – только 0,180 нм. Форма обеих молекул может быть охарактеризована соотношением главных компонент их тензора инерции. Наибольшая компонента тензора инерции R_g^{33} полилизина на 26% больше, чем у полиаспарагиновой кислоты. В то же время наименьшая компонента полилизина только на 10% больше, и, следовательно, анизотропия, которая может характеризоваться отношением R_g^{33} / R_g^{11} , также больше у полилизина (2,90 по сравнению с 2,49 у полиаспарагиновой кислоты). Среднеквадратичное расстояние между концами основной цепи (таблица) также оказывается бóльшим у полилизина: 0,491 нм по сравнению с 0,421 нм у полиаспарагиновой кислоты, т.е. примерно на 17%. Таким образом, полилизин имеет на 25% бóльший радиус инерции, на 16% бóльшую анизотропию и на 17% бóльшее расстояние между концами основной цепи по сравнению с полиаспарагиновой кислотой. Это отличие может быть связано не только с несколько бóльшей молекулярной массой мономера полилизина, но и с уже отмеченным фактом, что у полилизина в рассмотренной системе противоионы не так тесно связаны с его заряженными боковыми группами (рис. 1). В литературе существует ограниченное количество экспериментальных данных по размерам линейных полипептидов, поэтому сравнить полученные результаты с ними не представляется возможным. В то же время для полиаспарагиновой кислоты имеется информация о том, что она может принимать конформацию статистического клубка при физиологических условиях [20].

Более детальную информацию о конформации линейных полимерных цепей вообще и ПЭ, в частности, дают функции распределения по размерам (по радиусам инерции R_g) и по расстояниям между концами основной цепи R . Эти функции приведены на рис. 2. Функции распределения для радиусов инерции (рис. 2, а) показывают, что максимальные значения R_g для этих цепей (около 2,6 нм) встречаются одинаково часто, в то время как пик функции распределения и минимальное значение R_g для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) сдвинуты в область меньших значений R_g по сравнению с соответствующими характеристиками (кривая 1) для полилизина. Это согласуется с более компактной конформацией полиаспарагиновой кислоты и бóльшим количеством противоионов, находящихся вблизи заряженных групп этого ПЭ (рис. 1, б). Функция распределения по расстояниям между концами основной цепи $p(R)$, приведенная на (рис. 2, б) для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2), также смещена в область малых R по сравнению с $p(R)$ для полилизина (кривая 1), однако эта $p(R)$, в отличие от $p(R_g)$, смещена для полиаспарагиновой кислоты в область меньших R во всем интервале изменения $p(R)$.

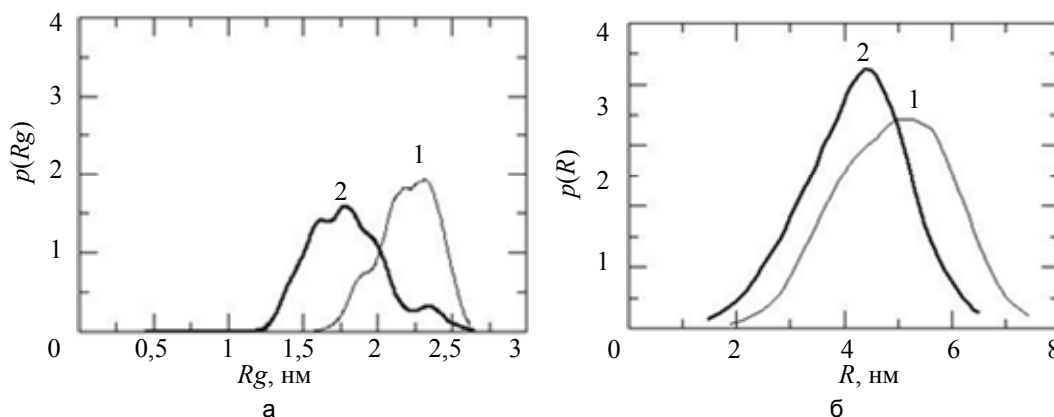


Рис. 2. Функции распределения: для радиуса инерции полипептида $p(R_g)$ (а) и для расстояния между концами основной цепи пептида $p(R)$ (б) (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Характерное время флуктуаций размеров R_g и расстояний между концами линейной полимерной цепи R может быть получено из наклона зависимости временной автокорреляционной функции $C(t) = (\langle X(t')X(t'+t) \rangle - \langle X \rangle^2) / (\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2)$ для величин $X=R_g$ (радиус инерции) и $X=R$ (расстояние между концами цепи), где t – время, в течение которого рассчитывается корреляционная функция, а $\langle \rangle$ означает усреднение по всем временам t' вдоль МД траектории. Временные зависимости $C(t)$ для $X=R_g$ (на рис. 3, а) и $X=R$ (на рис. 3, б) говорят о том, что флуктуации размеров полилизина происходят быстрее, чем флуктуации размеров полиаспарагиновой кислоты, а флуктуации расстояний между концами цепей происходят примерно с одинаковой скоростью. В случае простейшего описания релаксации функции $C(t)$ одной экспонентой характерные времена релаксации для R_g близки к 1 нс и 3 нс для полилизина и полиаспарагиновой кислоты соответственно, а для расстояния между концами R релаксация для обоих ПЭ происходит с примерно одинаковым временем (порядка 1 нс), которое, в свою очередь, близко к времени релаксации R_g для полилизина.

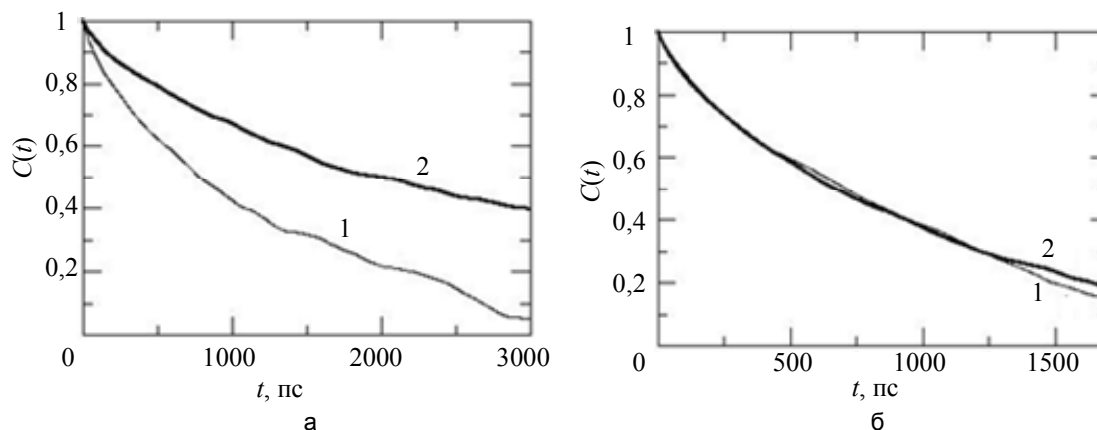


Рис. 3. Временная автокорреляционная функция $C(t)$ для радиуса инерции цепи R_g (а) и для расстояния между концами цепи R (б) (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Взаимодействия заряженных групп полилизина и полиаспарагиновой кислоты при их растворении в воде могут быть описаны радиальной функцией распределения $g(r)$ между этими заряженными группами (NH_3^+ в полилизине и COO^- в полиаспарагиновой кислоте) и молекулами воды. Зависимости $g(r)$ для полилизина (кривая 1) и полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) приведены на рис. 4, а. Хорошо видно, что минимальное расстояние, на которое вода приближается к зарядам, составляет менее 0,15 нм для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) и более 0,25 нм для полилизина (кривая 1). Аналогичный результат был получен для радиальных функций распределения $g(r)$ между заряженными группами ПЭ и противоионами, приведенными на рис. 4, б. Хорошо видно, что противоионы натрия приближаются к зарядам полиаспарагиновой кислоты на расстояние порядка 0,2 нм, в то время как противоионы хлора могут приближаться к зарядам полилизина только примерно до 0,3 нм. Кроме того пиковое значение функции $g(r)$ для полиаспарагиновой кислоты (кривая 2) примерно на порядок больше, чем для полилизина (кривая 1). Таким образом, полиаспарагиновая кислота образует существенно большее количество ионных пар с противоионами, чем полилизин. Эти данные находятся в соответствии с более близким положением противоионов натрия на поверхности полиаспарагиновой кислоты на рис. 1, б, по сравнению с более удаленным расположением противоионов хлора по отношению к поверхности полилизина на рис. 1, а.

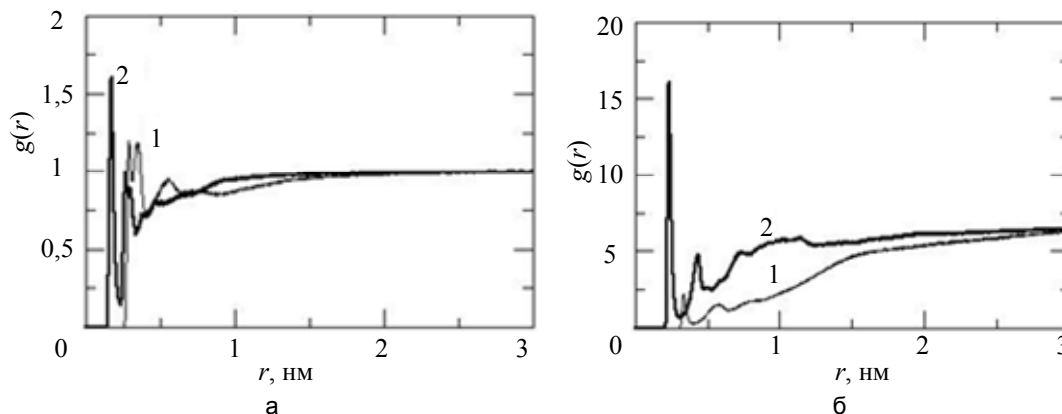


Рис. 4. Радиальная функция распределения $g(r)$ между заряженными группами основной цепи и молекулами воды (нормированная $g(r)$) (а) и противоионами (ненормированная $g(r)$) (б) (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Водородные связи играют важную роль в биомолекулярных системах вообще и в белках, в частности. Например, в зависимости от внешних условий они могут стабилизировать вторичную структуру как спиральной, так и складчатой конформаций пептидов и белков. В связи с этим важной характеристикой взаимодействия растворенных в воде пептидов является среднее число внутри- и межмолекулярных водородных связей в системе, в частности, число водородных связей, образованных пептидами с водой, а также функции распределения по числу и по длинам этих связей, приведенные на рис. 5, а, и рис. 5, б, соответственно. Полученное нами среднее число водородных связей, образованных молекулой полиаспарагиновой кислоты с водой (порядка 210), оказывается бóльшим, чем среднее число водородных связей, образованных полилизинном (около 145). Функции распределения по числу водородных связей довольно симметричны и имеют пиковые значения при числах связей, близких к средним значениям. Функции распределения по длинам водородных связей (рис. 5, б) дают средние (и близкие к ним пиковые) значения длин водородных связей d для полиаспарагиновой кислоты ($d=0,27$ нм)), меньшие по сравнению с длинами этих связей для полилизина ($d=0,29$ нм). Таким образом, и эти функции подтверждают более близкие контактные расстояния полиаспарагиновой кислоты с молекулами воды по сравнению с полилизинном.

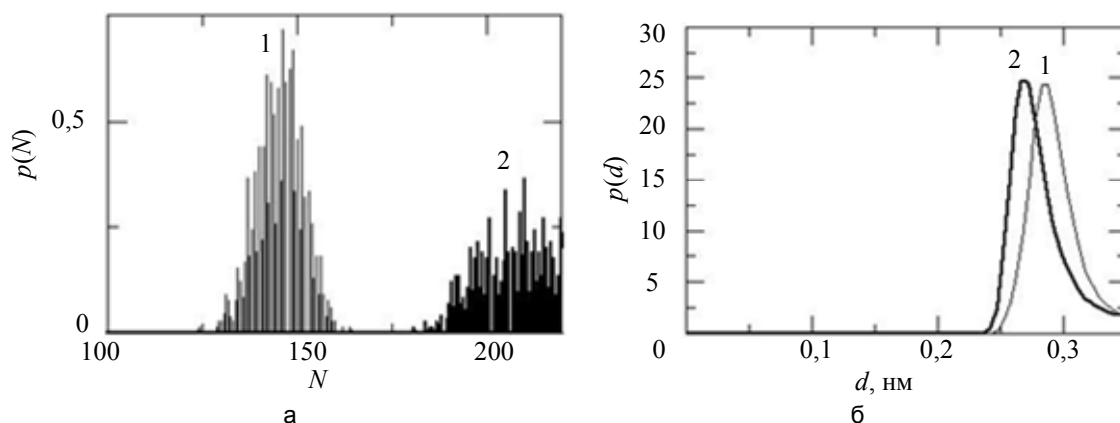


Рис. 5. Функция распределения по числу (а), и по длинам водородных связей (б) между полиэлектролитом и водой (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Водородные связи, кроме расстояния, характеризуются еще и направлением (углом). На рис. 6 построены распределения по углам водородных связей с водой для обоих ПЭ. Максимум распределения по углам для водородных связей полиаспарагиновой кислоты с водой находится в области меньших углов с максимумом при значениях угла около 8° , в то время как соответствующее распределение для полилизина смещено в сторону больших углов и имеет плато в области $10\text{--}17^\circ$. Меньшие значения углов (как и меньшие расстояния) соответствуют более прочным водородным связям. Таким образом, и по этому параметру водородные связи полиаспарагиновой кислоты с водой являются более устойчивыми, чем у полилизина.

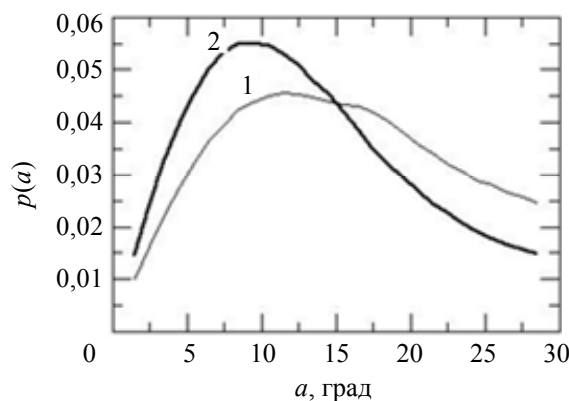


Рис. 6. Функция распределения по углам водородных связей между полиэлектролитом и водой (1 – для полилизина; 2 – для полиаспарагиновой кислоты)

Заключение

В работе с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики на полно-атомных моделях исследованы конформационные свойства молекул двух противоположно заряженных гомополипептидов – полилизина и полиаспарагиновой кислоты – в разбавленных водных растворах. Для этих молекул получены размеры, форма, функции распределения и временные корреляционные функции радиуса инерции и расстояний между концами пептидной цепи, а также исследованы характеристики

сольватации рассмотренных полиэлектролитов в воде с образованием водородных связей и ионных пар. Показано, что полиаспарагиновая кислота имеет более компактную и менее анизотропную конформацию по сравнению с полилизинном той же степени полимеризации. Расчет характеристик, описывающих сольватацию этих полипептидов, показал, что полиаспарагиновая кислота имеет больше контактов с водой и с противоионами, растворенными в воде. Последнее отличие приводит к большему экранированию отталкивающих электростатических взаимодействий между заряженными группами внутри цепи и уменьшению ее размеров и анизотропии по сравнению с полилизинном. В следующих работах планируется исследовать структуру комплексов и блоксополимеров, включающих эти пептиды, и сравнить их характеристики в составе различных структур с характеристиками отдельных пептидов, полученными в данной работе.

Литература

1. Oosawa F. *Polyelectrolytes*. New York: Marcel Dekker, 1971. 160 p.
2. Dobrynin A.V. Solutions of charged polymers // *Polymer Science: A Comprehensive Reference*, 2012. V. 1. P. 81–132.
3. Соловьев В.С., Успенская М.В., Сиротинкин Н.В. Полимерные водопоглощающие композиции с повышенной прочностью // *Изв. вузов. Приборостроение*. 2010. Т. 53. № 4. С. 63–65.
4. Зацепин И.Ю., Соловьев В.С. Сорбция ионов металлов полимерными композитами // *Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО*. 2008. № 4 (49). С. 235–237.
5. Rivera G.R, Alonso M.J., Torres D. Poly-L-asparagine nanocapsules as anticancer drug delivery vehicles // *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. 2013. V. 85. N 3 part A. P. 481–487.
6. Chekli L., Phuntsho S., Shon H.K., Vigneswaran S., Kandasamy J., Chanan A. A review of draw solutes in forward osmosis process and their use in modern applications // *Desalination and Water Treatment*. 2012. V. 43. N 1-3. P. 167–184.
7. Ennari J., Neelov I., Sundholm F. Estimation of the ion conductivity of a PEO-based polyelectrolyte system by molecular modeling // *Polymer*. 2001. V. 42. N 19. P. 8043–8050.
8. Ennari J., Neelov I., Sundholm F. Molecular dynamics simulation of the structure of PEO based solid polymer electrolytes // *Polymer*. 2000. V. 41. N 11. P. 4057–4063.
9. Ennari J., Elomaa M., Neelov I., Sundholm F. Modeling of water-free and water containing solid polyelectrolytes // *Polymer*. 2000. V. 41. N 3. P. 985–990.
10. Ennari J., Neelov I., Sundholm F. Molecular dynamics simulation of the PEO sulfonic acid anion in water // *Computational and Theoretical Polymer Science*. 2000. V. 10. N 5. P. 403–410.
11. Sulatha M.S., Natarajan U. Origin of the difference in structural behavior of poly(acrylic acid) and poly(methacrylic acid) in aqueous solution discerned by explicit-solvent explicit-ion MD simulations // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 2011. V. 50. N 21. P. 11785–11796.
12. Ramachandran S., Katha A.R., Kolake S.M., Jung B., Han S. Dynamics of dilute solutions of poly (aspartic acid) and its sodium salt elucidated from atomistic molecular dynamics simulations with explicit water // *Journal of Physical Chemistry B*. 2013. V. 117. N 44. P. 13906–13913.
13. Chemistry Software, HyperChem, Molecular Modeling. Режим доступа: <http://www.hyper.com/> свободный. Яз.англ. (дата обращения 20.06.14).
14. Hess B., Kutzner C., Spoel D., Lindahl E. GRGMACS 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2008. V. 4. N 3. P. 435–447.
15. Hornak V., Abel R., Okur A., Strockbine D., Roitberg A., Simmerling C. Comparison of multiple amber force fields and development of improved protein backbone parameters // *Proteins: Structure Function and Genetics*. 2006. V. 65. N 3. P. 712–725.
16. Неелов И.М., Маркелов Д.А., Фалькович С.Г., Ильяш М.Ю., Округин Б.М., Даринский А.А. Математическое моделирование лизиновых дендримеров. Температурные зависимости // *Высокомолекулярные соединения*. 2013. Т. 55. № 7. С. 963–970.
17. Falkovich S., Markelov D., Neelov I., Darinskii A. Are structural properties of dendrimers sensitive to the symmetry of branching? Computer simulation of lysine dendrimers // *Journal of Chemical Physics*. 2013. V. 139. N 6. Art. N 064903.
18. Neelov I., Falkovich S., Markelov D., Paci E., Darinskii A., Tenhu H. Molecular Dynamics of Lysine Dendrimers. Computer Simulation and NMR / In: *Dendrimers in Biomedical Applications*. London, Royal Society of Chemistry, 2013. P. 99–114.
19. Neelov I.M., Janaszewska A., Klajnert B., Bryszewska M., Makova N., Hicks D., Pearson H., Vlasov G.P., Pyash M.Yu., Vasilev D.S., Dubrovskaya N.M., Tumanova N.L., Zhuravin I.A., Turner A.J., Nalivaeva N.N. Molecular properties of lysine dendrimers and their interactions with $\alpha\beta$ -peptides and neuronal cells // *Current Medical Chemistry*. 2013. V. 20. N 1. P. 134–143.
20. Horkay F., Hecht A.M., Geissler E. Similarities between polyelectrolyte gels and biopolymer solutions // *Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics*. 2006. V. 44. N 24. P. 3679–3686.

- Неелов Игорь Михайлович** – доктор физико-математических наук, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия; профессор, Университет г. Хельсинки, Хельсинки, Финляндия, i.neelov@mail.ru
- Мистонова Анастасия Андреевна** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, misstons@gmail.ru
- Хватов Анатолий Юрьевич** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, khvatovtolik@gmail.com
- Безродный Валерий Валерьевич** – студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, Wolya13@rambler.ru
- Igor M. Neelov** – D.Sc., Professor, ITMO University, Saint Petersburg, Russia; Professor, University of Helsinki, Helsinki, Finland, i.neelov@mail.ru
- Anastasiya A. Mistonova** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, misstons@gmail.ru
- Anatoliy Yu. Khvatov** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, khvatovtolik@gmail.com
- Valeriy V. Bezrodny** – student, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, Wolya13@rambler.ru

*Принято к печати 02.06.14
Accepted 02.06.14*

УДК 681.5.015

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
БЫСТРЫХ ТЕРМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВА.А. Капитонов^а, С.В. Арановский^а^а Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, s.aranovskiy@gmail.com

Аннотация. Рассматривается задача идентификации параметров нелинейной математической модели, описывающей быстрые термические процессы. Для оценивания параметров модели предложен гибридный метод, сочетающий аналитическое решение и использование методов численной оптимизации. На первом этапе по экспериментальным данным оценивается значение скорости изменения температуры, что позволяет записать исходную нелинейную модель как модель линейной регрессии и найти оценку параметров методом наименьших квадратов. Полученная оценка используется как начальное значение при численном решении задачи минимизации ошибки предсказания, что позволяет сформировать оптимальный предиктор. Предложенный алгоритм апробирован на экспериментальной установке для газофазной эпитаксии, полученные оценки параметров нелинейной модели позволяют с высокой точностью прогнозировать изменения температуры.

Ключевые слова: идентификация нелинейной модели, минимизация ошибки предсказаний, быстрые термические процессы, газофазная эпитаксия.

Благодарности. Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01) и при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект 14.Z50.31.0031).

IDENTIFICATION OF NONLINEAR MODEL PARAMETERS FOR RAPID THERMAL PROCESSES

А.А. Kapitonov^а, S.V. Aranovskiy^а^а ITMO University, Saint Petersburg, Russia, s.aranovskiy@gmail.com

Abstract. A problem of parameters identification is considered for a nonlinear model of rapid thermal processes. A hybrid approach is proposed for parameter estimation combining both analytical solution and numerical optimization. At the first step, the rate of temperature change is estimated from experimental data, which makes it possible to rewrite the considered nonlinear model as a linear regression and estimate the parameters by the least-squares method. Further, this estimation is used as an initial guess for numerical optimization of prediction error minimization problem, thus the optimal predictor is obtained. The proposed approach was verified at an experimental setup for vapor deposition processing; the resulting estimates provide high-quality temperature prediction.

Keywords: nonlinear system identification, prediction error minimization, rapid thermal processes, vapor deposition processing.

Acknowledgements. This work was partially financially supported by the Government of the Russian Federation (grant 074-U01), the Russian Ministry of Education and Science (project 14.Z50.31.0031).

К быстрым термическим процессам (БТП) относят такие процессы, при которых скорость изменения температуры составляет единицы или десятки градусов в секунду. Такие процессы встречаются в широком спектре практических задач: закалка и плавка металлов, выращивание полупроводниковых структур и др. Для регулирования температуры в БТП требуется разработка специальных систем управления, что требует, в том числе, решения задачи идентификации. В настоящей работе предлагается метод идентификации параметров математической модели БТП. Экспериментальные исследования проводятся на исследовательском оборудовании для газофазной эпитаксии Epiquip, используемом в ФТИ им. Иоффе [1].

На основе работ [2–4] можно записать модель БТП, протекающих в рассматриваемой установке, построенную на основе уравнения баланса энергии:

$$\dot{T}(t) = -a_r T^4(t) - a_c T(t) + bu(t) + C, \quad (1)$$

где $T(t) > 0$ – температура подложкодержателя в точке измерения; коэффициент $a_r > 0$ описывает потери тепла за счет излучения; коэффициент $a_c > 0$ описывает потери тепла за счет конвекции и теплопередачи; коэффициент $b > 0$ описывает приток тепла за счет индуктора; константа $C > 0$ описывает совокупный приток тепла от внешней среды, связанный с переизлучением, конвекцией и теплопередачей; $u(t) > 0$ – сигнал управления, соответствующий подаваемой мощности. В пределах одного рабочего режима параметры модели (1) можно считать постоянными. Ставится задача идентификации параметров нелинейной модели (1) на основе экспериментальных данных. Целью идентификации является получение оценок параметров модели, которые будут далее использоваться для моделирования БТП, оценки вариативности параметров в различных рабочих режимах, оценки достижимого качества регулирования и т.п.

Для определения параметров модели (1) могут использоваться два подхода: сведение нелинейной модели (1) к модели линейной регрессии с последующим использованием метода наименьших квадратов [5], или использование метода минимизации ошибки предсказаний [5–7]. К преимуществам первого под-

хода относится наличие аналитического решения, однако для формирования модели линейной регрессии требуется получение оценки скорости изменения температуры $T'(t)$, т.е. проведение процедуры численного дифференцирования, неизбежно связанного с ошибками оценивания [8]. Метод минимизации ошибки предсказаний для нелинейных систем основан на построении предиктора с использованием процедуры численной оптимизации и не требует оценивания производной, однако является чувствительным к начальным условиям и более вычислительно емким.

Для решения задачи идентификации предлагается гибридный подход, сочетающий оба метода. Вначале по данным экспериментов оценивается скорость изменения температуры, формируется модель линейной регрессии и с использованием метода наименьших квадратов формируется приближенная оценка параметров. Затем полученная оценка используется как начальное приближение для метода минимизации ошибки предсказаний, что позволяет сформировать оптимальный предиктор и получить уточненные оценки параметров.

Допустим, что эксперимент проводился на отрезке времени от t_0 до t_f , и в ходе эксперимента были измерены значения температуры $T(t_k)$ и входного сигнала $u(t_k)$ в моменты времени $t_0 \leq t_k \leq t_f$, $k = 1, \dots, N$, где N – общее количество измерений. Тогда по измеренным значениям температуры могут быть получены численные оценки скорости изменения температуры \hat{T}'_k с использованием методов численного дифференцирования [8]. Выражение (1) может быть представлено как модель линейной регрессии:

$$\hat{T}'_k = [T^A(t_k), T(t_k), u(t_k), 1] \cdot [-a_r, -a_c, b, C]^T = \Psi^T(t_k)\theta.$$

Тогда для совокупности всех измерений можно записать:

$$\mathbf{Y} = \Psi\theta,$$

где $\mathbf{Y} = \text{col}\{\hat{T}'_k\}$ – N -мерный вектор; $\Psi = \text{col}\{\Psi^T(t_k)\}$ – матрица $N \times 4$, и оценка вектора неизвестных параметров может быть найдена как

$$\hat{\theta} = (\Psi^T \Psi)^{-1} \Psi^T \mathbf{Y}. \quad (2)$$

Далее сформируем предиктор температуры, позволяющий получить оценку температуры в момент времени $t_0 \leq t \leq t_f$ при известном начальном значении, входном сигнале и параметрах, задаваемых вектором θ :

$$T_{pred}(t, \theta) = \mathcal{P}\{T(t_0), \theta, u(\tau : t_0 \leq \tau \leq t)\}. \quad (3)$$

Как правило, предиктор реализуется путем численного решения дифференциального уравнения (1) при заданных параметрах. Рассмотрим критерий, основанный на минимизации ошибки предсказания,

$$J(\theta) = \sum_{k=1}^N (T(t_k) - T_{pred}(t_k, \theta))^2 = \sum_{k=1}^N e(t_k, \theta)^2. \quad (4)$$

Известно [5, 6], что оценка параметров, минимизирующая критерий (4), является оптимальной в статистическом смысле, т.е. соответствует критерию максимального правдоподобия в предположении о независимости шумов измерений. Такая оценка может быть найдена с использованием методов нелинейной численной оптимизации как

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} J(\theta). \quad (5)$$

Так как многие алгоритмы нелинейной численной оптимизации чувствительны к выбору начального приближения, то в качестве такового предлагается брать оценку (2).

Запишем итоговый алгоритм идентификации.

- A1. По результатам эксперимента получить набор измеренных значений температуры $T(t_k)$ и входного сигнала $u(t_k)$ в моменты времени $t_0 \leq t_k \leq t_f$, $k = 1, \dots, N$.
- A2. С использованием методов численного дифференцирования получить оценки скорости изменения температуры в моменты времени t_k : \hat{T}'_k .
- A3. Найти оценку параметров $\hat{\theta}_0$ в соответствии с методом наименьших квадратов (2).
- A4. Сформировать предиктор (3), способный по начальным данным, входному сигналу и набору параметров θ получить предсказания выхода системы для всех моментов времени t_k .
- A5. С использованием методов численной оптимизации найти оптимальную оценку вектора параметров как (5). При этом полученное ранее значение $\hat{\theta}_0$ может использоваться как начальное приближение искомой оценки.

Предложенный алгоритм идентификации был использован для определения параметров математической модели (1) при описании БТП в исследовательском оборудовании Eriqur для газозафазной

эпитаксии в диапазоне температур от 800 К до 900 К. На вход системы подавался синусоидальный сигнал с нарастающей частотой, что позволило возбудить в системе колебания на частотах от 0,01 Гц до 0,05 Гц. На рисунке представлены совмещенные графики измеренной на опытном оборудовании температуры и предсказания температуры, полученные с помощью предиктора с идентифицированными предложенным алгоритмом параметрами. Высокая точность предсказания подтверждает применимость предложенного алгоритма.

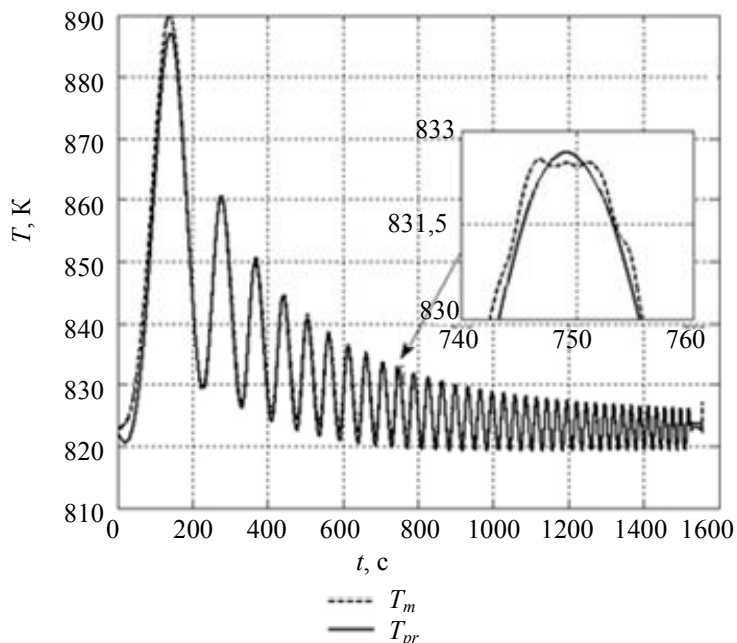


Рисунок. Сравнение измеренной температуры $T_m(t)$ и предсказания, сформированного предиктором с идентифицированными параметрами $T_{pr}(t)$

1. Лундин В.В., Сахаров А.В., Цацульников А.Ф., Заварин Е.Е., Бесюлькин А.И., Фомин А.В., Сизов Д.С. Выращивание эпитаксиальных слоев AlGaIn и сверхрешеток AlGaIn/GaN методом газовой фазной эпитаксии из металлоорганических соединений // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. № 6. С. 705–709.
2. Schaper C.D., Cho Y.M., Park P., Norman S.A., Gyugyi P., Hoffmann G., Balemi S., Boyd S.P., Franklin G., Kailath T., Saraswat K.C. Modeling and control of rapid thermal processing // Proc. SPIE – The International Society for Optical Engineering. 1992. V. 1595. P. 2–17.
3. Schaper C.D., Moslehi M.M., Saraswat K.C., Kailath T. Modeling, identification, and control of rapid thermal processing systems // Journal of the Electrochemical Society. 1994. V. 141. N 11. P. 3200–3209.
4. Ebert J., De Roover D., Porter L.L., Lisiewicz V.A., Ghosal S., Kosut R.L., Emami-Naeini A. Model-based control of rapid thermal processing for semiconductor wafers // Proceedings of the American Control Conference. 2004. V 5. P. 3910–3921.
5. Льюнг Л. Идентификация систем: Теория для пользователя: Пер. с англ. М.: Наука, 1991. 432 с.
6. Astrom K.J. Maximum likelihood and prediction error methods // Automatica. 1980. V. 16. N 5. P. 551–574.
7. Söderström T., Stoica P., Friedlander B. An indirect prediction error method for system identification // Automatica. 1991. V. 27. N. 1. P. 183–188.
8. Diop S., Grizzle J.W., Chaplais F. On numerical differentiation algorithms for nonlinear estimation // Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control. 2000. V. 2. P. 1133–1138.

Капитонов Александр Александрович

— аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, kap2fox@gmail.com

Арановский Станислав Владимирович

— кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, s.aranovskiy@gmail.com

Alexander A. Kapitonov

— postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, kap2fox@gmail.com

Stanislav V. Aranovskiy

— PhD, Senior researcher, ITMO University, Saint Petersburg, Russia, s.aranovskiy@gmail.com

Принято к печати 10.06.14

Accepted 10.06.14

РЕДАКЦИОННАЯ ЭТИКА

Деятельность редакции направлена на информирование широкого круга научной общественности о новых научных разработках, технических решениях. В своей работе редакция руководствуется такими важнейшими принципами, как достоверность, научная значимость и актуальность публикуемых работ.

Политика редакционной коллегии журнала базируется на требованиях Российского законодательства в отношении обеспечения авторского права, на этических принципах, поддерживаемых сообществом ведущих издателей научной периодики.

Порядок приема, оценки и опубликования научных статей является открытым. Редакция оперативно информирует авторов и других заинтересованных специалистов обо всех изменениях существующих правил. Участники издательского процесса обязаны объяснить любые отклонения от установленной процедуры.

Редакция не допускает к публикации материалы, содержание которых запрещено законодательством Российской Федерации или носящих характер умаления чести, достоинства и деловой репутации любого лица, организации, государственных структур.

Редакция несет ответственность за качество опубликованных научных статей, а также осуществляет поддержку инициатив, направленных на снижение количества некорректных действий со стороны исследователей и нарушений норм этики.

Редакция требует от авторов подтверждения, что рукописи статей нигде ранее не публиковались и не представлялись для опубликования в других изданиях, что в текстах рукописей отсутствуют опубликованные ранее материалы других авторов без ссылки на первоисточники (плагиат). При выявлении таких фактов рукопись статьи немедленно отклоняется.

Редакция берет на себя ответственность за неразглашение персональных данных авторов и рецензентов, а также другой информации, полученной в ходе профессионального взаимодействия.

Получение авторами в ходе исследований негативных результатов не является препятствием для их опубликования в журнале. Редакция поощряет научные дискуссии и обмен опытом на страницах издания.

Редакция берет на себя ответственность за соблюдения научной этики при рецензировании статей, поощряет честную научную дискуссию между авторами и рецензентами. Редакционная коллегия, с учетом письменной аргументации авторов, вправе принять статью к опубликованию даже при наличии отрицательной рецензии, либо направить статью на дополнительное рецензирование.

Редакционная коллегия вправе вносить в текст статьи редакционные правки после согласования их с авторами.

Авторы представляемых в редакцию материалов несут всю ответственность за достоверность содержащейся в них информации, за соответствие материалов нормам законодательства, морали и этики.

Редакция ожидает соблюдения авторами следующих принципов:

- оригинальность и научная новизна исследований;
- достоверность полученных результатов;
- объективное обсуждение значимости исследований;
- признание вклада других лиц, обязательное наличие библиографических ссылок на использованные работы;
- представление в качестве соавторов всех участников, внесших существенный вклад в исследование; одобрение окончательной версии работы всеми соавторами и их полное согласие с представлением рукописи к публикации;
- незамедлительное сообщение об обнаружении автором существенных ошибок или неточностей в публикации и взаимодействия с редакцией с целью скорейшего исправления ошибок или изъятия публикации, своевременного исправления ошибок и неточностей, выявленных редакцией;
- отсутствие в статье заимствований без ссылок на первоисточники (плагиата).

ПРАВИЛА ПРЕДОСТАВЛЕНИЯ РУКОПИСЕЙ

Статьи принимаются в электронном виде (karmanov@mail.ifmo.ru), либо на DVD. В распечатанном виде **с подписями авторов** материалы представляются в редакцию по запросу после прохождения процедуры рецензирования.

Комплект документов должен включать:

- текст статьи с заверстанными рисунками и таблицами,
- форму сведений о статье (рус., англ.),
- формы сведений об авторах (на каждого автора); допускается указание нескольких мест работы автора;
- файлы с рисунками к статье в оригинальном формате (предпочтительно JPEG) с максимальным разрешением; допускается представление цветных рисунков, если в черно-белом варианте теряется полезная информация.

Объем статьи, включая иллюстрации, таблицы и список литературы, не должен превышать 8 страниц машинописного текста. Оригинал-макет статьи выполняется в редакторе Word for Windows (версия не ниже 2003 года).

Основной текст набирается шрифтом Times New Roman, размер 12 pt обычный, межстрочный интервал одинарный, поля сверху 20 мм, остальные поля 25 мм. Абзацный отступ 10 мм. Аннотация (объем 150-250 слов) печатается шрифтом Times New Roman 10 pt обычный, межстрочный интервал одинарный, выравнивание по ширине страницы.

Название статьи печатается шрифтом Times New Roman 12 pt полужирный, межстрочный интервал одинарный.

Название подраздела печатается шрифтом Times New Roman 12 pt полужирный, межстрочный интервал одинарный, пустыми строками не отделяется. Формулы набираются в редакторе Microsoft Equation Ed. 3.0.

Параметры стиля:

текста – Times New Roman, прямой;

функций, переменных и цифр – шрифт латинских букв Times New Roman курсив, греческих букв – Symbol прямой; русских букв, цифр, скобок – Times New Roman прямой шрифт. Обозначения функций (sin, cos, tg, ctg, min, max, extr) – прямой шрифт. Те же правила написания применяются и в отношении верхних и нижних индексов: обычный – 10 pt, крупный индекс – 12 pt, мелкий индекс – 8 pt, крупный символ – 16 pt, мелкий символ – 12 pt.

матриц и векторов – Times New Roman, прямой, полужирный (знак вектора «стрелка» не ставится).

Отдельные переменные в тексте допускается набирать в текстовом режиме с соблюдением требований, указанных для формул.

Разделительный знак десятичных дробей – запятая.

При оформлении рисунков и графиков используется шрифт Times New Roman. Стиль написания переменных должен соответствовать требованиям к основному тексту.

Используются только единицы измерения, соответствующие системе СИ, либо разрешенные к применению наравне с единицами системы СИ.

Список использованной литературы рекомендуется не менее 15 позиций для полнотекстовой статьи и не менее 8 – для краткого сообщения. Оформляется в соответствии с ГОСТ 7.0.5-2008. Нумерация позиций – согласно очередности ссылок в тексте.

Более подробную информацию смотрите на сайте <http://.ntv.ifmo.ru>