

<b>Ю. Л. Павлов, Е. Н. Дергишникова.</b> О ПРЕДЕЛЬНОМ РАС- ПРЕДЕЛЕНИИ МАКСИМАЛЬНОЙ СТЕПЕНИ ВЕРШИНЫ В СЛУЧАЙНОМ ГРАФЕ ИНТЕРНЕТ-ТИПА .....	59
<b>Ю. Л. Павлов, И. А. Чеплюкова.</b> ОБ АСИМПТОТИКЕ СТАТИ- СТИКИ ТИПА $\chi^2$ ДЛЯ ИНТЕРНЕТ-ГРАФОВ .....	66
<b>Н. И. Родченкова, Ю. В. Заика.</b> ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА С ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХ- НОСТИ .....	72
<b>С. В. Стафеев.</b> ПОЛИНОМИАЛЬНЫЕ ИНВАРИАНТЫ ДЛЯ МО- ДЕЛЕЙ С ЛАТЕНТНЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ .....	83
<b>И. А. Чернов.</b> СХОДИМОСТЬ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ МО- ДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ МОРСКОГО ЛЬДА .....	87
<b>С. П. Чистяков.</b> О НОВОМ МНОГОМЕРНОМ СТАТИСТИЧЕ- СКОМ КРИТЕРИИ ОДНОРОДНОСТИ ДВУХ ВЫБОРОК .....	93

**Хроника**

<b>В. Т. Вдовицын, Л. А. Калинин, М. Р. Когаловский, С. Д. Кузнецов, В. В. Мазалов.</b> XI Всероссийская научная кон- ференция RCDL'2009 «Электронные библиотеки: перспектив- ные методы и технологии, электронные коллекции» (Петроза- водск, 17–21 сентября 2009 г.) .....	98
---	----

<b>Ю. В. Чуйко.</b> Международное рабочее совещание «Сетевые игры и менеджмент» (Петрозаводск, 28–30 июня 2009 г.) .....	101
---	-----

**Юбилеи и даты**

<b>А. Д. Сорокин.</b> Юрий Васильевич Заика (к 50-летию со дня рожде- ния) .....	103
<b>Ю. В. Заика.</b> Георгий Александрович Борисов (к 75-летию со дня рождения) .....	107
<b>В. В. Мазалов.</b> Виктор Алексеевич Лебедев (к 75-летию со дня рождения) .....	110

<b>Правила для авторов</b> .....	114
----------------------------------	-----

ТРУДЫ КАРЕЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА РАН. № 3, 2010



# Труды

КАРЕЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

№ 3, 2010

ISSN 1997-3217

[transactions.krc.karelia.ru](http://transactions.krc.karelia.ru)

Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ. Выпуск 1

**СОДЕРЖАНИЕ**

<b>Предисловие</b> .....	3
<b>Г. А. Борисов, Т. П. Тихомирова.</b> ХАРАКТЕРИСТИКИ И СВОЙ- СТВА ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ И МОЩНОСТИ НА ПЕРЕДЕЛАХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ХОЗЯЙСТВА РЕГИОНА .....	4
<b>В. Т. Вдовицын, В. А. Лебедев.</b> ОНТОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕ- ЛИРОВАНИЕ КОНТЕНТА ЭЛЕКТРОННОЙ БИБЛИОТЕКИ КарНЦ РАН .....	11
<b>Р. С. Горичева, Е. В. Морозов.</b> РЕГЕНЕРАТИВНОЕ МОДЕ- ЛИРОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПОТЕРИ В СИСТЕМАХ ОБСЛУЖИВАНИЯ С КОНЕЧНЫМ БУФЕРОМ .....	20
<b>Ю. В. Заика, Е. П. Борматова.</b> ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕН- ТИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ .....	30
<b>Ю. В. Заика, Е. К. Костикова.</b> ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ДИФФУ- ЗИИ И ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА В КРАЕВОЙ ЗАДАЧЕ ТДС- ДЕГАЗАЦИИ .....	45
<b>О. В. Лукашенко, Е. В. Морозов, М. Пагано.</b> ПРИМЕНЕНИЕ ГАУССОВСКИХ ПРОЦЕССОВ В МОДЕЛИРОВАНИИ СЕТЕ- ВОГО ТРАФИКА .....	51

Карельский научный центр  
Российской академии наук

**ТРУДЫ**  
**КАРЕЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА**  
**РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Выпуск 1

Петрозаводск  
2010

**Труды Карельского научного центра  
Российской академии наук**

№ 3, 2010. Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ,  
вып. 1

Главный редактор  
А. Ф. Титов

Редакционный совет

В. Т. Вдовицын, Т. Вихавайнен, А. В. Воронин, С. П. Гриппа, Э. В. Ивантер, А. С. Исаев, В. И. Крутов, А. М. Крышень (зам. главного редактора), В. В. Мазалов, Ф. П. Митрофанов, И. И. Муллонен, Н. Н. Немова, В. В. Окрепилов, О. Н. Пугачев, Н. Н. Филатов, А. И. Шишкин, В. В. Щипцов

Editor-in-Chief  
A. F. Titov

Editorial Council

V. T. Vdovitsyn, T. Vihavainen, A. V. Voronin, S. P. Grippa, E. V. Ivanter, A. S. Isaev, V. I. Krutov, A. M. Kryshen' (associate editor), V. V. Mazalov, F. P. Mitrofanov, I. I. Mullonen, N. N. Nemova, V. V. Okrepilov, O. N. Pugachev, N. N. Filatov, A. I. Shishkin, V. V. Schiptsov

Редакционная коллегия серии «Математическое моделирование и информационные технологии»  
В. Т. Вдовицын, Ю. В. Заика, В. Ф. Колчин, В. А. Лебедев, В. В. Мазалов (отв. редактор),  
Ю. Л. Павлов, Л. А. Петросян, А. В. Соколов, Т. П. Тихомирова (отв. секретарь)

Editorial board of the «Mathematical Modeling and Information Technologies» series

V. T. Vdovitsyn, Yu. V. Zaika, V. F. Kolchin, V. A. Lebedev, V. V. Mazalov (Editor-in-charge), Yu. L. Pavlov,  
L. A. Petrosian, A. V. Sokolov, T. P. Tikhomirova (Executive Secretary)

ISSN 1997-3217

Зав. редакцией Н. В. Михайлова  
Адрес редакции: 185910 Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11  
тел. (8-8142)780109; (8-8142)769600  
E-mail: trudy@krc.karelia.ru  
Электронная полнотекстовая версия: <http://transactions.krc.karelia.ru>

---

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Методы математического моделирования и информационные технологии определяют в целом состояние фундаментальных исследований в мире, стране и отдельном регионе. Сейчас трудно представить исследователя в любой области знаний, который бы не использовал возможности Интернет, электронной почты, электронных библиотек и коллекций.

В Карелии первые шаги по использованию математических методов и вычислительной техники были предприняты еще в 1959–1961 гг., когда группа автоматики (рук. к. т. н. Н. Г. Зайцев) начала осваивать ЭВМ «Минск-1». Понимая необходимость применять вычислительную технику и математические методы, Президиум РФ АН СССР в феврале 1969 г. поддержал идею создания вычислительного центра. В июле 1969 г. при Отделе экономики КФ АН СССР была создана лаборатория математических методов и вычислительной техники. В мае 1973 г. на базе лаборатории был организован Отдел математических методов и вычислительной техники (рук. к. т. н. Г. А. Борисов), включенный в состав Института леса. В 1975 г. Президиум АН СССР принял постановление об организации Отдела математических методов автоматизации научных исследований и проектирования, который затем в 1992 г. был переименован в Отдел математики и анализа данных (рук. к. т. н. А. Д. Сорокин).

Наконец в июне 1999 г. Президиум РАН принимает постановление о создании нового института в КарНЦ РАН – Института прикладных математических исследований.

Основными направлениями исследований в новом институте стали: проблемы дискретной математики, теории вероятностей и математической статистики, математического программирования, исследование и разработка методов математического и информационного моделирования с целью решения эколого-экономических и других проблем Республики Карелия.

Данный выпуск Трудов Карельского научного центра РАН продолжает серию сборников по математическому моделированию и информационным технологиям, которые публиковались Институтом ежегодно и были посвящены решению различных проблем математического моделирования и информатики, возникающих в прикладных задачах. Таковы основные вехи становления академической математики и информатики в Карелии.

УДК 338.45:621.31(470.22)

## ХАРАКТЕРИСТИКИ И СВОЙСТВА ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ И МОЩНОСТИ НА ПЕРЕДЕЛАХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ХОЗЯЙСТВА РЕГИОНА

**Г. А. Борисов, Т. П. Тихомирова**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

Описаны функции потерь мощности технологических переделов от их нагрузки и рекурсивные зависимости потерь мощности и энергии на линеаризованной последовательности переделов топливно-энергетического хозяйства региона.

**К л ю ч е в ы е с л о в а:** потери мощности, технологические переделы, системные связи.

**G. A. Borisov, T. P. Tikhomirova. CHARACTERISTICS AND PROPERTIES OF ENERGY AND POWER LOSSES AT STEP TRANSITIONS IN THE ENERGY FACILITIES OF THE REGION**

Functions of power losses at process step transitions relative to their load, and recursive relations of power and energy losses on the linearized sequence of step transitions in the region's fuel-and-energy facilities are described.

**K e y w o r d s:** power losses, process step transitions, system connections.

---

Сегодня энергоемкость ВВП России превышает среднемировой уровень в 4,5 раза, а показатели США и ЕС – почти десятикратно [Макаров, Мелентьев, 2009]. Поставленная Энергетической стратегией России задача обеспечения роста электропотребления, снижения негативного воздействия на окружающую среду при сохранении главенствующей роли органического ископаемого топлива может быть решена только при значительном сокращении потерь энергии. Поэтому снижение энергоемкости экономики и основной ее составляющей – потерь – является главным приоритетом Энергетической стратегии России [Фортов, Фаворский, 2006].

На технологических переделах топливно-энергетического хозяйства страны теряется 84–86 % используемой первичной энергии, а в Карелии – не менее 76 % [Мелентьев, Штейнгауз,

1959; Борисов, 2006; Борисов, Тихомирова, 2009]. Большинство современных проблем топливно-энергетического хозяйства, таких как:

- низкая надежность, качество и эффективность энергоснабжения;
- дефицит инвестиций и мощностей;
- негативное воздействие на окружающую среду;
- высокая стоимость энергообеспечения социальной и производственной сферы обусловлены преимущественно не объемами полезно используемых конечных видов энергии, а потерями ее.

Поскольку электроэнергетическое хозяйство является сложной системой с многочисленными и разнообразными связями, то детальное изучение этих связей с целью повышения энергетической эффективности системы экспериментально практически исключено. Ввиду этого становится необходимым создание математических моделей,

описывающих все разнообразие и сложное взаимодействие потерь мощности и энергии всех или хотя бы основных составляющих сложного топливно-энергетического хозяйства, в качестве которых по степени однородности, информационной обеспеченности, специфичности технологических процессов преобразования энергии и существующей организационной административной структуре следует выбрать технологические переделы его. Статья посвящена описанию количественных характеристик потерь (или технологических расходов) на отдельных технологических переделах регионального топливно-энергетического хозяйства, а также системных взаимосвязей в нем. Потери рассматриваются на примере топливно-энергетического хозяйства Карелии.

Для адекватного отображения свойств технологических переделов с целью построения математической модели системы, которую они образуют, не подходят известные математические модели для планирования ТЭКа [Баринов, Совалов, 1990], основанные на использовании на каждом переделе усредненных нормативных удельных расходов первичной энергии и, соответственно, удельных затрат на получение единицы вторичной энергии. Принятый в экономике энергетики период фиксирования нормативных удельных расходов на переделах равен одному году. Такой большой период измерений сглаживает все изменения их в течение года, какими бы большими они ни были. Это приводит к невозможности учесть изменчивость потерь в зависимости от режимов работы, влияния смежных переделов на их уровень.

В связи со сказанным модели переделов должны в целом описывать мгновенные значения потерь мощности в каждом из них и расхода на собственные нужды в зависимости от величины нагрузки и других сильно влияющих на потери параметров. На технологическом уровне электроэнергетического хозяйства с его быстро протекающими безинерционными процессами, всегда сбалансированными по генерации и потреблению мощности в нормальном режиме, принят период фиксации технологических параметров, в том числе и мощности, равный одному часу. Детализация описания должна доходить до каждого технологического передела. Ввиду этого для построения математической модели энергетического хозяйства необходимы модели его элементов-переделов, характеризующие зависимости на них потерь мощности.

Основные функции технологических переделов заключаются в изменении (преобразовании) вида или параметров энергии, сопровождающих-

ся в той или иной степени потерями энергии и мощности. Потери мощности и расходы на собственные нужды (далее потери) возникают вследствие различных физических явлений. Ввиду этого решение нашей основной задачи – количественно определить их величину в зависимости от протекания множества различных физических процессов, параметры которых многочисленны и часто неизвестны, становится таким способом невозможным. Более предпочтителен путь, когда величина потерь мощности определяется в зависимости от основного энергетического параметра – мощности. Этот путь является основным и в сложившейся практике оперативно-диспетчерского и технологического управления [Баринов, Совалов, 1990], когда требуется оценить энергетическую эффективность различных элементов энергетического хозяйства. Для этого можно использовать две характеристики – расходную характеристику передела и зависимость потерь мощности от нагрузки передела.

Рассмотрим расходную характеристику  $i$ -го передела топливно-энергетического хозяйства. Он представляет собой нелинейную функцию мощности  $P_{i-1}$ , поступающей на элемент системы от его выходной мощности  $P_i$ , т. е.  $P_{i-1} = f(P_i)$ . Функция во всем диапазоне допустимого изменения нагрузки является дифференцируемой, выпуклой, монотонно возрастающей, что позволяет находить минимальные значения суммы подобных функций.

Ввиду отсутствия идеальных элементов и обязательного наличия потерь всегда

$$P_{i-1} > P_i, \quad (1)$$

$$P_{i-1} = P_i + \Delta P_i, \quad (2)$$

где  $\Delta P_i$  – потери мощности в  $i$ -м элементе системы.

Потери  $\Delta P_i$  могут быть разделены на две составляющие – постоянную и переменную, зависящую от величины выходной мощности (нагрузки) передела  $P_i$ . Постоянная составляющая образуется так называемыми потерями холостого хода  $\Delta P_{0i}$ , идущими у электромашин на различные виды трения, у электрических аппаратов переменного тока на потери мощности холостого хода, обусловленные вихревыми токами магнитопроводов, у линий электропередач высокого напряжения переменного тока – тлеющим разрядом проводов.

Переменная составляющая потерь мощности обычно представляется нелинейной функцией с положительной второй производной, характеризующей увеличенное возрастание потерь в сравнении с ростом нагрузки, характерное в электрических, газодинамических и гидравлических агрегатах. В

электрических машинах, аппаратах и проводах это потери «в меди» ( $\Delta P_m$ ), изменяющиеся квадратично относительно нагрузки. Также квадратично относительно нагрузки (подачи) изменяются газо- и гидродинамические потери в трубопроводах. В сложных газо-, паро- и гидроустановках расходные характеристики имеют степенную зависимость от 3-й до 6-й степени [Шичков, 2006].

Можно утверждать, что положительность второй производной функции потерь в элементе от нагрузки является общим свойством всех переделов, так при отрицательной второй производной расходная характеристика кривая АВ пересечет линию  $P_{i-1} = P_i$  и тогда количество отводимой энергии будет больше подводимой (рис. 1), а к.п.д. превысит 100 %.

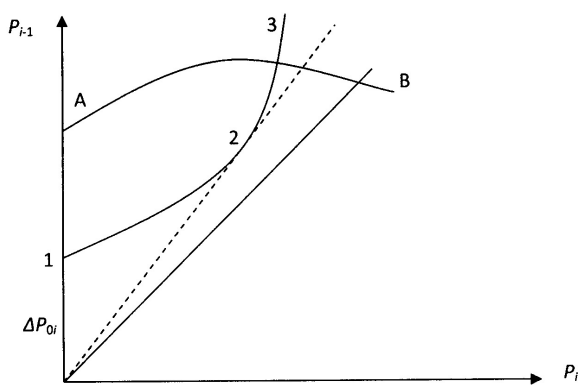


Рис. 1. Расходная характеристика передела

В крайнем случае этот вид потерь ( $\Delta P_m$ ) может быть принят линейным относительно нагрузки  $P_i$ , если нелинейные свойства слабо выражены.

В общем виде расходная характеристика  $i$ -го передела может быть описана с достаточной степенью точности полиномом  $m$ -й степени с положительной второй производной и постоянной составляющей:

$$P_{i-1} = \Delta P a_{0,i} + a_{1,i} \cdot P_i + a_{2,i} \cdot P_i^2 + \dots + a_{m,i} \cdot P_i^m \quad (3)$$

Степени полинома для различных переделов приведены далее в формулах (4) – (14).

У такой характеристики две особые точки (см. рис. 1). В точке 1 при  $P_i=0$  у  $i$ -го передела при нулевой нагрузке имеются потери холостого хода  $\Delta P_{0i}$ . В точке 2, образованной касательной из начала координат к расходной характеристике — самый высокий к.п.д.

Общий вид (1–2–3) расходной характеристики подходит для адекватного представления расходных характеристик различных переделов

в соответствии с имеющимися представлениями [Борисов, Тихомирова, 2009]. Рассмотрим их конкретные формы на различных переделах с выделением составляющей на потери и собственные нужды для структуры переделов, характерных для топливно-энергетического хозяйства Республики Карелия.

Потребляемая мощность при добыче ископаемых топлив характеризуется зависимостью:

$$P_0 = (1 + a_{01}) \cdot P_1, \quad (4)$$

где расход на собственные нужды и потери  $\Delta P = a_{01} \cdot P_1$ ,

$a_{01}$  — доля расхода на собственные нужды от выдаваемой мощности.

При транспортировке твердых топлив

$$P_1 = (1 + a_{02} + a_{12} \cdot l_2) \cdot P_2,$$

$$\Delta P_1 = a_{02} \cdot P_2 + a_{12} \cdot l_2 \cdot P_2, \quad (5)$$

где  $a_{02}$  — доля расхода на собственные нужды, связанные с погрузкой и хранением его;

$a_{12}$  — удельные расходы топлива на транспорт [Эксергические расчеты..., 1991];

$l_2$  — расстояние транспортировки.

При транспортировке жидкого и газообразного топлива [Селезнев и др., 2007]

$$P'_1 = P'_2 + \Delta P'_2,$$

$$\Delta P'_2 = \Delta P_{nc} + \Delta P_{тр} = a'_{02} + a'_{12} P_3 + a'_{22} P_2^2 + a'_{32} P_2^3, \quad (6)$$

где  $P_{nc}$  — потери мощности на перекачивающей (насосной или газокompрессорной) станции,

$$P_{nc} = a'_{02} + a'_{12} P_3 + a'_{32} P_2^3, \quad (7)$$

$P_{тр}$  — потери мощности в трубопроводе [Селезнев и др., 2007],

$$P_{тр} = a'_{22} P_2^2, \quad (8)$$

$a'_{22}$  — гидравлическое или аэродинамическое сопротивление трубопровода.

Потребляемая мощность и ее потери в агрегатах тепловых и гидравлических станций [Мелентьев, Штейнгауз, 1959]

$$P_2 = P_3 + \Delta P_3;$$

$$\Delta P_3 = a_{03} + a_{13} P_3 + a_{23} P_3^2 + a_{33} P_3^3. \quad (9)$$

Потребляемая мощность и ее потери в линиях электропередач и трансформаторах электрических сетей

$$P_3 = P_4 + \Delta P_4,$$

$$\Delta P_4 = (a_{04} + a_{24} P_4) P_4, \quad (10)$$

где  $a_{04} P_4$  — потери мощности в «стали»;

$a_{24} P_4^2$  — потери мощности в «меди».

Потребляемая мощность и ее потери при преобразовании электроэнергии в световую энергию

$$P_4 = P_5 + \Delta P_5, \quad (11)$$

$$\Delta P_5 = P_5 (1 - \eta), \quad (12)$$

где  $\eta$  – к.п.д. источника света.

При преобразовании электроэнергии в механическую без регулирования частоты, напряжения потребляемая мощность и потери ее

$$P'_4 = P'_5 + \Delta P'_5,$$

$$\Delta P'_5 = P'_0 + M_{\text{сопр}} \cdot \omega, \quad (13)$$

где  $\omega = 2\pi f$  – круговая частота;

$P'_0$  – потери холостого хода;

$M_{\text{сопр}}$  – момент сопротивления на валу рабочего механизма.

Потребляемая мощность и ее потери при преобразовании электроэнергии в механическую с регулированием частоты [Шичков, 2006]

$$P''_4 = P''_5 + \Delta P''_5,$$

$$\Delta P''_5 = a''_{05} + a''_{15}P_5 + a''_{23}P_5^2 + a_{35}P_5^3 + a_{45}P_5^4 + a_{55}P_5^5 + a_{65}P_5^6 \quad (14)$$

Наличие в полиномах расходных характеристик или в характеристиках потерь членов второй степени и выше приводит к увеличению составляющей потерь энергии на переделе, зависящей от неравномерности графика нагрузки, характеризующейся в электрических сетях увеличением коэффициента формы графика (суточного, годового) [Красновский, 1988]. При увеличении показателя степени и коэффициента члена полинома характеристики потерь влияние неравномерности графиков нагрузки возрастает.

Это свойство – влияние неравномерности графика нагрузки на рост величины потерь, квадратных относительно нагрузки, выявлено только у переменной части потерь в электрических сетях, чему посвящено несколько десятков работ, проанализированных в работе [Арутюнян, 2007].

Согласно одной из этих работ [Красновский, 1988], можно оценить меру влияния неравномерности графика нагрузки на технологический расход энергии в линиях электропередачи по графикам, показывающим, во сколько раз при неравномерном графике они больше при передаче той же энергии по равномерным графикам.

В нашей работе [Борисов, 1965] было показано, что и незначительные по величине случайные колебания нагрузки на гидро- и турбоагрегатах, вызванные колебаниями частоты системы и работой регуляторов мощности агрегатов, так-

же приводят к увеличению потерь мощности и увеличенному потреблению топлива на электростанциях.

Значит, имея в виду нелинейность характеристик потерь и неравномерность графиков нагрузок в системах энергоснабжения, можно с уверенностью полагать, что на каждом технологическом переделе с нелинейными расходными характеристиками происходит рост потерь энергии, вызванный временной неравномерностью нагрузок, который не учитывается при использовании нормативных усредненных показателей расходуемой энергии переделов.

Рассмотрим теперь последовательность технологических переделов.

В работах отечественных ученых [Баринов, Совалов, 1990] был предложен, обоснован и использован ряд приемов, упрощающих модели энергетических систем, построенных применительно к решению различных инженерных задач на основе пренебрежения (по сравнению с полной моделью) теми или иными факторами, оказывающими несущественное влияние на исследуемые параметры. Другой важной составляющей упрощающих модель приемов является энергетическое эквивалентирование. Построение эквивалентированных энергетических характеристик основывается на методах оптимизации режима эквивалентированной части электроэнергетической системы, которые получаются в результате наивыгоднейшего распределения нагрузок между агрегатами и электростанциями этой части энергосистемы, а также эквивалентные характеристики электрической сети, представляющие собой линеаризованную зависимость потерь сети от активных мощностей электростанций и потребляемых нагрузок.

Пределом упрощающих и эквивалентированных процедур при моделировании топливно-энергетического хозяйства для исследования потерь энергии может быть обобщенная линеаризованная модель системы, оценки потерь энергии в различных технологических переделах приведены в работах [Борисов, 2006; Макаров, Мелентьев, 1973]. Очевидно, что использование для исследования свойств потерь в целях дальнейшего их снижения в качестве объекта региона представляется более доступным по получению информации и объемам вычислений и в то же время представительным по полноте описания связей между переделами.

Представим топливно-энергетическое хозяйство региона (рис. 2) в виде линейной последовательности переделов, как это выпол-



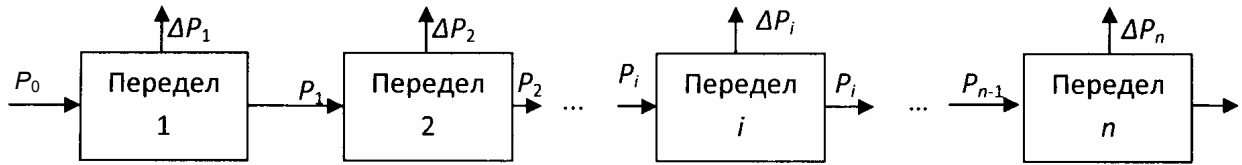


Рис. 2. Линейная последовательность переделов топливно-энергетического хозяйства

нено в работах [Борисов, 2006; Борисов, Тихомирова, 2009].

Рассмотрим потоки мощности на линейной последовательности переделов топливно-энергетического хозяйства. Исходя из баланса мощности, потребляемая мощность источника первичной энергии

$$P_0 = P_n + \sum_{j=1}^n \Delta P_j. \quad (15)$$

Потребляемая на  $i$ -м переделе мощность  $P_{i-1}$  составит

$$P_{i-1} = P_n + \Delta P_n + \Delta P_{n-1} + \dots + \Delta P_i, \quad (16)$$

$$i = 0, 1, \dots, n-1,$$

$$\text{тогда } P_i = P_n + \sum_{j=i+1}^n \Delta P_j, \quad (17)$$

$$i = 0, 1, \dots, n-1.$$

Причем надо иметь в виду, что выходная мощность на каждом переделе является вложенной функцией от выходной мощности последующего:

$$\begin{aligned} P_{n-1} &= P_n + \Delta P_n(P_n), \\ P_{n-2} &= P_{n-1} + \Delta P_{n-1} = \\ &= P_n + \Delta P_n(P_n) + \Delta P_{n-1}(P_{n-1}), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} P_i &= P_n + \Delta P_n + \dots + \Delta P_{i+1} = \\ &= P_n + \Delta P_n(P_n) + \dots + \Delta P_{i+1}(P_{i+1}) \end{aligned}$$

Линейная последовательность технологических переделов является обратной рекуррентной последовательностью, когда нагрузка каждого передела зависит от суммы нагрузки и потерь последующего.

Потребность в энергии  $i$ -го передела получается интегрированием уравнения (17):

$$W_i = \int_0^T P_i dt = \int_0^T P_n dt + \sum_{j=i+1}^n \int_0^T \Delta P_j dt. \quad (19)$$

В практике управления используется ежечасное фиксирование нагрузок по мощности в пределах одного года. Тогда

$$W_i = \Delta t \cdot \sum_{k=1}^{8760} P_{nk} + \Delta t \cdot \sum_{j=i+1}^n \sum_{k=1}^{8760} \Delta P_{jk}, \quad (20)$$

где  $P_{nk}$  – конечная мощность  $n$ -го передела в  $k$ -й час года;

$\Delta P_{jk}$  – потери мощности передела в  $k$ -й час года;  $\Delta t$  – промежуток времени, равный часу.

Коммерческий учет фиксирует в точках раздела ответственности собственников показания счетчиков энергии, по которым определяются ежегодное получение и отпуск энергии по линиям электропередачи, газо- и нефтепроводам.

Формула (20), определяющая количество энергии на выходе  $i$ -го передела, одновременно определяет объем годовых продаж энергии  $i$ -го передела и объем годовых закупок энергоносителей  $i+1$  передела.

При существующем государственном регулировании тарифов на многие энергоносители их изменение происходит не чаще одного раза в год. В пределах этого периода при неизменном тарифе  $\tau_{i-1}$  затраты на покупку энергоносителя (топливная составляющая себестоимости электростанций, котельных) на  $i$ -м переделе

$$\begin{aligned} U_i &= \tau_{i-1} \cdot W_{i-1} = \\ &= \tau_{i-1} \cdot \Delta t \cdot \left( \sum_{k=1}^{8760} P_{nk} + \sum_{j=i}^n \sum_{k=1}^{8760} \Delta P_{jk} \right) \end{aligned} \quad (21)$$

Выручка  $i$ -го передела от продажи его энергии составит при тарифе  $\tau_i$

$$\begin{aligned} B_i &= \tau_i \cdot W_i = \\ &= \tau_i \cdot \Delta t \cdot \left( \sum_{k=1}^{8760} P_{nk} + \sum_{j=i+1}^n \sum_{k=1}^{8760} \Delta P_{jk} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

Прибыль  $i$ -го передела [Клер и др., 2001]

$$\begin{aligned} \Pi_i &= (B_i - U_i - Z_i - K_i \cdot (a^a + a^n)) \cdot \\ &\cdot (1 - a^{nn}) \end{aligned}, \quad (23)$$

где  $Z_i$  – годовой фонд заработной платы на  $i$ -м переделе;

$K_i$  – суммарные капиталовложения;

$a^a$  – доля годовых амортизационных отчислений от капиталовложений;

$a^n$  – доля постоянной части годовых эксплуатационных издержек;

$a^{nn}$  – доля налога на прибыль.

С учетом формул (21) и (22)

$$\begin{aligned} P_i &= (\tau_i \cdot W_i - \tau_{i-1} \cdot W_{i-1} - Z_i - \\ &\quad - K_i \cdot (a^a + a^n)) \cdot (1 - a^{nn}) = \\ &= ((\tau_i - \tau_{i-1})(W_n + \sum_{j=i+1}^n \Delta W_j) - \\ &\quad - \Delta W_i \cdot \tau_{i-1} - Z_i - K_i \cdot (a^a + a^n)) \cdot \\ &\quad \cdot (1 - a^{nn}) \end{aligned} \quad (24)$$

Существенно различаются по функциям, техническим и финансово-экономическим показателям два состояния системы.

Если в первом бездефицитном состоянии ее конечная мощность  $P_n$  меньше располагаемой, т. е.  $P_{расч\ n} < P_n$ , то имеется резервная  $P_{рез\ n} = P_{расч\ n} - P_n$ .

При появлении дополнительной потребности в конечной мощности  $y_n$ , меньшей или равной резервной ( $y_n \leq P_{рез\ n}$ ), потребуются лишь увеличение текущих значений мощности и издержек на всех предшествующих переделах, которые приведут к увеличению издержек конечного пользователя на величину  $I_n = y_n \cdot \tau_n \cdot T_n$ , где  $\tau_n$  – тариф на конечный вид энергии;  $T_n$  – время использования дополнительной мощности. Если система находится во втором состоянии, то резерва располагаемой мощности нет  $P_{рез\ n} = P_{расч\ n} - P_n = 0$ .

При исчерпании резерва системы обеспечение дополнительной потребности может происходить по двум вариантам.

При традиционном варианте системы для обеспечения дополнительной потребности необходим на последнем переделе ввод дополнительной мощности  $y_n$ . На промежуточных  $i$ -х переделах ввод мощности составит:  $y_i = P_{i-1}(P_i + y_i) - P_{i-1}(P_i)$ . Для ввода дополнительных мощностей в системе потребуются инвестиции:

$$\begin{aligned} K_1(y_n) &= k_n y_n + k_{n-1} y_{n-1} + \dots + \\ &\quad + k_i y_i + \dots + k_1 y_1 \end{aligned} \quad (25)$$

где  $k_i$  – удельные капиталовложения на единицу установленной мощности и далее

$$\begin{aligned} K_1 &= k_n y_n + k_{n-1} \cdot P_{n-1} (P_{n-2} + y_{n-2}) - \\ &\quad - P_{n-1} (P_{n-2}) + \dots \\ &\quad + k_i \cdot P_{i-1} (P_i + y_i) - \\ &\quad - P_{i-1} (P_i) + \dots \\ &\quad + k_i \cdot P_0 (P_1 + y_1) - P_0 (P_1). \end{aligned} \quad (26)$$

Считая, что вводится на  $i$ -м переделе дополнительно величина мощности  $y_i$  второго порядка малости, не изменяющая коэффициент полезного использования  $k_{mui}$  на каждом переделе, формулу (25) можно записать приближенно в виде:

$$\begin{aligned} K_1(y_n) &= k_n y_n + k_{n-1} \frac{y_n}{k_{nu(n-1)}} + \dots \\ &\quad + k_i \frac{y_n}{\prod_{i=n}^{i=i} k_{mui}} + \dots + k_1 \frac{\Delta y_n}{\prod_{i=1}^{i=n-1} k_{mui}} \end{aligned} \quad (27)$$

Кроме того, рост потребляемой на каждом переделе мощности потребует увеличения издержек системы на всех переделах, пропорциональных увеличению мощности каждого передела. Рост издержек при регулируемых тарифах будет происходить за счет роста мощности на первом и последующих переделах и составит по всей системе величину не меньше  $I_1 = \tau_n \cdot y_n \cdot T_{исп\ n}$ , где  $\tau_n$  – стоимость конечной энергии;  $T_{исп\ n}$  – число часов использования мощности последнего передела;  $y_n$  – дополнительная мощность.

При энергосберегающем варианте обеспечение дополнительной мощности  $y_n$  возможно за счет снижения потерь последнего передела на величину  $-y_n$ . Для реализации такого пути потребуются инвестиции на осуществление энергосберегающего мероприятия только на этом переделе  $K_2(y_n) = K_n(|-y_n|)$ , а издержки на всех переделах останутся неизменными.

В итоге первый вариант приращения мощностей потребует инвестиции на всех переделах и увеличения издержек  $K_1(y_n)$  и  $I_1$ . Второй вариант – инвестиций только на последнем переделе  $K_2(y_n)$  и оставит неизменными издержки.

При  $K_1(y_n) > K_2(y_n)$  и  $I_1 > I_2$  ( $I_2=0$ ) второй вариант абсолютно эффективен.

При условии  $K_1(y_n) < K_2(y_n)$  и  $I_1 > I_2$  требуется оценка их по чистому дисконтированному доходу:

$$\text{ЧДД} = K_2(y_n) - K_1(y_n) + \sum_{t=1}^{t=T} \frac{I_t}{(1+E)^t} \quad (28)$$

и срокам возврата кредитов, полученных на энергосберегающие мероприятия.

## Выводы

1. Расходные характеристики переделов топливно-энергетического хозяйства или их потери являются непрерывными, выпуклыми, монотонно возрастающими функциями от нагрузки, хорошо аппроксимируемыми полиномами  $m$ -й степени.

2. Благодаря членам полинома второй и выше степени потери энергии на переделах зависят как от среднего значения мощности, так и ее неравномерности, поэтому оценки потерь необходимо проводить по мгновенным или текущим значениям мощности.

3. Линейная последовательность переделов не имеет интегральных звеньев в большей части передела и является рекуррентной последовательностью, когда нагрузка каждого передела зависит от нагрузки и потерь последующего, а в конце концов от потребителя конечного вида энергии.

4. Потери мощности и энергии в абсолютном значении растут от конечного потребителя к первичному источнику, затраты в относительном и абсолютном значении наоборот. Вследствие этого конечный покупатель оплачивает все потери на предшествующих переделах.

5. При снижении конечного энергопотребления снижается прибыль на всех предшествующих переделах производственной части топливно-энергетического хозяйства.

6. Ввиду удаленных взаимосвязей финансово-экономические оценки энергосберегающих мероприятий в условиях отсутствия в системе резервов резко повышают свою эффективность за счет инвестиций на ввод новых мощностей на начальных переделах.

7. Существующие в соответствии с Киотским протоколом оценки выбросов парниковых газов, сжигающих топливо, привязанные к переделам, не учитывают основную первопричину их появления – потери энергии, являющиеся первопричиной выбросов парниковых газов в топливно-энергетическом хозяйстве.

8. На линейной последовательности переделов рыночные механизмы получения максимума прибыли стимулируют максимальное энергопотребление.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

**Борисов Георгий Александрович**,  
старший научный сотрудник, к. т. н.,  
Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: borisov@krc.karelia.ru  
тел.: (8142)766312

**Тихомирова Тамара Петровна**,  
ученый секретарь, к. т. н.,  
Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: tihomiro@krc.karelia.ru  
тел.: (8142)766312

#### Литература

*Арутюнян А. А.* Основы энергосбережения. М.: ЗАО «Энергосервис», 2007. 600 с.

*Баринов В. А., Совалов С. А.* Режимы энергосистем: Методы анализа и управления. М.: Мир, 1990. 440 с.

*Борисов Г. А.* Метод расчета оптимальных уставок регуляторов скорости гидро- и турбоагрегатов // Электрические станции. 1965. № 5. С. 49–51.

*Борисов Г. А.* Анализ эффективности энергетического хозяйства (на примере Карелии) // Труды КарНЦ РАН. Петрозаводск, 2006. Вып. 9. С. 3–8.

*Борисов Г. А., Тихомирова Т. П.* Структурный анализ потерь энергии в электроэнергетическом хозяйстве Карелии // Ученые записки Петр ГУ. 2009. № 9(103). С. 93–97.

*Клер А. М., Деканова Н. П., Санеев Б. Г.* и др. Оптимизация развития и функционирования автономных энергетических систем. Новосибирск: Наука, 2001. 144 с.

*Красновский А. З.* Моделирование графиков электрических нагрузок // Электрические станции. 1988. № 10. С. 41–46.

*Макаров А. А., Мелентьев Л. А.* Методы исследования и оптимизации энергетического хозяйства. Новосибирск: Наука, 1973. 274 с.

*Мелентьев Л. А., Штейнгауз Е. О.* Экономика энергетики СССР. М.; Л.: Госэнергоиздат, 1959. 396 с.

*Слезнев В. Е., Алешин В. В., Прялов С. Н.* Математическое моделирование трубопроводных сетей и систем каналов: методы, модели, и алгоритмы / ред. В. Е. Слезнева. М.: МАКС Пресс, 2007. 695 с.

*Фортон В. Е., Фаворский О. Н.* Состояние и основные проблемы энергетики России / Энергетика России: проблемы и перспективы: труды научной сессии РАН (Общее собрание РАН 19–21 декабря 2005 г.). М., 2006. С. 13–20.

*Шичков Л. П.* Электрический привод. М.: КолосС, 2006. 279 с.

Эксергические расчеты технических систем: справочное пособие. Киев: Наук. думка, 1991. 360 с.

#### **Borisov, George**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian  
Research Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: borisov@krc.karelia.ru  
tel.: (8142)766312

#### **Tikhomirova, Tamara**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian  
Research Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: tihomiro@krc.karelia.ru  
tel.: (8142)766312

УДК 681.3

## ОНТОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТЕНТА ЭЛЕКТРОННОЙ БИБЛИОТЕКИ КарНЦ РАН

**В. Т. Вдовицын, В. А. Лебедев**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

Рассмотрены пути развития информационных ресурсов электронной библиотеки КарНЦ РАН с использованием методов онтологического моделирования. При этом содержание коллекций документов согласуется с онтологией и определяется степенью изученности природных объектов Карелии. Электронная научная информация автоматически индексируется при помощи предметных онтологий. Это позволяет использовать онтологию для построения запросов контекстного поиска документов.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** онтология, термины, контент, электронная библиотека, индексация, интеграция, тематический поиск релевантных документов.

### **V. T. Vdovitsyn, V. A. Lebedev. ONTOLOGICAL MODELING OF KARELIAN RESEARCH CENTRE'S DIGITAL LIBRARY CONTENT**

The ways to develop DL information resources by the method of ontological modeling are considered. The contents of document collections agree with the ontology and depend on the level of knowledge about the respective objects in Karelia. Scientific publications are indexed automatically by means of subject ontology. This enables application of the ontologies for building contextual search queries.

**K e y w o r d s :** ontology, terms, content, digital library, indexing, integration, thematic search for relevant documents.

---

### **Введение**

Технология электронных библиотек (ЭБ) [Arms, 2000] позволяет создать наряду с коллекцией электронных научных публикаций сотрудников институтов КарНЦ РАН сетевой энциклопедический справочник по изученности природных и культурно-исторических объектов и систем Карелии. Содержание (контент) такого справочника будет способствовать как поддержанию и развитию научных исследований и специального образования, так и укреплению научного престижа КарНЦ РАН. Для создания

такого справочника необходимо выполнение двух следующих основных условий:

- реализация технологии ЭБ в виде полнофункционального интернет-портала,
- разработка модели создаваемого электронного ресурса (справочника), обеспечивающей актуальность, достоверность и полноту его контента, а также технологии создания контента на базе этой модели.

Технологическая основа портала ЭБ КарНЦ РАН создавалась и апробировалась на протяжении ряда лет и в настоящее время успешно

функционирует [Вдовицын и др., 2004, 2005, 2006]. Она обеспечивает выполнение следующих функций: создание электронных коллекций, последовательное наполнение их документами с одновременным формированием унифицированных метаданных для обеспечения последующего доступа к документам. При этом для каждой подключаемой коллекции может быть разработана онтология для тематического поиска, что обеспечивается соответствующей технологией [Лебедев и др., 2004, 2005; Вдовицын и др., 2007; Вдовицын, Лебедев, 2008].

Разработка моделей информационных ресурсов является одним из эффективных средств систематизации контента ЭБ. При этом модель представляет собой словарь терминов с указанием их взаимосвязей (тезаурус, таксономия, онтология), разработка которых признана сообществом экспертов приоритетной для России [Перспективные направления, 2007]. Для разработки модели справочника используется методология онтологического моделирования [Вдовицын и др., 2007; Вдовицын, Лебедев, 2008], созданная на основе обобщения опыта возникновения онтологий коллекций ряда природных ресурсов Карелии.

**Онтология** (Шаблон: Lang-neolat от др.-греч.  $\omega\nu$  род. п.  $\omega\nu\tau\omicron\varsigma$  – сущее, то, что существует и  $\lambda\omicron\gamma\omicron\varsigma$  – учение, наука) – раздел философии, изучающий проблемы бытия; наука о сущем.

В информатике под онтологией подразумевается эксплицитная, т. е. явная, спецификация концептуализации, где в качестве концептуализации выступает описание множества объектов и связей между ними [Gruber, 1993; Ushold, Gruninger, 1996].

Онтология, таким образом, представляет собой попытку наиболее общего описания универсума существующего, который не ограничивался бы данными отдельных наук и, возможно, не сводился бы к ним. Можно выделить три уровня представления онтологий.

- Мета-онтология – описывает наиболее общие понятия, которые не зависят от предметных областей.
- Онтология предметной области – формальное описание предметной области, обычно применяется для того, чтобы уточнить понятия, определенные в мета-онтологии (если используется) и/или определить (зафиксировать) общую терминологическую базу предметной области.
- Онтология конкретной задачи – онтология, определяющая общую терминологическую базу задачи, проблемы.

Построение онтологий осуществляется при помощи языка описания онтологий. Самым известным из них является язык OWL [Загорюлько, 2008].

Формально онтология определяется как

$O = \langle X, R, F \rangle$ , где

$X$  – конечное множество понятий предметной области,

$R$  – конечное множество отношений между понятиями,

$F$  – конечное множество функций интерпретации.

Как видно, по форме – это определение графа с помеченными вершинами, где  $X$  – множество вершин,  $R$  – множество дуг,  $F$  – множество помет. Значения помет интерпретируется некоторой функцией (функциями).

Онтологию можно интерпретировать как иерархический граф связей терминов, принятых в предметных областях, с их толкованиями, пометами и функциями интерпретации помет [Фазлиев, 2008]. Основание: природные объекты, подлежащие описанию в ЭБ, обладают иерархической структурой, множество их свойств изучает комплекс научных дисциплин, иерархически соподчиненных, что и отображается в графе связей терминов.

В составе ЭБ КарНЦ РАН в первую очередь разрабатываются предметные онтологии по геологии, водным ресурсам, ботанике, зоологии, экологии, почвоведению, лесоведению и лесоводству. Они будут использоваться для:

- формирования комплекса коллекций документов по изученности природных объектов и систем Карелии;
- формирования толкований значений комплекса терминов научных дисциплин, а также их взаимосвязей;
- обеспечения автоматической индексации документов коллекций для последующего поиска;
- построения запросов на поиск релевантных документов.

Очевидно, что для реализации этих целей необходима соответствующая технология, включающая функции создания и редактирования онтологий, коллекций документов, индексирования документов, построения запросов на поиск и осуществление поиска релевантных запросу документов.

Ряд функций указанных технологий нами был осуществлен ранее и опубликован в серии докладов на российских конференциях [Лебедев

и др., 2004, 2005; Вдовицын и др., 2007; Вдовицын, Лебедев, 2008]. В работе излагаются решения и схемы технологий новых функций.

### Построение онтологической модели

Онтологическая модель контента ЭБ представляет собой совокупность онтологий предметных областей (наук или научных дисциплин), объединяемых рубрикатором ГРНТИ.

Для обеспечения достоверности, актуальности и полноты предметных онтологий необходимо разработать методологию их создания, соответствующую целям ЭБ.

В качестве основы методологии принята следующая парадигма.

Изучаемые природные объекты Карелии подразделяются на классы в соответствии с классификацией наук и научных дисциплин (например, по рубрикатору ГРНТИ). Каждый класс объектов характеризуется некоторым набором свойств (атрибутов), принимающих значения из соответствующих областей (доменов). Некоторые подмножества свойств объявляются признаками и используются непосредственно или их значения для различных классификаций объектов внутри класса. Множество свойств объектов разбивается на группы (темы), изучение которых является предметом соответствующей научной дисциплины.

Каждый объект вступает во взаимодействие с другими объектами, что является основой для выделения различных систем и подсистем. В системах объекты выполняют некоторые роли (функции), которые могут иметь различные оценочные названия (враги, союзники и т. п.), или выражаются соответствующими формулами.

Каждый объект любого класса обладает некоторым строением, т. е. состоит из набора частей (объектов), вступающих во взаимодействия и является системой (агрегатом).

Выделяют внешнее строение (морфологию) и внутреннее (анатомию).

Взаимодействие объектов в системах в некотором масштабе времени может быть неиз-

менным (статика) или меняющимся (динамика). Разделение взаимодействий объектов на классы и виды определяется в соответствующих научных дисциплинах. Статика определяет устойчивость, а динамика (процессы) – внешнее поведение (этологию), внутреннее функционирование (физиологию), происхождение, становление (генетика, генезис). Термины в скобках здесь понимаются расширительно, в предметных областях они конкретизируются и детализируются.

Методология построения предметных онтологий, основанная на данной парадигме, определяет структуру графа связей понятий (точнее терминов) предметной области.

Для построения предметной онтологии необходимо установить номенклатуру (список) свойств (атрибутов) объектов класса, изучаемую данной научной дисциплиной. Затем определить их домены. Выделить свойства и/или части объекта – признаки, участвующие в классификациях, предварительно установив список классификаций и номенклатуры их классов. При необходимости зафиксировать соответствие (например, в виде табличной функции) значений признаков и классов.

Некоторые термины являются многословными сочетаниями (например, сухие сосновые и смешанные леса, сырые засфагненные луга). Такого рода термины будем трактовать как конкатенацию названий классов различных независимых классификаций. В тех же примерах: леса, луга – типы растительности; сухие, сырые – классы по влажности; сосновые, засфагненные – классы по преобладающим видам растений (эдификаторам).

Для обеспечения удобства поиска такого рода классификации в составе таксономии разнятся по уровням иерархии. В запросе они представляются в виде конъюнктивной (например, сырые  $\wedge$  засфагненные  $\wedge$  луга) или конъюнктивно-дизъюнктивной формы (например, сухие  $\wedge$  (сосновые  $\vee$  смешанные)  $\wedge$  леса (рис. 1).

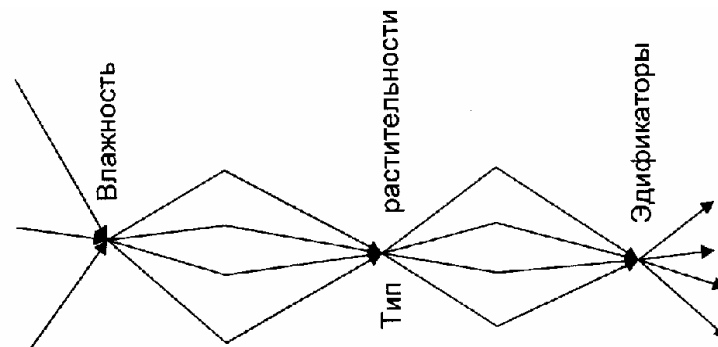


Рис. 1. Отображение классификации местообитаний по ряду независимых оснований

Далее следует устанавливать термины и названия, относящиеся к морфологии, анатомии, этологии и физиологии, т. е. зафиксировать номенклатуры названий частей объектов и систем, их функции и оценки. При этом учитываются следующие типы отношений: классификации, агрегации, синонимии и полисемии. Технология, реализующая указанную методологию, состоит в следующем:

- Корневые понятия (термины) предметных областей принимаются по рубриктору ГРНТИ.
- Начиная с корневых понятий, организуем поиск их значений (толкований) в Интернет или словарях.
- Используя найденное толкование, выделяем в нем термины более детальных понятий и ищем их толкования.
- Поступаем аналогично с терминами следующего уровня. И так до уровня значений свойств.
- В процессе поиска и нахождения терминов и их толкований фиксируем термин и URL статьи с наиболее полным толкованием его значения в связи с термином предыдущего уровня (рис. 2).

Ботаника	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Ботаника">http://ru.wikipedia.org/wiki/Ботаника</a>
Биомеханика	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Биомеханика">http://ru.wikipedia.org/wiki/Биомеханика</a>
Биоценология	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Биоценология">http://ru.wikipedia.org/wiki/Биоценология</a>
Бриология	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Бриология">http://ru.wikipedia.org/wiki/Бриология</a>
Вирусология	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Вирусология">http://ru.wikipedia.org/wiki/Вирусология</a>
Генетика	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Генетика">http://ru.wikipedia.org/wiki/Генетика</a>
Геоботаника	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Геоботаника">http://ru.wikipedia.org/wiki/Геоботаника</a>
Гидробиология	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Гидробиология">http://ru.wikipedia.org/wiki/Гидробиология</a>

Рис. 2. Вид словаря терминов со ссылками на интернет-ресурсы

- Таким образом, определяем как номенклатуру терминов и их связи, так и адреса (URL) толкований. После этого материалы передаются на экспертизу специалистам-предметникам, и по результатам экспертизы итерационно выполняется построение таксономий и механизма ссылок на толкования терминов.

В целом таксономия онтологии будет иметь структуру иерархического графа (древовидного или с полуциклами), фрагмент которого представлен на рис. 3.

Вершины графа – термины, дуги – отношения между ними (классификации и агрегации), тип отношения помечается в узле разветвления. Отношения синонимии выделены в отдельную структуру (словарь). Полисемия (т. е. наличие

одинаковых по написанию терминов) разрешается ввиду того, что такие термины могут находиться только в разных частях структуры (являются терминами разных наук).

Реализация таксономии представляется в виде таблицы (рис. 4), точнее базы данных (реляционной или объектной). Технология загрузки и редактирования таксономии и словаря синонимов отработана [Загорулько, 2008]. На рис. 5 показан пример занесения нового термина.

### Технология формирования контента ЭБ

Создание онтологических моделей дает возможность разработки системного плана развития контента ЭБ и его реализации. При этом материалы контента подразделяются на следующие категории:

- толкования терминологии;
- состояния изученности объектов и систем;
- проблемы, мероприятия, обсуждения;
- коллекции текущих публикаций.

Как указано выше, толкования терминов могут быть включены в состав ЭБ посредством ссылок на соответствующие ресурсы Интернет или словари.

Данные об изученности природных объектов и систем Карелии в основном могут быть подготовлены сотрудниками КарНЦ РАН. Однако ряд коллекций может быть импортирован из Интернет, например, такие коллекции как: минералы, горные породы, химические элементы и соединения, определение видов растений и др. Также могут быть задействованы сайты заповедников, природных парков, музеев и др.

Интеграция «сторонних» материалов состоит в том, чтобы обеспечить доступ к ним посредством поисковых сервисов, имеющихся в ЭБ. Это сервисы поиска: по названиям коллекций и их документов и с использованием онтологий (для формирования тематических запросов).

Каждая коллекция (собственная или включаемая) должна пройти процесс импортирования, который включает формирование: записи в списке коллекций и списка документов коллекции.

Записи в списке коллекций содержат название коллекции и ее URL в виде гиперссылки. Аналогично записи в списке документов также содержат их названия и гиперссылку на текст документа. Для формирования этих списков имеется соответствующая технология [Вдовичен и др., 2004, 2005, 2006].

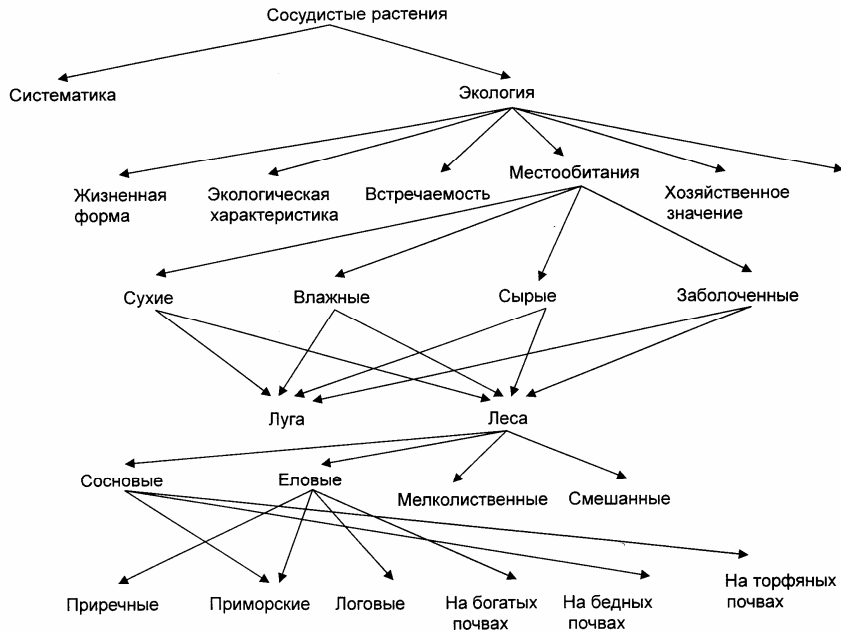


Рис. 3. Фрагмент структуры онтологии, включающий классификации терминов по независимым основаниям

Метка	Предок	Потомок
Биология А	Экология	Сообщества (экосистемы, биоценозы)
		Связи
		Виды
		Популяции
		Охрана окружающей среды
	Сообщества	Суша
		Пресные воды
		Моря
Сообщества суши К	Типы	Биосфера
		Зона
		Подзона
		Район
		Ландшафт
		Биогеоценоз
		Местообитание (биотоп)
Сообщества суши К	Зона	Арктическая пустыня
		Тундра
		Лесотундра
		Лес
Сообщества суши К	Подзона	Северная тайга
		Средняя тайга
		Южная тайга

Рис. 4. Фрагмент онтологии по биологии (начало структуры по экологии)

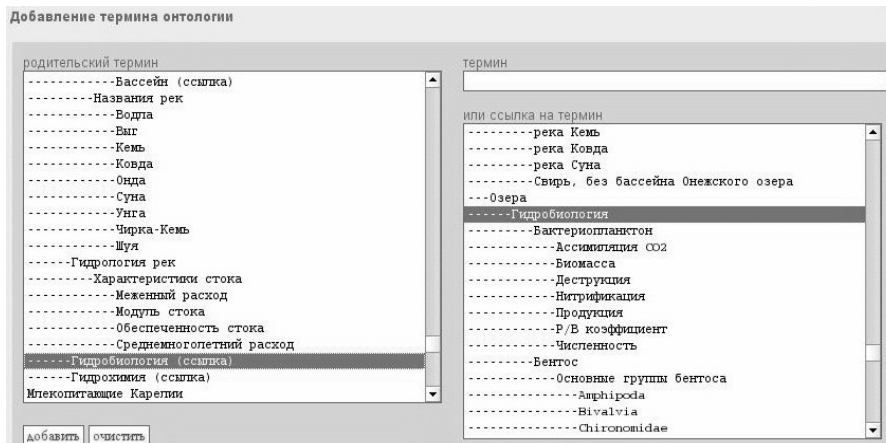


Рис. 5. Пример добавления терминов в состав онтологии по водной экологии



Отличие процесса регистрации привлекаемых коллекций заключается в том, что их документы могут быть представлены в различных форматах (HTML, PDF и др.) и могут не содержать списка документов в явном виде. Таким образом, необходимо будет разработать дополнительные технологические средства для формирования списков документов привлекаемых коллекций, аналогично тому, как формируются списки терминов онтологий и их толкований.

Для обеспечения тематического поиска документов в коллекциях производится их индексация с использованием соответствующей предметной онтологии. Структура индексного файла – это таблица, которая содержит имя документа, его URL и список встречающихся в его тексте терминов в порядке их иерархии и связей в онтологии.

Документы ЭБ по степени структуризации можно разделить на три категории: базы данных (таблицы), слабоструктурированные (XML-документы) и неструктурированные (статьи в форматах PDF, HTML и т. п.). Таблицы и XML-документы структурно соответствуют структуре онтологии, поэтому процесс их индексации сравнительно прост. Документ прочитывается «поэлементно», индексируется только текст, который находится между тегами элементов XML-документа, для которых определено соответствие с рубриками онтологии. Соответствие рубрик документа рубрикам онтологий обеспечивает сохранение в индексе порядка терминов, принятого в онтологии. Это важно для организации поиска релевантных запросу документов.

Неструктурированные документы могут содержать термины не в порядке их подчиненности в онтологии. Тогда, если не принять особых мер при их индексации, индекс документа будет содержать список терминов в порядке их нахождения в тексте, а не в порядке, принятом в онтологии, что впоследствии будет порождать «информационный шум».

Принята следующая схема индексации документов. Во-первых, в структуре графа таксономии выделен дополнительный уровень для выделения подграфов, близких по составу соответствующей коллекции документов ЭБ. Во-вторых, множество публикаций сотрудников КарНЦ РАН разделено на части (названные коллекциями), содержание документов которых близко по смыслу к соответствующей рубрике ГРНТИ. При этом статьи комплексных сборников (например, юбилейный сборник «Северная

Европа в XXI веке: природа, культура, экономика») разделяются между разными коллекциями. Это решение значительно сокращает непроизводительные затраты времени на установление соответствия между содержанием статьи и требуемым фрагментом онтологии.

Далее, в тексте документа в процессе его чтения сначала ищутся термины, близкие к корню онтологии (темы, подтемы). И если найден один, то дальше ищутся термины, подчиненные ему вплоть до «листьевых» терминов, и они помещаются в индекс. Далее ищется следующий термин корневых уровней и подчиненные ему и т. д. В результате список терминов в индексе будет иметь порядок, соответствующий онтологии.

Процесс индексации документов привлекаемых коллекций должен предусмотреть несколько ветвей предварительной обработки форматов документов, например, перевод в текстовый формат для осуществления единообразного просмотра текстов в процессе индексации. Индексные файлы образуют для коллекций, относимых к соответствующей дисциплине.

После выполнения указанных операций сторонние коллекции считаются интегрированными в ЭБ, и доступ к ним осуществляется при помощи сервисов нашей ЭБ.

Интеграция статей толкований терминов онтологий отличается тем, что списки статей, относящихся к данной предметной онтологии, включаются в соответствующий индексный файл. Причем индексация статьи может не производиться.

Реальные объекты, описываемые в документах коллекций, вступают между собой в различные отношения, которые указываются в виде их ролей в составе системы. Целесообразно использовать эту информацию для создания гиперссылок между документами. В результате получаем не просто наборы документов, а комплексы связанных документов, что полезно при их изучении. Для решения этой задачи разработана соответствующая технология [Вдовицын, Лебедев, 2008]. В итоге получим распределенную библиотеку, содержащую описание классов природных объектов Карелии и толкования терминов онтологии.

### **Поиск в ЭБ релевантных документов**

Преимущество в использовании онтологий для формирования запросов на поиск заключается в том, что запрос в этом случае представляет

собой фрагмент таксономии, в котором термины связаны в иерархию. Тем самым запрос уже не является простым списком терминов, а отражает их зависимость. При этом устраняется возможная полисемия терминов и тем самым отсекается значительная часть «информационного шума» в отклике на запрос.

Ранее нами была предложена обобщенная схема запросов [Вдовицын, Лебедев, 2008], которая представляет собой редукцию предикатного выражения, а именно, нетерминалы в угловых скобках обозначают предикаты вида  $X = a$ , где  $X$  – слово в составе индекса,  $a$  – термин в запросе. С учетом объединения предметных онтологий на основе рубрикатора ГРНТИ схема запроса принимает следующий вид:

$$\{ \langle \text{Рубрика ГРНТИ} \rangle \langle \text{коллекция} \rangle \} [ \langle \text{класс} \rangle \wedge \vee \dots \wedge ] [ \langle \text{агрегат (тема)} \rangle \wedge \vee \dots \wedge ] [ \langle \text{характеристика} \rangle \wedge ] [ \langle \text{список значений} \rangle \wedge \vee ] \dots \wedge \vee$$

$$[ \langle \text{характеристика M} \rangle \wedge ] [ \langle \text{список значений} \rangle \wedge \vee ] [ \langle \text{тема} \rangle \wedge \vee \dots \wedge ]$$

$$[ \langle \text{характеристика N} \rangle \wedge ] [ \langle \text{список значений} \rangle \wedge \vee ] \dots \wedge \vee$$

$$[ \langle \text{характеристика N + K} \rangle \wedge ] [ \langle \text{список значений} \rangle \wedge \vee ]$$

$$[ \langle \text{класс} \rangle \wedge \vee \dots \wedge ] [ \langle \text{тема} \rangle \wedge \vee \dots \wedge ] [ \langle \text{характеристика} \rangle \wedge ]$$

$$[ \langle \text{список значений} \rangle \wedge \vee ],$$

где  
 $\langle \text{список значений} \rangle := \langle \text{значение} \rangle$   
 $\wedge \vee \langle \text{список значений} \rangle$ .

Эта схема отображает возможность построения максимально точного для данной онтологии запроса на поиск. Наличие квадратных скобок указывает на возможность формирования и самых простых запросов, состоящих из одного термина. При использовании дизъюнкций в составе фрагментов, заключенных в квадратные скобки, необходимо правильно расставить круглые скобки, чтобы учитывать приоритеты логических операций.

Нетерминалы «Рубрика ГРНТИ» и «коллекция», заключенные в фигурные скобки, определяют как раздел онтологии, так и коллекцию документов, в которой должен выполняться поиск. Очевидно, что поиск осуществляется в одной коллекции. При необходимости поиска в большем их числе запросы должны повторяться.

Нетерминалы «класс», «тема», «характеристика», «значение» отражают иерархическую

структуру онтологии. При этом нетерминалы «класс» и «тема» подразумевают возможность иерархических классификаций.

Пример запроса:

Рубрика ГРНТИ	Водное хозяйство $\wedge$
Коллекция	Озера $\wedge$
Тема	Гидробиология $\wedge$
Подтема	Фитопланктон $\wedge$
Характеристика	Биомасса $\wedge$ Численность $\wedge$ Сезонное изменение биомассы

Очевидно, что построение запроса по указанной схеме непростая задача, поэтому предусмотрены средства оказания помощи пользователю в составлении запроса. Сначала он в процессе поиска в глубину по онтологии формирует список необходимых терминов, и только далее, обдумав свои потребности, переносит термины в запрос в порядке, определяемом иерархией и соответствующей инструкцией. При этом расстановка знаков конъюнкции и дизъюнкции и формирование оператора Select выполняется при помощи программного сервиса, который контролирует допустимость конъюнктивных связей между терминами, как это показано ниже.

Следует обратить внимание на двойственность семантики союза «и» в русских текстах. Часто его семантика соответствует не конъюнкции, а объединяющему «или», т. е. дизъюнкции. Например, выражение «сосновые и смешанные леса» должно быть представлено следующей формулой:

$$(\text{сосновые} \vee \text{смешанные}) \wedge \text{леса}$$

В нашем случае онтология представляет собой множество терминов предметной области, связанных между собой отношениями классификации, агрегации и синонимии.

Классификации разбивают некоторые исходные множества на группу непересекающихся подмножеств (классов) по определенным основаниям, в качестве которых могут использоваться наличие или отсутствие у объекта определенных атрибутов (признаков) и/или определенных значений атрибутов. Классификации могут быть одноуровневыми или многоуровневыми (иерархическими), многоуровневость производит последовательная классификация сначала исход-

ного множества, а затем его подмножеств, подмножеств этих подмножеств и т. д. Одно и то же множество может быть классифицировано несколько раз с использованием различных оснований. В этом случае классификации также целесообразно разнести по уровням иерархии, иначе все разбиения попадут в один список, разобраться в котором пользователю будет затруднительно и это будет источник построения недопустимых (пустых) конъюнкций (см. рис. 1).

Таким образом, по определению в классификациях допускаются конъюнкции между терминами, лежащими на одном пути в графе онтологии. Все остальные конъюнкции являются пустыми, так как связывают непересекающиеся подмножества. В этих условиях, чтобы проверить допустимость любой конъюнкции, заданной в запросе, достаточно проверить, лежат ли входящие в нее термины на одном пути в онтологии и, если не лежат, сообщить об этом пользователю, чтобы он исключил эти конъюнкции из запроса.

Часто бывает, что классификации верхних уровней (т. е. отражающие их термины) могут отсутствовать в конкретных документах. Аналогичное бывает и в случаях множественной классификации набора документов по различным основаниям. В этом случае допустимые конъюнкции будут «пустыми», исправить положение может только сам пользователь, заменив конъюнкции дизъюнкциями.

Агрегации в отличие от классификаций позволяют представить класс объектов в виде совокупности частей или свойств. Отдельные объекты класса описываются указанием значений свойств или собственных имен частей. При поиске объектов класса в коллекциях в этих случаях допускаются конъюнкции между названиями свойств или частей. При поиске конкретных объектов следует указывать также значения свойств или имена частей. Запись конъюнкции должна быть аналогичной предыдущей схеме.

В некоторых случаях допустимые конструкции в запросах для классификаций и агрегаций вступают в противоречие. Для их разрешения достаточно пометить в онтологии классификации и агрегации различными знаками (например, классификации метятся буквой К, а агрегации – буквой А) (см. рис. 4). Тогда упомянутый выше контроль допустимости конъюнкций достаточно дополнить анализатором этих пометок.

Синонимические гнезда терминов в онтологиях представляются отдельными словарями синонимов. Когда пользователь указывает в запросе

се очередной термин, выполняется поиск в словаре синонимов, и если они есть, то автоматически в запрос помещается дизъюнкция всего синонимического гнезда. Тем самым осуществляется расширение запроса.

## Заключение

Предложены технологии развития контента ЭБ посредством интеграции коллекций, описывающих природные объекты Карелии с использованием онтологических моделей предметных областей в качестве основы для обеспечения полноты контента. Для построения онтологий предложены технологии поиска в Интернет терминов предметных областей, их связей и толкований и включения их в состав онтологий. Онтологии также используются для индексации документов коллекций с целью сокращения времени на поиск. Индексные файлы, помимо индексов документов, содержат URL документов привлекаемых коллекций сторонних сайтов и статей толкований терминов. Для тематического поиска документов в коллекциях разработана технология построения запросов с использованием онтологий и технология поиска в индексных файлах.

Значительная часть указанных технологий уже разработана.

Авторы выражают благодарность В. Г. Старковой и Н. Б. Луговой за реализацию предлагаемых технологий и сопровождение ЭБ, а также фонду РФФИ, поддержавшему работу грантами № 08-07-00085а, № 09-07-12074 офи\_м.

## Литература

*Вдовицын В. Т., Сорокин А. Д., Луговая Н. Б.* Электронная библиотека научных информационных ресурсов КарНЦ РАН // Труды шестой Всерос. науч. конф. по электронным библиотекам. Пушкино, 2004. С. 41–46.

*Вдовицын В. Т., Сорокин А. Д., Луговая Н. Б.* Развитие программных сервисов и контента ЭБ КарНЦ РАН // Труды седьмой Всерос. науч. конф. по электронным библиотекам. Ярославль, 2005. С. 92–97.

*Вдовицын В. Т., Лебедев В. А., Луговая Н. Б. и др.* Развитие и разработка технологии публикации и поиска документов в электронных коллекциях // Труды восьмой Всерос. науч. конф. по электронным библиотекам. Суздаль, 2006. С. 162–167.

*Вдовицын В. Т., Лебедев В. А., Брагин С. В. и др.* Развитие сервисов электронной библиотеки научных информационных ресурсов // Труды Всерос. науч. конф. Научный сервис в сети Интернет: технологии

параллельного программирования (Новороссийск, 24 – 29 сентября 2007). Издательство Московского университета, 2007. С. 305–310.

*Вдовицын В. Т., Лебедев В. А.* Онтологии для тематического поиска данных в коллекциях электронной библиотеки // Труды десятой Всерос. науч. конф. Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции. Дубна, 2008. С. 63–69.

*Загоруйко Ю. А.* Методы и технологии разработки, сопровождения и реинжиниринга онтологий // Онтологическое моделирование. Труды симпозиума. Звенигород, 2008. С. 167–200.

*Лебедев В. А., Старкова В. Г., Брагин С. В.* Представление онтологии научной коллекции «Водные ресурсы региона» // Труды шестой Всерос. конф. по электронным библиотекам. Пушкино, 2004. С. 86–92.

*Лебедев В. А., Старкова В. Г., Брагин С. В.* Применение онтологии для ведения и доступа к данным

коллекции «Природные ресурсы региона» // Труды седьмой Всерос. конф. по электронным библиотекам». Ярославль, 2005. С. 87–91.

Перспективные направления развития российской отрасли информационно-телекоммуникационных технологий (Долгосрочный технологический прогноз Российской ИТ — Foresight). М., 2007. 223 с.

*Фазлиев А. З.* Рассуждения о понятии «онтология» // Онтологическое моделирование. Труды симпозиума. Звенигород, 2008. С. 278–296.

*Arms W.* Digital Library. The MIT Press. 2000.

*Arms W.* Automated Digital Libraries. D-Lib Magazine. V. 6. N 7–8.

*Gruber T. R.* A Translation Approach to Portable Ontology specification // Knowledge Acquisition. 1993. N 5.

*Uschold M., Gruninger M.* Ontologies: Principles, Methods and Applications // Knowledge Engineering Review. 1996. N 11.

#### **СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:**

##### **Вдовицын Владимир Трофимович**

руководитель лаб. информационных компьютерных технологий, к. ф.-м. н.

Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910

эл. почта: vdov@krc.karelia.ru

тел.: (8142) 769679

##### **Лебедев Виктор Алексеевич**

старший научный сотрудник, к. э. н.

Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910

эл. почта: V1777@krc.karelia.ru

тел.: (8142) 766312

##### **Vdovitsyn, Vladimir**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: vdov@krc.karelia.ru

tel.: (8142) 769679

##### **Lebedev, Viktor**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: V1777@krc.karelia.ru

tel.: (8142) 766312

УДК 519.872.1

## РЕГЕНЕРАТИВНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПОТЕРИ В СИСТЕМАХ ОБСЛУЖИВАНИЯ С КОНЕЧНЫМ БУФЕРОМ

**Р. С. Горичева, Е. В. Морозов**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

В статье рассматривается проблема моделирования и статистического оценивания вероятности переполнения (потери) в системах обслуживания с конечным буфером. Приведены известные аналитические результаты, а также новая асимптотика вероятности потери при растущем размере буфера. Основное внимание уделено построению точечных и интервальных оценок вероятности потери с использованием регенеративного моделирования. Приведены численные примеры. Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 10-07-00017.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** система обслуживания с потерями, конечный буфер, регенерация, формула Эрланга, вероятность потери, распределение Парето, доверительное оценивание.

**R. S. Goricheva, E. V. Morozov. REGENERATIVE SIMULATION OF LOSS PROBABILITY IN QUEUEING SYSTEMS WITH FINITE BUFFER**

In the paper we consider the problem of modeling and statistical estimation of the overflow (loss) probability in queueing systems with finite buffer. Both known analytical results and a new asymptotic for loss probability under increasing buffer size are given. The main focus is on construction of point and interval estimates of the loss probability using regenerative simulation. Some numerical examples are given. The research is supported by RFBR, project 10-07-00017.

**Key words:** queueing loss systems, finite buffer, regeneration, Erlang formula, loss probability, Pareto distribution, confidence estimation.

---

### **Введение**

При изучении современных телекоммуникационных систем важное место занимает анализ потока отказов или потерь. К потерям относится та часть поступающей нагрузки, которая не обслуживается из-за занятости обслуживающих устройств или переполнения буферов для ожидания в очереди.

В данной статье рассматриваются основные модели систем с потерями, обсуждаются известные аналитические результаты для таких систем, в частности, формулы Эрланга. Изучаются свойства вероятности потери, включая свойства монотонности, а также ее асимптотика при растущем размере буфера в условиях, когда коэффициент загрузки больше 1. Приведены результаты

о свойствах среднего числа потерь на цикле занятости, которые затем используются при оценивании стационарной вероятности потери.

Регенерирующие процессы и тесно связанные с ними процессы восстановления играют существенную роль при моделировании трафиков и оценивании характеристик широкого класса телекоммуникационных сетей. Важно также заметить, что регенеративный подход часто может быть использован для доверительного оценивания сетевых характеристик. В статье описана регенеративная структура системы с конечным буфером, а затем регенеративный метод использован для построения точечных и доверительных оценок как среднего числа потерь на цикле регенерации, так и вероятности потери. Подробно представлены результаты имитационного моделирования некоторых систем с потерями, в том числе систем с распределением Парето времени обслуживания. Данная статья не может рассматриваться как сколько-нибудь полный обзор проблематики систем с потерями. (В этой связи укажем недавнюю работу [Abramov, 2008].) Основной интерес для авторов представляет возможность применения регенеративного метода для надежного оценивания вероятности потери с перспективой использования этих результатов при оценке вероятности потери данных (оценки качества обслуживания (QoS) в телекоммуникационной сети.

*Авторы посвящают эту работу 100-летию теории А. К. Эрланга, которое отмечалось в 2009 г.*

### Системы с пуассоновским входным потоком

Рассмотрим систему с буфером размера  $n < \infty$ , в которой заявка, поступающая при величине очереди, равной  $n$ , получает отказ – теряется. Пусть  $T_i$  – интервал между приходом  $i$ -й и  $i+1$ -й заявок, а  $S_i$  – время обслуживания  $i$ -й заявки  $i=1, 2, \dots$ . Предполагается, что последовательности  $\{T_i\}$  и  $\{S_i\}$  независимы и состоят из независимых, одинаково распределенных случайных величин (н.о.р.с.в.). Всюду далее, чтобы обозначать типичный элемент такой последовательности, опускается соответствующий индекс. Коэффициент загрузки (или трафика) системы задается следующим образом:  $\rho = ES / ET$ , где  $ES$ ,  $ET$  – среднее время обслуживания и средняя длина интервала между приходами заявок, соответственно. Стационарная вероятность по-

тери обозначается через  $P_l$ . В широких предположениях, выполненных во всех моделях, рассматриваемых в данной статье, эта вероятность существует и равна пределу отношения числа потерянных заявок к общему числу приходов, когда число приходов неограниченно растет [Abramov, 1997].

Система, в которой входной поток является пуассоновским и отсутствует буфер для ожидания в очереди, называется *системой Эрланга*  $M/G/m/0$ ,  $m$  – число обслуживающих каналов. (Подробнее можно ознакомиться в [Greiner et al., 1999].) В такой системе вероятность  $P_l$  определяется *формулой Эрланга*

$$P_l = \frac{\rho^m / m!}{\sum_{k=1}^m \rho^k / k!}. \quad (1)$$

Подчеркнем, что формулы Эрланга (включающие также вероятности других состояний) верны при любом распределении времени обслуживания. Если время обслуживания имеет экспоненциальное распределение и система обладает буфером размера  $0 \leq n < \infty$ , то стационарную вероятность потери можно рассчитать по известной формуле

$$P_l = \frac{\rho^{m+n}}{m! m^n} P_0, \quad (2)$$

где вероятность простоя системы  $P_0$  определяется следующим образом :

$$P_0 = \left( \sum_{k=0}^m \rho^k / k! + \rho^m / m! \sum_{k=1}^n (\rho / m)^k \right)^{-1}. \quad (3)$$

Исследуем вероятность потери  $P_l$  в системе Эрланга на монотонность как функцию коэффициента загрузки  $\rho$ . Продифференцировав по  $\rho$  выражение (1), получаем:

$$P_l' = \frac{\rho^{m-1}}{(m-1)!} \cdot \frac{\left( \sum_{k=0}^{m-1} \rho^k / k! (1 - \rho / m) + \rho^m / m! \right)}{\left( \sum_{k=0}^m \rho^k / k! \right)^2}.$$

Нетрудно увидеть, что числитель второго множителя этого выражения может быть записан как

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{m-1} \rho^k / k! (1 - \rho / m) + \rho^m / m! = \\ & = 1 + \sum_{k=1}^{m-1} (1 - k / m) \rho^k / k! > 0. \end{aligned}$$

Это доказывает (интуитивно ожидаемый результат), что вероятность потери возрастает с увеличением загрузки системы.

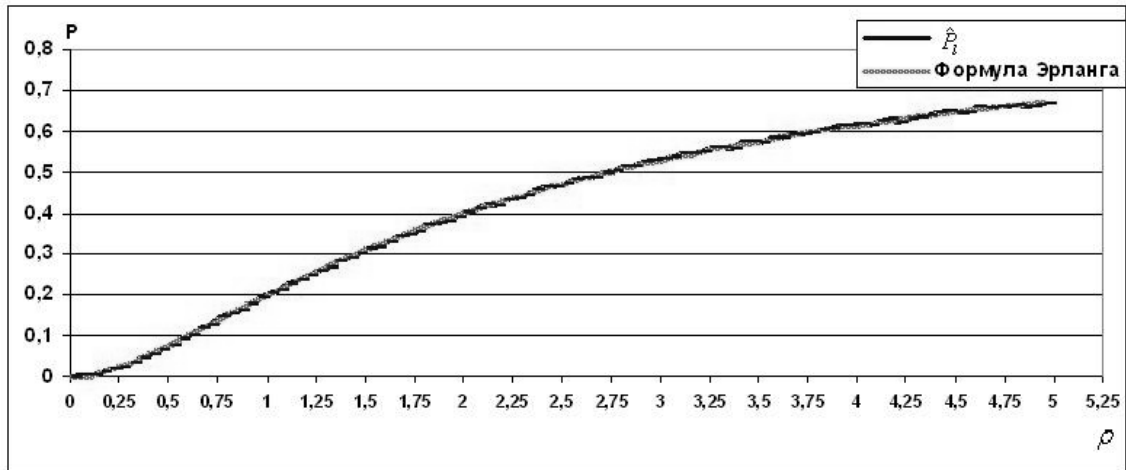


Рис. 1. Зависимость вероятности потери в системе  $M/Pareto/2/0$  (с параметром распределения Парето  $\alpha = 2,6$ ) от коэффициента загрузки  $\rho$

Дальнейший анализ в случае  $m = 1$ , дает  $P_l'' = -2/(1 + \rho)^3 < 0$ , т. е. вероятность  $P_l$  является выпуклой вверх функцией. А для  $m = 2$  нетрудно получить, что вероятность потери будет менять выпуклость вниз на выпуклость вверх в точке перегиба  $\rho \approx 0,73$ . Рис. 1 хорошо иллюстрирует установленные выше свойства выпуклости и монотонности на примере двухканальной системы Эрланга с распределением Парето времени обслуживания, т. е.  $P(S > x) = x^{-\alpha}$ ,  $x \geq 1$ , (и  $P(S > x) = 1$  при  $x < 1$ ) с параметром  $\alpha = 2,6$ . Отметим также очень хорошее совпадение между оценкой вероятности потери  $\hat{P}_l$ , вычисленной как отношение числа потерянных заявок к общему числу заявок, и ее точным стационарным значением, вычисленным по формуле Эрланга (1). (Этот результат может также служить тестом корректности программы имитационного моделирования.)

### Расчет вероятности в системе $M/M/m/n$

Рассмотрим систему  $M/M/m/n$  с пуассоновским входным потоком с параметром  $\lambda > 0$  и экспоненциальным обслуживанием с параметром  $\mu > 0$  и изучим зависимость вероятности потери  $P_l$  от значения коэффициента трафика  $\rho$ . При выполнении условия  $\rho/m < 1$  соответствующая система с неограниченным буфером ( $n = \infty$ ) обладает стационарным режимом. В этом случае существует такой уровень, выше которого загрузка системы практически не под-

нимается. Если достижение этого уровня интерпретировать как вероятность потери (переполнения буфера в аналогичной системе с конечным буфером), то вероятность такого события оказывается очень малой. Заметим, что эта область исследований относится к теории оценивания вероятностей редких событий. Поэтому очевидно, что вероятность потери в системе с конечным буфером при фиксированном значении коэффициента трафика  $\rho/m < 1$  должна быть весьма чувствительна к величине буфера. В частности, можно ожидать, что она убывает с ростом размера буфера. Действительно, это легко следует из формул (2), (3). Более того, с ростом величины буфера  $n$ ,  $P_l = O((\rho/m)^n)$ .

Таким образом, скорость убывания вероятности потери является экспоненциальной, что хорошо иллюстрирует принцип больших уклонов для данной простейшей системы, у которой распределение времени обслуживания (экспоненциальное) имеет так называемый легкий хвост [Glynn, Whitt, 1994].

Более интересная проблема – изучение поведения величины  $P_l$  при большой загрузке системы, т. е. при  $\rho/m > 1$ . Это типичная ситуация в системах с потерями, где не возникает проблема нестационарности, и поэтому ограничения на коэффициент трафика не требуются. В этом случае предполагаем, что вероятность потери должна быть скорее чувствительна к коэффициенту трафика, чем к величине буфера. Для пояснения отметим, что при  $\rho/m > 1$  система (в стационарном режиме) почти все время находится в состоянии максимальной загрузки независимо

от величины буфера. (Величина буфера, однако, влияет на время выхода системы на стационарный режим.) Для проверки этого предположения исследуем поведение вероятности  $P_l$  в системе  $M/M/m/n$  с загрузкой  $\rho/m > 1$  при неограниченном увеличении буфера. Из формулы (2) имеем:

$$P_l = \frac{\rho^{m+n} / (m!m^n)}{\sum_{k=0}^m \rho^k / k! + \rho^m / m! \sum_{k=0}^n (\rho/m)^k} \quad (4)$$

Выполнив замены  $A := (\sum_{k=0}^m \rho^k / k!) / (\rho^m / m!)$ ,

$\delta := \rho/m$ , перейдем к пределу при  $n \rightarrow \infty$  и, учитывая, что  $\delta > 1$ :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} P_l &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\delta^n}{A + \sum_{k=1}^n \delta^k} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\delta^n}{A + \delta \frac{\delta^n - 1}{\delta - 1}} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\delta^n (\delta - 1)}{A(\delta - 1) + \delta^{n+1} - \delta} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1 - 1/\delta}{A(\delta - 1) / \delta^{n+1} + 1 - 1/\delta^n} = \\ &= 1 - 1/\delta = 1 - m/\rho. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, действительно, вероятность потери в системе  $M/M/m/n$  в случае большой загрузки сходится при растущем размере буфера  $n$  к фиксированному значению, зависящему лишь от коэффициента  $\rho/m$ . Важно подчеркнуть, что переход к пределу при  $n \rightarrow \infty$  в самой формуле (4) (при  $\rho/m > 1$ ) не имеет смысла, так в этом случае система с бесконечным буфером оказывается нестационарной и поэтому, в частности,  $P_0 = 0$ .

В табл. 1 представлены результаты численного эксперимента (по 20 000 наблюдений), где сравниваются значения оценки вероятности потери  $\hat{P}_l$ , вычисленной как доля отказов и вероят-

ности потери  $P_l$ , вычисленной по формуле (4).

Полученная близость  $\hat{P}_l$  и  $P_l$  совершенно ожидаема и указывает на состоятельность оценки  $\hat{P}_l$ . Заметим, что строгое обоснование (сильной) состоятельности следует из регенеративной теории, что будет обсуждаться далее. Проблема, связанная с обоснованием состоятельности, состоит в том, что потери, точнее соответствующие индикаторы потерь, не являются н.о.р.с.в.

Таблица 1. Результаты имитационного моделирования системы  $M/M/m/n$

$\rho$	$m$	$n$	$\hat{P}_l$	$P_l$
4,06	2	0	0,6162	0,6193
4,06	2	5	0,5072	0,5096
4,06	2	10	0,5093	0,5069
4,06	2	20	0,5116	0,5069
4,06	2	50	0,5101	0,5069
4,06	2	100	0,5035	0,5069
4,06	4	0	0,3146	0,3160
4,06	4	10	0,0852	0,0822
4,06	4	20	0,0564	0,0500
1,56	2	0	0,3228	0,3220
1,56	2	5	0,0521	0,0512
1,56	2	7	0,0011	0,0009
8	4	10	0,5034	0,5000
8	4	100	0,5054	0,5000
8	2	10	0,7493	0,7500
8	2	100	0,7418	0,7500
8	2	500	0,7275	0,7500

Кроме того, результаты экспериментов подтверждают, что при  $\rho/m < 1$ , оценка  $\hat{P}_l$  убывает с увеличением буфера, а при  $\rho/m > 1$ , оценка  $\hat{P}_l$  перестает зависеть от его размера и стремится к фиксированному значению, определяемому формулой (5). Рис. 2 иллюстрирует последний результат на примере системы  $M/M/2/n$  при  $n = 50$ .

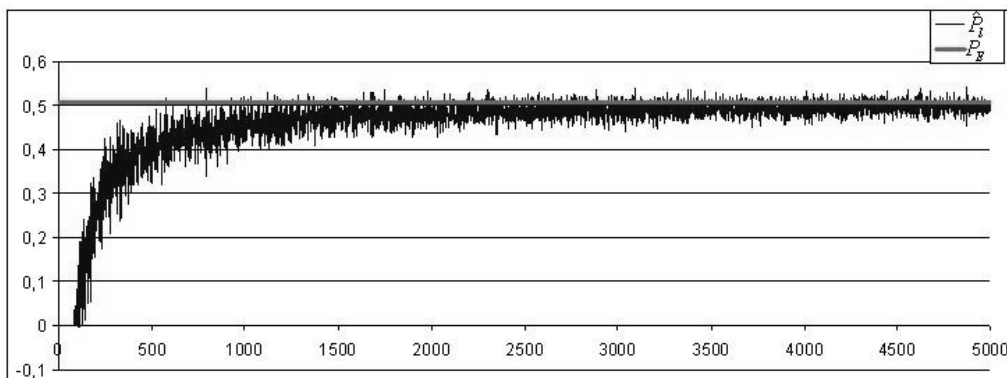


Рис. 2. Зависимость вероятности потери в системе  $M/M/2/50$  от числа поступивших заявок при значении коэффициента загрузки  $\rho = 4,06$



В заключение отметим, что вероятность потери в системе  $M/M/1/0$   $P_1 = \rho/(1+\rho)$  действительно приближается с  $1-1/\rho$ , т. е. с правой частью формулы (5) при  $m=1$  и при большом  $\rho$ . Интересно отметить, что аналогичный результат (однако доказываемый гораздо более сложно) верен и для более общей системы  $GI/M/m/n$ , см. [Абрамов, 2008]. Можно ожидать, что результат верен и для системы с потерями  $M/GI/m/n$ .

### Потери на цикле занятости в системе $GI/G/1/n$

В данном разделе, который опирается на работу [Wolff, 2002], приведены результаты для среднего числа потерь  $EL_n$  на цикле занятости системы (который является также циклом регенерации всех типичных процессов системы, см. [Perkoz et al., 2003]) в зависимости от размера буфера  $n$ . Этот результат полезен для вычисления вероятности потери. Пусть  $A$  – количество поступивших заявок,  $K$  – число обслуженных заявок, и  $L_n = A - K$  – число потерь, все – за один период занятости. Обозначим через  $\beta$  – длительность цикла, включающего период занятости  $B$  и следующий за ним период простоя  $I$ , т. е.  $\beta = B + I$ . Таким образом, имеем (стохастические) равенства

$$\beta = \sum_{i=1}^A T_i, B = \sum_{i=1}^K S_i. \quad (6)$$

Естественно предположить, что в системе с потерями  $EA < \infty$ . Это условие выполняется в случае пуассоновского входного потока и дисциплины обслуживания FIFS (заявки обслуживаются в порядке поступления в систему). Для других распределений и при  $\rho > 1$  необходимы дополнительные условия, иначе возможно возникновение ситуации, при которой система никогда не станет свободной. Применяя тождество Вальда к равенствам (6), получим:  $\lambda E\beta = EA$ ,  $\mu EB = EK$ , что в итоге дает

$$EL_n = \lambda E\beta - \mu EB. \quad (7)$$

Рассмотрим два важных случая распределения интервала входного потока. Говорят, что интервал между приходами заявок  $T$  обладает свойством НСЛИ (новое в среднем лучше использованного), если среднее незавершенное время между приходами меньше среднего времени между приходами, т. е.  $E(T-t|T>t) \leq ET$ ,  $t \geq 0$ . (Принятый англоязычный термин – NBUE: *new better than used*

*in expectation*. Русскоязычная терминология (НСЛИ) дается в [Байхельт, Франкен, 1988].) Противоположное свойство НСХИ (NWUE – *new worse than used in expectation*) означает, что среднее незавершенное время между приходами больше среднего времени между приходами, т. е.,  $E(T-t|T>t) \geq ET$ ,  $t \geq 0$ . Отметим, что в первом случае  $EI \leq ET$ , а во втором  $EI \geq ET$ . Отсюда и из равенства (7) легко получается следующий результат [Wolff, 2002].

**Теорема 1.** В системе  $GI/G/1/n$

1) если  $\lambda \leq \mu$  и  $T$  удовлетворяет свойству НСЛИ, то

$$EL_n \leq 1, \quad n \geq 0,$$

2) если  $\lambda \geq \mu$  и  $T$  удовлетворяет свойству НСХИ, то

$$EL_n \geq 1, \quad n \geq 0.$$

В обоих случаях при  $\lambda = \mu$  выполняется равенство  $EL_n = 1$  для любого  $n \geq 0$ .

Заметим, что равенство  $EL_n = 1$  (при  $\lambda = \mu$ ) легко следует из (7) в системе  $M/GI/1/n$ , поскольку для пуассоновского входного потока  $EI = 1/\lambda$ .

Можно рассмотреть более общую одноканальную систему с бесконечным буфером  $GI/G/1$ , в которой, тем не менее, заявки могут быть потеряны по различным причинам. К примеру, если в системе находится  $j$  заявок, то новая заявка встает в очередь с вероятностью  $p_j$ . Получается система с конечным буфером  $n$  при  $p_j = 1$ , если  $j \leq n$  и  $p_j = 0$ , если  $j > n$ . В качестве еще одного примера можно предложить правило, где поступившая заявка, встречающаяся в системе работу больше некоторой константы  $v$ , теряется. В общем случае заявка, встречающаяся в системе работу, равную  $v$ , встает в очередь с вероятностью  $q_v$ ,  $v \geq 0$ . Перечисленные правила удовлетворяют следующему условию  $J$ : для любого  $i \geq 1$  событие  $\{A \geq i$  и  $i$ -я заявка встает в очередь} не зависит от последовательности  $\{S_i, S_{i+1}, \dots, T_i, T_{i+1}, \dots\}$ . При последнем условии времена обслуживания заявок, вставших в очередь, образуют последовательность н.о.р.с.в. (Заявки могут обслуживаться в произвольном порядке.)

**Теорема 2.** Пусть в системе с потерями  $GI/G/1$  выполняется условие  $J$ . Тогда

1) если  $\lambda \leq \mu$  и  $T$  удовлетворяет свойству НСЛИ, то среднее число потерь на цикле

$$EL \leq 1;$$

2) если  $\lambda \geq \mu$  и  $T$  удовлетворяет свойству НСХИ, то

$$EL \geq 1.$$

В обоих случаях при  $\lambda = \mu$  выполняется равенство  $EL = 1$ .

### Регенеративный метод оценивания

В данном разделе кратко описан регенеративный метод имитационного моделирования. Кроме того, этот метод применен для моделирования работы систем с конечным буфером и доверительного оценивания вероятности потери в таких системах.

Процесс  $X = \{X_t, t \in T\}$ , где  $T = [0, \infty)$  или  $T = \{0, 1, \dots\}$ , называется *регенерирующим процессом*, если существует бесконечная последовательность *моментов регенерации*  $0 = \beta_0 < \beta_1 < \beta_2 < \dots$  таких, что сегменты (*циклы регенерации*)  $G_p = (X_t, \beta_{k-1} \leq t < \beta_k)$  являются н.о.р. [Serfozo, 2009]. Разумеется, интервалы  $\alpha_k = \beta_k - \beta_{k-1}$ , при  $k \geq 1$ , также н.о.р.с.в. Обозначим через  $\beta$  типичную длину цикла регенерации, считая, что первая заявка поступает в пустую систему в момент времени  $t = 0$  (процесс без задержки). Будем предполагать, что процесс  $X$  является положительно возвратным, т. е.  $E\beta < \infty$ , и длина цикла регенерации  $\beta$  – непериодическая, т. е.  $P(\beta = 1) > 0$ . (Условие положительной возвратности обеспечивается конечностью буфера, исключающей неограниченный рост значений процесса.) Тогда существует (стационарный) предел по распределению  $X_k \Rightarrow X$  при  $k \rightarrow \infty$  такой, что  $P(X < \infty) = 1$ . Более того, если  $f$  – измеримая функция, то (для процесса с дискретным временем) верно следующее соотношение:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \sum_{i=0}^k f(X_i) = \frac{E \sum_{i=1}^{\beta} f(X_i)}{E\beta} = Ef(X) = r. \quad (8)$$

(Аналог для случая непрерывного времени очевиден.) Предполагается также, что

$$E \sum_{i=0}^{\beta} |f(X_i)| < \infty.$$

Для оценки неизвестного параметра  $r$ , являющегося искомой стационарной характеристикой регенерирующего процесса, объединим данные в пределах одного цикла регенерации и получим н.о.р. с.в.

$$Y_p := \sum_{k=\beta_{p-1}}^{\beta_p-1} f(X_k), \quad p \geq 0.$$

Если выполнено (наиболее слабое) условие  $0 < E(Y - r\beta)^2 < \infty$ ,

$$(9)$$

то можно применить *регенеративную Центральную Предельную Теорему* [Glynn, Iglehart, 1993]:

$$k^{1/2} \bar{\alpha}_k |r - r_k| \Rightarrow \sigma N(0, 1), \quad k \rightarrow \infty,$$

где

$$\bar{\alpha}_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \alpha_i, \quad r_k := \frac{\bar{Y}_k}{\bar{\alpha}_k}, \quad \bar{Y}_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Y_i$$

– соответствующие выборочные средние,  $\sigma^2 = E(Y - r\beta)^2$ ,  $N(0, 1)$  – стандартная нормальная с. в., а  $k$  – число завершённых циклов регенерации в процессе моделирования.

Таким образом, последовательность  $k^{1/2} \bar{\alpha}_k [r_k - r] \sigma$  сходится (по распределению) к стандартному нормальному закону с ростом числа циклов регенерации. Следовательно,  $100(1 - \gamma)\%$  доверительный интервал для неизвестного оцениваемого параметра  $r$  имеет вид

$$\left[ r_k - \frac{z_\gamma s(k)}{\bar{\alpha}_k \sqrt{k}}, r_k + \frac{z_\gamma s(k)}{\bar{\alpha}_k \sqrt{k}} \right],$$

где квантиль  $z_\gamma$  находится из условия  $2\Phi(z_\gamma) = 1 - \gamma$ ,  $\Phi(x)$  – функция Лапласа, а  $s^2(k)$  – эмпирическая дисперсия, причем  $s^2(k) \rightarrow \sigma^2$ ,  $k \rightarrow \infty$  с вероятностью 1. (Подробнее описание регенеративного метода имитационного моделирования см. в [Bratley, Fox, 1987], [Law, Kelton, 1991], [Glynn, Iglehart, 1993].)

Важным аспектом изучения систем с потерями является анализ потока отказов, возникающих из-за переполнения буфера. Такой поток может являться входным потоком для других телекоммуникационных устройств. Для того чтобы проиллюстрировать регенеративный метод оценивания, опишем регенеративную структуру системы  $M/G/m/n$  и построим доверительный интервал для оценки  $\hat{P}_l$  вероятности потери заявки, получаемой как отношение числа отказов к общему числу поступивших заявок.

Пусть  $\{t_i\}$  – моменты прихода заявок в систему и  $v_i$  – число заявок в системе в момент прихода заявки  $i \geq 1$ . Легко понять, что регенерации в процессе  $\{v_i\}$  возникают при приходе заявки в пустую систему. Определим рекурсивно

$$\beta_{k+1} = \min\{l > \beta_k : v_l = 0\}, \quad k \geq 0,$$

где  $\beta_0 = 0$  (первый приход в пустую систему в момент времени  $t = 0$ ). Тогда  $\{\beta_k\}$  – есть моменты

регенерации процесса  $\{v_i\}$  (и других процессов) в данной системе обслуживания. (Данная конструкция легко может быть расширена на случай ненулевых начальных условий.)

Для того чтобы проиллюстрировать применение регенеративного метода для построения точечных и интервальных оценок вероятности потери, рассмотрим  $m$  – серверную систему  $M/G/m/n$  с конечным буфером.

Вначале рассмотрим систему  $M/Pareto/m/n$  с распределением Парето времени обслуживания с параметром  $\alpha > 2$ , т. е.  $P(S \geq x) = x^{-\alpha}$ ,  $x \geq 1$ . В настоящее время общепризнано, что распределение Парето (распределение с тяжелым хвостом) достаточно хорошо описывает трафики широкого класса современных телекоммуникационных систем [Leland et al., 1994], [Taqqi et al., 1997], [Willinger et al., 1997], в то время как экспоненциальное распределение (распределение с легким хвостом) также традиционно продолжает играть важную роль в таком анализе. В случае конечного буфера средняя длина цикла регенерации конечна,  $E\beta < \infty$ , и кроме того, величина  $\beta$  является непериодической ввиду свойства входного потока. Поскольку  $\alpha > 2$ , то время обслуживания имеет конечный второй момент,  $ES^2 < \infty$ . В свою очередь это влечет конечность второго момента длины цикла регенерации,  $E\beta^2 < \infty$  [Wolff, 1989].

Более того, при оценивании вероятности потери из этого факта также следует  $EL_n^2 < \infty$ , поскольку величина  $L_n$  (число потерь на цикле регенерации) в данном случае составлена из индикаторов потерь на цикле и поэтому  $L_n \leq \beta$  [Mogozov, 2004]. Другими словами, в данном случае можно применить доверительное оценивание, основанное на регенеративном методе. Очевидно, это же верно и в случае экспоненциального времени обслуживания, поскольку тогда  $ES^2 = 1/\mu^2 < \infty$ .

Замечание. Напомним, что система регенерирует каждый раз, когда заявка поступает в пустую систему. Это означает, что момент регенерации не является событием в потоке отказов, поскольку отказ происходит только в момент прихода при переполненном буфере. Другими словами, нельзя обнаружить момент регенерации, наблюдая лишь за потоком потерь. С этой точки зрения моменты регенерации можно называть *скрытыми*.

Число потерь на интервале дискретного времени  $[0, i]$  (считающего приходы заявок) можно задать в следующем виде:

$$L_n(i) = \sum_{j=1}^i I_j,$$

где индикатор  $I_j = 1$ , если  $j$ -я заявка потерялась.

Так как циклы регенерации

$$G_k = \{I_i, \beta_{k-1} \leq i < \beta_k\} \text{ н.о.р.,}$$

то и фрагменты потока отказов, состоящие из заявок, потерянных на циклах  $[\beta_{k-1}, \beta_k)$ ,  $k \geq 1$ , также будут н. о. р. с. в.

Таким образом, последовательность  $I = \{I_i, i \geq 1\}$  образует регенерирующий процесс, и выполняется следующее предельное соотношение:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} L_n(k) = \frac{E \sum_{i=1}^{\beta} I_i}{E\beta} = \frac{EL}{E\beta} \equiv P_l := r.$$

Ниже приведены результаты численного моделирования для построения  $(1-\gamma)\%$  доверительного интервала для оценки вероятности потери в системе  $M/G/m/n$  при  $\gamma = 0,95$ , т. е.  $z_\gamma = 1,96$ . Численные значения результатов моделирования представлены в табл. 2, где

$$\Delta(k) = \frac{z_\gamma s(k)}{\bar{\alpha}_k \sqrt{k}} - \text{ширина доверительного интервала}$$

для оценки вероятности потери, построенного по  $k$  завершенным циклам регенерации.

В частности, из табл. 2 видно, что оценка вероятности потери, полученная на основе регенеративного метода, близка к значению, полученному по формуле (4) для системы с экспоненциальным обслуживанием. Заметим, что для систем с распределением Парето времени обслуживания, данная формула неприменима. Полученные данные также показывают, что повысить число циклов можно, уменьшая размер буфера или увеличивая число каналов. Поведение интервальной оценки, в зависимости от числа циклов регенерации  $k$ , представлено на рис. 3. (Фактически, это иллюстрирует регенеративную Центральную Предельную Теорему.)

Далее проиллюстрируем утверждения Теоремы 1 на примере системы  $M/M/1/n$ , в которой верны соотношения  $EL_n \leq 1$ ,  $EL_n = 1$ ,  $EL_n \geq 1$ , при  $\rho \leq 1$ ,  $\rho = 1$ ,  $\rho \geq 1$ , соответственно. Заметим, что интервал между приходами заявок  $T$  обладает как свойством НСЛИ, так и свойством НСХИ, и поэтому Теорема 1 применима. В частности, при  $\rho = 1$  получаем

$$P_l = \frac{EL_n}{E\beta} = \frac{1}{E\beta}, \quad (10)$$

Таблица 2. Результаты регенеративного моделирования системы  $M / G / m / n$

Service	$\rho$	$m$	$n$	$k$	$\hat{L}_n$	$\hat{P}_l(k)$	$\Delta(k)$	$\hat{P}_l(k) - \Delta(k)$	$\hat{P}_l(k) + \Delta(k)$	$P_l$
Pareto	1,28	1	0	8 789	1,27	0,5604	0,0072	0,5532	0,5675	–
Pareto	1,28	1	5	759	6,56	0,2494	0,0211	0,2283	0,2706	–
M	1	1	0	10 042	0,99	0,4977	0,007	0,4907	0,5048	0,5
M	1	3	0	18 646	0,07	0,0676	0,0043	0,0633	0,0719	0,0625
M	4,06	2	0	7 570	1,64	0,6213	0,0077	0,6136	0,629	0,6193
M	4,06	2	10	13	472,23	0,5203	0,0104	0,5099	0,5307	0,5069
M	4,06	4	0	13 678	0,46	0,316	0,0084	0,3076	0,3244	0,316
M	4,06	4	10	3 198	0,47	0,0756	0,0106	0,065	0,0862	0,0822
M	4,06	4	20	1 718	0,7	0,0604	0,0131	0,0473	0,0734	0,05

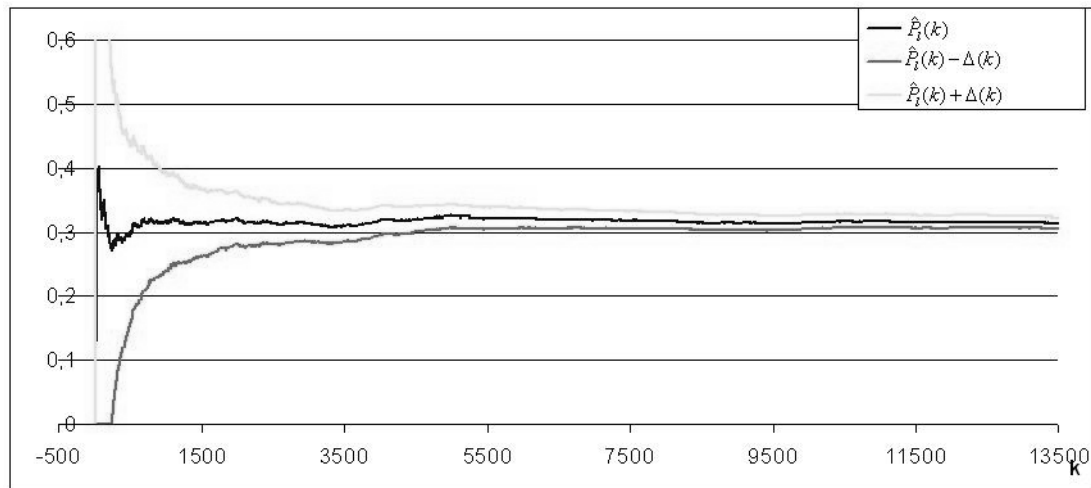


Рис. 3. Зависимость оценки и границ доверительного интервала в системе  $M / M / 4 / 0$  от числа регенераций при значении коэффициента загрузки  $\rho = 4,06$

Таблица 3. Результаты регенеративного моделирования системы  $M / M / 1 / n$

$\lambda$	$\mu$	$\rho$	$n$	$k$	$\hat{L}_n$	$\hat{P}_l(k)$	$\Delta(k)$	$\hat{P}_l(k) - \Delta(k)$	$\hat{P}_l(k) + \Delta(k)$	$P_l$
7	1,5	4,67	5	4	3456,750	0,7823	0,0076	0,7748	0,7899	0,7857
5	3	1,67	5	340	24,230	0,4123	0,0122	0,4001	0,4244	0,4115
4	4	1	3	3 991	0,980	0,1965	0,0091	0,1873	0,2056	0,2000
3	5	0,6	3	8 699	0,140	0,0621	0,0167	0,0454	0,0788	0,0562
1,5	8	0,19	3	16 096	0,001	0,0013	0,0007	0,0006	0,0019	0,0010

что позволяет использовать выборочное среднее длины цикла регенерации при оценке  $P_l$ . Численные результаты доверительного оценивания представлены в табл. 3, где  $P_l$  – вероятность потери заявки, вычисленная по формуле (4),  $\hat{P}_l(k)$  – оценка, построенная по  $k$  завершенным циклам регенерации,  $\Delta(k)$  – ширина доверительного интервала для оценки вероятности потери. Эксперименты проведены для систем с размером буфера  $n \leq 5$ , что дает достаточное число циклов регенерации за приемлемое время моделирования. Из табл. 3 видно, что оценка  $\hat{P}_l$  вероятности потери, полученная с использованием регенеративного метода, близка к значению  $P_l$ , вычисленной по формуле (4). Рис. 4 де-

монстрирует зависимость ширины доверительного интервала для  $\hat{P}_l$  от числа циклов регенерации  $k$ . Из табл. 3 видно, что эксперименты подтверждают зависимость оценки  $\hat{L}_n$  среднего  $EL_n$  от  $\rho$ , установленную Теоремой 1. В частности, видно, что при  $\rho = 1$ , значение  $\hat{L}_n$  близко к 1. В целом, результаты, полученные в ходе моделирования, дают хорошее согласие с утверждениями Теоремы 1.

### Заключение

В статье рассматриваются различные вопросы, связанные с вероятностью потери в системах обслуживания с конечным буфером. Рассмотрены некоторые аналитические свойства

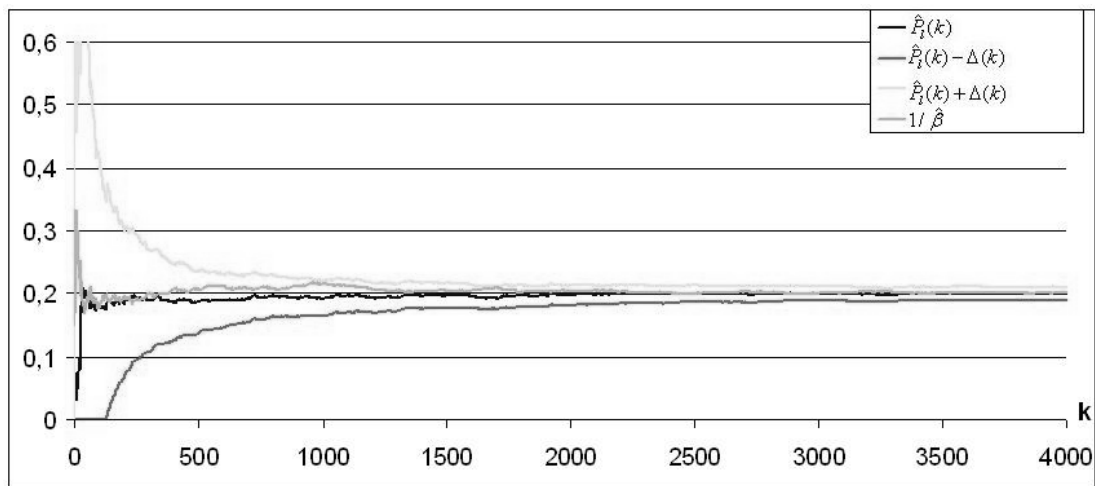


Рис. 4. Зависимость оценки и границ доверительного интервала в системе  $M/M/3/0$  и величины, обратной оценке длины цикла от числа регенераций при значении коэффициента загрузки  $\rho = 1$

вероятности потери, в частности, свойство монотонности. Изучена зависимость вероятности потери от величины буфера. В частности, показано, что если коэффициент трафика больше 1, то эта вероятность асимптотически перестает зависеть от величины буфера, когда он растет. Рассмотрены также свойства среднего числа потерь на цикле занятости системы, являющегося также циклом регенерации, в зависимости от типа распределения входного потока. Другим важным аспектом данной работы является использование регенеративного имитационного моделирования для точечного и доверительного оценивания вероятности потери. В статье также приведены численные результаты моделирования.

#### Литература

- Байхельт Ф., Франкен П. Надежность и техническое обслуживание. Математический подход // Радио и связь. М., 1988. С. 392.
- Abramov V. M. One property of a refusals stream // J. Appl. Prob. 1997. Vol. 34, N. 3. P. 800–805.
- Abramov V. M. Takács' Asymptotic Theorem and Its Applications: A Survey // Acta Applicandae Mathematica / Springer Science+Business Media B.V. 2008. Vol. 109. P. 609–651.
- Asmussen Applied Probability and Queues / New York: Springer, 2003. 2nd ed.
- Bratley P., Fox B. L. A guide to simulation / New York: Springer-Verlag, 1987. 2nd ed.
- Glynn P. W., Iglehart D. L. Simulation methods for queues: an overview // Queueing systems. 1988. Vol. 3. P. 221–237.
- Glynn P. W., Iglehart D. L. Conditions for the applicability of the regenerative method // Management Science. 1993. 39. P. 1108–1111.
- Glynn P. W., Whitt W. Logarithmic asymptotics for steady-state tail probabilities in a single-server queue // Adv. Appl. Prob. 1994. P. 131–156.

- Greiner M., Jobmann M., Kluppelberg C. Telecommunication traffic, queuing models and subexponential distributions // Queueing Systems. 1999. Vol. 33. P. 125–152.
- Law A. M., Kelton W. D. Simulation modeling and analysis/ New York: McGraw- Hill, 1991. 2nd ed.
- Leland W., Taqqu M., Willinger W., Wilson D. On the Self-Similar Nature of Ethernet Traffic // IEEE/ACM Transactions on Networking, 1994. Vol. 2. N. 1. P. 1–15.
- Morozov E. Weak regeneration in modeling of queueing processes // Queueing Systems. 2004. 46. P. 295–315.
- Morozov E. Communications systems: rare event simulation and effective bandwidths/ Pamplona: Universidad Publica de Navarra, 2004.
- Perkoz E. A., Richter R., Xia C. H. Characterizing Losses during busy periods in finite buffer systems // J. Appl. Prob. 2003. 40. P. 242–249.
- Resnick S. Heavy tail modeling and teletraffic data // The Annals of Statistics. 1997. Vol. 25. N. 5. P. 1805–1869.
- Serfozo R. Basics of applied stochastic processes / Berlin: Springer-Verlag, 2009.
- Taqqu M. S., Willinger W., Sherman R. Proof of a fundamental result in self-similar traffic modeling // Computer Communication Review. 1997. Vol. 27. P. 5–23.
- Willinger W., Taqqu M., Sherman R., Wilson D. Self-Similarity Through High-Variability: Statistical Analysis of Ethernet LAN Traffic at the Source Level // IEEE/ACM Transactions on Networking. 1997. Vol. 5. N. 1. P. 71–86.
- Wolff R. W. Stochastic Modeling and the Theory of Queues/ Prentice-Hall, 1989.
- Wolff R. W. Loses per cycle in a single-server queue // J. Appl. Prob. 2002. P. 905–909.

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:**

**Горичева Руслана Сергеевна**

аспирантка

Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910

эл. почта: lana--@mail.ru

тел.: (8142) 763370

**Морозов Евсей Викторович**

ведущий научный сотрудник, д. ф.-м. н.

Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910

эл. почта: emorozov@karelia.ru

тел.: (8142) 763370

**Goricheva, Ruslana**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: lana--@mail.ru

tel.: (8142) 763370

**Morozov, Evsey**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: emorozov@karelia.ru

tel.: (8142) 763370

УДК 519.6 : 539.2

## ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ С ДИНАМИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Ю. В. Заика<sup>1</sup>, Е. П. Борматова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

<sup>2</sup> *Государственное образовательное учреждение высшего профессионального  
образования Петрозаводский государственный университет*

Рассматривается обратная задача определения параметров нелинейной модели водородопроницаемости с динамическими граничными условиями. По известному из эксперимента выходному десорбционному потоку предложен алгоритм оценки параметров переноса: адсорбции, десорбции, растворения и диффузии.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** водородопроницаемость, математическое моделирование, оценка параметров.

**Yu. V. Zaika, E. P. Bormatova. PARAMETRIC IDENTIFICATION OF  
HYDROGEN PERMEABILITY MODEL WITH DYNAMICAL  
BOUNDARY CONDITIONS**

The inverse problem of parameters determination of nonlinear model of hydrogen permeability is considered. Using the outlet desorption flux known from experiment the algorithm of transition parameters (adsorption, desorption, solution and diffusion) estimation is proposed.

**К e y w o r d s :** hydrogen permeability, mathematical modelling, parameters estimation.

---

### Введение

Исследования в области водородного материаловедения инициированы перспективами водородной энергетики и проблемой защиты конструкционных материалов от водородной коррозии [Водород в металлах, 1981]. Экспериментальный метод проницаемости является классическим [Кунин и др., 1972]. Вместе с тем при обработке экспериментальных данных имеется

проблема обратных задач. Одна из основных причин: обратные задачи математической физики характеризуются высокой чувствительностью к экспериментальным и вычислительным погрешностям. Кроме того, традиционный «метод подгонки» обычно не гарантирует единственности набора параметров, удовлетворительно аппроксимирующих экспериментальные кривые. Поэтому, во-первых, необходимо определить объем данных, достаточный для однозначной параметрической идентификации модели. Во-вторых, алгоритм оценки

параметров должен быть корректным (в частности, не содержащим дифференцирования зашумленных измерений).

Будем ориентироваться на следующий вариант эксперимента. Пластина толщины  $\ell$  из исследуемого материала (металла или сплава) является перегородкой вакуумной камеры. При заданной температуре  $T = \bar{T}$  образца с входной стороны скачкообразно создается давление  $\bar{p}_0 = \text{const}$  молекулярного водорода. С выходной стороны производится вакуумирование и с помощью масс-спектрометра определяется десорбционный поток  $J = J(t)$ ,  $t$  – время. Потоки подразумеваем отнесенными к единице площади, т. е. речь идет о плотностях. По достижении стационара  $J(t) \approx \bar{J} = \text{const}$ ,  $t \geq t_*$ , на входе резко увеличиваем давление до значения  $\bar{p}_0^+ > \bar{p}_0$  и ожидаем последующего установления десорбции при  $t \geq t^* > t_*$ . Такой вариант предпочтительнее двух классических экспериментов, поскольку нет необходимости в повторной дегазации образца и «старт» второго этапа происходит не с нулевого начального распределения атомарного водорода в пластине, а с предшествующего стационара (разнообразие повышает информативность). Выход на стационар носит асимптотический характер. Но  $t_*$  и  $t^*$  не следует выбирать слишком большими, чтобы переходные процессы «не потерялись» на фоне стационарных.

Давления и концентрацию  $c(t, x)$  растворенного водорода считаем относительно малыми,  $D \neq D(c)$ . Поскольку речь идет об обратных задачах и экспериментальные погрешности в лучшем случае оцениваются в 10–20%, то авторы старались ограничиться минимальным набором коэффициентов, подлежащих определению.

### Математическая модель

Рассмотрим следующую модель с поверхностной десорбцией [Габис и др., 1987]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (t, x) \in (0, t_*) \times (0, \ell), \quad (1)$$

$$c(0, x) = 0, \quad x \in [0, \ell], \quad P \equiv \mu s \bar{p}_0,$$

$$\dot{q}_0(t) = P - bq_0^2(t) + D \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0}, \quad (2)$$

$$\dot{q}_\ell(t) = -bq_\ell^2(t) - D \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=\ell}, \quad t \in [0, t_*],$$

$$c_0(t) \equiv c(t, 0) = gq_0(t), \quad c_\ell(t) \equiv c(t, \ell) = gq_\ell(t). \quad (3)$$

Здесь  $\mu$  – кинетический коэффициент,  $s(T)$  – коэффициент прилипания,  $b(T)$  – коэффициент десорбции,  $g(T)$  – параметр соответствия поверхностной и объемной концентраций. Зависимость параметров диффузии и десорбции от температуры  $T$  считаем аррениусовской:

$$D = D_0 \exp\{-E_D / [RT]\}, \quad b = b_0 \exp\{-E_b / [RT]\}.$$

При необходимости допустимы другие зависимости от  $T$ . Температурная зависимость  $\mu$  формально учтена в коэффициенте  $s(T)$ . Далее это непринципиально, поскольку в течение эксперимента температура постоянна.

Смысл граничных условий (2): дисбаланс потоков адсорбции, десорбции и диффузии идет на накопление атомов водорода на поверхности. Вакуумная система достаточно мощная, чтобы пренебречь ресорбцией:  $\mu s p_\ell \approx 0$ . Более точная модель растворения на поверхности:

$$k^+(T)c_{0,\ell}(t)[1 - q_{0,\ell}(t)q_{\max}^{-1}] - k^-(T)q_{0,\ell}(t)[1 - c_{0,\ell}(t)c_{\max}^{-1}] = \pm D(T)c_x|_{0,\ell}.$$

Но когда диффузия значительно медленнее растворения и концентрации малы, получаем условие быстрой растворимости  $c_{0,\ell} \approx gq_{0,\ell}$ , где  $g = k^- / k^+$ . Если поверхность изотропна (в смысле  $E_{k^-} \approx E_{k^+}$ ), то параметр  $g$  слабо зависит от  $T$ . По измерениям известна функция  $J(t) \equiv J_\ell(t) = bq_\ell^2(t)$ . Кривые проницаемости имеют стандартный S-образный вид кривой насыщения. Для второго этапа эксперимента ( $t \in [t_*, t^*]$ ) начальное распределение  $c(t_*, x)$  – стационар, а давление  $\bar{p}_0$  заменяем на  $\bar{p}_0^+$ . Требуется определить значения  $D, g, b, s$  при температуре эксперимента  $T = \bar{T}$ . В алгоритме идентификации используются интегральные соотношения, устойчивые к помехам.

Численное решение прямой задачи. Вначале входная сторона пластины испытывает ударную нагрузку из-за скачка давления. В связи с этим (и нелинейностью задачи) схема вычислений носит неявный и итерационный характер. Для аппроксимации уравнения (1) используем шеститочечный двухслойный шаблон по схеме Кранка-Николсон. Перейдем к граничным условиям. В стандартных обозначениях



$q_{0,\ell}^k \approx q_{0,\ell}(t_k)$ ,  $c_i^k \approx c(t_k, x_i)$ , здесь  $t_0 = 0$ ,  $x_0 = 0$ ,  $x_n = \ell$ ,  $\tau = \Delta t$ ,  $h = \Delta x$ . Из начальных данных определяем  $q_{0,\ell}^0 = c_i^0 = 0$ ,  $0 \leq i \leq n$ . На каждом слое по времени аппроксимируем  $c_x(t_k, 0) \approx [-3c_0^k + 4c_1^k - c_2^k]/2h$ . Аналогичные выкладки при  $x = \ell$  в изложении опускаем. Заменяв производную по  $t$  конечной разностью  $(q_0^k - q_0^{k-1})/\tau = (c_0^k - c_0^{k-1})/(g\tau)$ , находим  $c_0^k = f_0(c_1^k, c_2^k)$  как положительный корень квадратного уравнения. Значения  $c_1^k, c_2^k$  предварительно подсчитываются по явной схеме. С текущими  $c_0^k, c_n^k$  решаем методом прогонки трехдиагональную систему линейных алгебраических уравнений и находим новые приближения  $c_1^k, c_2^k$  (и остальные значения  $c_i^k$ ,  $3 \leq i \leq n-1$ ). Снова решаем квадратное уравнение относительно  $c_0^k$  и повторяем вычисления до установления (обычно 2–3 итерации). Затем переходим к следующему слою по времени.

Результат счета контролировался выходом распределения  $c(t, x)$  на линейный стационар при соблюдении материальных балансов:

$$\int_0^\ell c(t, x) dx = -\int_0^t Dc_x(t, 0) dt + \int_0^t Dc_x(t, \ell) dt, \\ q_\ell(t) = -\int_0^t J_\ell(t) dt - \int_0^t Dc_x(t, \ell) dt. \quad (4)$$

Для второго этапа ( $t \in [t_*, t^*]$ ) построения аналогичны. Численные эксперименты проводились в широком диапазоне:  $D$  от  $10^{-9}$  до  $10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ ;  $b$  от  $10^{-20}$  до  $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ ;  $g$  от  $10^{-3}$  до  $10^6 \text{ 1/cm}$ ;  $s$  от  $10^{-10}$  до  $10^{-2}$ ;  $\bar{p}_0$  от 0,1 до 10 Torr;  $\mu = 1,46 \cdot 10^{21} \text{ 1/cm}^2 \text{ s Torr}$ . Толщина  $\ell$  варьировалась в пределах  $2 \cdot 10^{-2} - 2 \cdot 10^{-1} \text{ cm}$ , что соответствует экспериментальной практике. «Внутренние» параметры  $D, b, g, s$  («внешние»  $\ell, \bar{p}_0, \bar{p}_0^+$  задаются), порождающие кривые проницаемости, «забывались» и восстанавливались по излагаемой ниже методике. Затем анализировались качественные возможности алгоритма идентификации.

**Вырожденные модели.** Наряду с задачей (1)–(3), которую будем обозначать I, рассмотрим еще две. Задачу, в которой граничные условия (2), (3) заменены линейными

$$c_0(t) \equiv c(t, 0) = \tilde{c}_0 > 0, \quad c_\ell(t) \equiv c(t, \ell) = 0, \quad (5)$$

обозначаем II. Простейшая модель II не учитывает физико-химические процессы на поверхности, диффузия – единственный лимитирующий фактор. Плотность выходного потока атомов водорода определяется как  $J_{II}(t) = -Dc_x(t, \ell)$ . Решение  $c(t, x)$  понимается как обобщенное из-за несогласованности краевых условий при  $t \rightarrow +0$ . Для  $t > 0$  обычно пользуются представлением  $c(t, x)$  рядом Фурье. Примем  $\tilde{c}_0$  равной установившейся концентрации  $\bar{c}_0$  в задаче I. Это соответствует ситуации, когда поверхностные процессы значительно быстрее диффузии. Формально задача II – первого рода. Но при (см. (6))

$$\tilde{c}_0 = \bar{c}_0 = g\sqrt{b^{-1}(P - \bar{J}_I)}$$

она связана с нелинейной задачей I.

Рассмотренную в [Zaika, Vornatova, 2008] модель с граничными условиями

$$P - \tilde{b}c_0^2(t) = -D\frac{\partial c}{\partial x}\Big|_{x=0}, \quad \tilde{b}c_\ell^2(t) = -D\frac{\partial c}{\partial x}\Big|_{x=\ell}, \\ J_{III} \equiv \tilde{b}c_\ell^2(t), \quad [\tilde{b}] = \frac{cm^4}{s},$$

(с объемной десорбцией) обозначим III. Поскольку в модели I  $J_{0,\ell} \equiv bq_{0,\ell}^2 = bg^{-2}c_{0,\ell}^2$ , то переход I → III понимаем в следующем смысле: накопление на поверхности несущественно и  $\tilde{b} = b/g^2$ . Причина введения моделей II, III в том, что варьирование параметров I в указанных широких пределах может приводить к вырождению.

### Равновесие и стационар

Равновесная пара  $(\bar{p}, \bar{c})$  определяется приравниванием к нулю производных:

$$\mu\bar{p} = b\bar{q}^2, \quad \bar{c} = g\bar{q} \Rightarrow \bar{c} = \gamma\sqrt{\bar{p}}, \quad \gamma \equiv g\sqrt{\mu sb^{-1}}.$$

Тем самым модель соответствует эксперименту в области  $\bar{c} \sim \sqrt{\bar{p}}^{1/2}$ . Определение коэффициента равновесной растворимости  $\gamma$  является более простой задачей. Когда в эксперименте насыщения-дегазации пластины нельзя пренебречь поверхностной концентрацией, необходима следующая корректировка. Без ограничения общности поверхности единичны, торцами пренебрегаем. Количество атомов  $N$  после насыщения

численно равно  $\bar{c}\ell + 2\bar{q} = (g\ell + 2)\bar{q}$  – известное число  $Q$  после дегазации. Тогда из  $\mu s \bar{p} = b\bar{q}^2$  после подстановки  $\bar{q} = Q/(g\ell + 2)$  определяем комплекс

$$\tilde{\gamma} = (g\ell + 2)\sqrt{\mu s/b}, \quad Q = \tilde{\gamma}\sqrt{\bar{p}}.$$

При  $g\ell \gg 1$  можно считать, что в равновесии поверхностная концентрация незначительна на фоне объемной и  $\tilde{\gamma} = \ell\gamma$ . Когда известен коэффициент  $\gamma$  или  $\tilde{\gamma}$ , исключается один из параметров поверхностных процессов. Но другие эксперименты характеризуются своими погрешностями и требуют затрат. Постараемся обойтись без предварительного определения  $\gamma$  или  $\tilde{\gamma}$ .

Стационарное распределение водорода линейно. В модели I:

$$\dot{q}_{0,\ell} = 0, \quad c_\ell = 0 \Rightarrow c(t_*, x) = -D^{-1}\bar{J}x + \bar{c}_0, \quad (6)$$

$$\bar{c}_0 = g\sqrt{b^{-1}(P - \bar{J})}.$$

Из  $\bar{J} = b\bar{q}_\ell^2$  находим значение  $\bar{c}_\ell = g\bar{q}_\ell$  и приравниваем к  $c(t_*, \ell)$ :

$$\sqrt{\bar{J}} - \sqrt{P - \bar{J}} + \bar{J}\ell\sqrt{b}(gD)^{-1} = 0 \quad (P \equiv \mu s \bar{p}_0). \quad (7)$$

Из двух таких уравнений для давлений  $\bar{p}_0$  и  $\bar{p}_0^+$  исключаем  $\mu s$ :

$$\left(\frac{\bar{J}_+^2}{\bar{p}_0^+} - \frac{\bar{J}^2}{\bar{p}_0}\right)z^2 + 2\left(\frac{\bar{J}_+^{3/2}}{\bar{p}_0^+} - \frac{\bar{J}^{3/2}}{\bar{p}_0}\right)z + 2\left(\frac{\bar{J}_+}{\bar{p}_0^+} - \frac{\bar{J}}{\bar{p}_0}\right) = 0, \quad (8)$$

$$z \equiv \frac{\ell\sqrt{b}}{gD} \equiv \frac{\ell\sqrt{\bar{b}}}{D}.$$

Корни разного знака, комплекс параметров  $z$  определяется однозначно. Затем из (7) находим  $s$ . Целесообразно предварительно уравнение (8) разделить на  $\bar{J}$  и перейти к безразмерной переменной  $z\sqrt{\bar{J}}$ . В модели III

$$\sqrt{\bar{J}} - \sqrt{P - \bar{J}} + \bar{J}\tilde{b}^{1/2}\ell D^{-1} = 0$$

и по информации  $\{\bar{p}_0, \bar{p}_0^+, \bar{J}, \bar{J}_+\}$  однозначно определяются величины  $s$  и  $\tilde{b}^{1/2}\ell D^{-1}$ . С учетом  $\tilde{b} = b/g^2$  стационарные уровни  $\bar{J}$  в моделях I и III одинаковы при фиксированных  $P$ . Параметр  $\tilde{b} = b/g^2$  в силу  $J_{0,\ell} \equiv bq_{0,\ell}^2 = bg^{-2}c_{0,\ell}^2$  имеет смысл объемного коэффициента десорбции. При фиксированных  $D, s$  и  $P \gg \bar{J}$  из соотно-

шения (7) получаем  $\lg \bar{J} = -(\lg \tilde{b})/2 + \text{const}$ , т. е. линейную зависимость в логарифмических координатах.

### Время запаздывания

Рассмотрим функцию  $S(t)$ , равную интегралу на отрезке времени  $[0, t]$  от плотности десорбции  $J(\tau)$ . Это количество атомов  $H$ , десорбировавшихся с единичной площадки при  $x = \ell$  за время  $t$ . График этой выпуклой функции имеет наклонную асимптоту. Точка пересечения асимптоты с осью  $t$  называется временем запаздывания  $t_0$ . Уравнение касательной к графику  $S(t)$  в точке  $(t_*, S_*)$ :

$$S = S_* + J(t_*) \cdot (t - t_*) \quad (\dot{S} = J).$$

Следовательно, значение  $t_0 \in R_+$  достаточно точно вычисляется как  $t_0 = t_* - S_*/\bar{J}$ ,  $S_* \equiv S(t_*)$ . Здесь  $t_*$  – время установления выходного потока:  $J(t) \approx \bar{J} = \text{const}$ ,  $t \geq t_*$ . Для краевой задачи II ( $c_0(t) = \tilde{c}_0$ ,  $c_\ell(t) = 0$ ,  $J_{II} = -Dc_x(t, \ell)$ ) имеется явное выражение  $t_0 = \ell^2/6D$  [Кунин и др., 1972]. Важно, что  $t_0^{II}$  не зависит от  $\tilde{c}_0$ .

*Замечание.* Обычно считают  $c_0(t) = \bar{c}$ , где  $\bar{c} \sim \bar{p}_0^{1/2}$  – равновесная с давлением  $\bar{p}_0$  концентрация. В контексте задачи I полагаем  $\tilde{c}_0 = \bar{c}_0$ : быстро устанавливаются поверхностные процессы и лимитирует диффузия. Поскольку в равновесии  $P = b\bar{q}_\ell^2$ , а в стационаре  $P - b\bar{q}_\ell^2 = \bar{J}$ , то  $\bar{c} > \bar{c}_0$ . Кроме того,

$$\bar{J} = b\bar{q}_\ell^2 \Rightarrow \bar{c}^2 = \bar{c}_0^2 + \bar{c}_\ell^2, \quad \bar{J} = \bar{J}_I < \bar{J}_{II}.$$

Когда поток атомов  $H$  на входную поверхность значительно превосходит пропускную способность мембраны ( $P \gg \bar{J}$ ), имеем  $\bar{c}_0 \approx \bar{c}$ . Наконец, из формулы (6) следует  $\bar{c}_0 = \bar{c}_\ell + \bar{J}\ell D^{-1}$ , и если  $\bar{c}_\ell \ll \bar{c}_0$ , то  $\bar{c}_0 \approx \bar{J}\ell D^{-1}$  (в задаче II  $\bar{c}_0 = \bar{J}_{II}\ell D^{-1}$ ).

Будем говорить, что модель I вырождается в II (I  $\rightarrow$  II), если при заданных  $D, b, s, g$  и  $\tilde{c}_0 = \bar{c}_0 = g\sqrt{b^{-1}(P - \bar{J})}$  ( $\bar{J} = \bar{J}_I$ ) плотности десорбции  $J_I(t) \equiv J(t) = bq_\ell^2(t)$  и  $J_{II}(t) = -Dc_x(t, \ell)$  равны как функции времени. Совпадение подра-

зумеваются с погрешностью много меньшей экспериментальной. Аналогично интерпретируем обозначения  $\text{III} \rightarrow \text{II}$ ,  $\text{I} \rightarrow \text{III}$ . В силу  $\tilde{b} = b/g^2$  значения  $\bar{c}_0$  и  $\bar{J}$  в I такие же, как и в III.

**Критерии вырождения.** Так как функция  $S(t)$  строго выпукла, но известна приближенно, то в качестве критерия вырождения  $\text{I} \rightarrow \text{II}$  можно взять соотношения  $t_0^I \approx t_0^{II} = \ell^2/6D$  и  $\bar{c}_0 \approx \bar{J}\ell D^{-1}$  ( $\bar{c}_\ell \ll \bar{c}_0$ ). Они должны выполняться совместно. Сравним проникающие потоки. Поскольку в задаче I граничные концентрации равны  $\{\bar{c}_0, \bar{c}_\ell\}$ , а в II –  $\{\bar{c}_0, 0\}$ , то справедлива оценка  $\bar{J}_I < \bar{J}_{II}$ . Значение  $\bar{J}_{II} = z^{-1} \sqrt{\mu s \bar{p}_0 - \bar{J}_I}$  определяется из  $\bar{c}_0 = g \sqrt{b^{-1}(P - \bar{J}_I)} = \bar{J}_{II} \ell D^{-1}$ . Кроме того:

$$\bar{J}_I = b \bar{q}_\ell^2 \Rightarrow \bar{c}_\ell = g \sqrt{b^{-1} \bar{J}} \Rightarrow \bar{c}_0 / \bar{c}_\ell = \chi,$$

$$\chi \equiv \sqrt{P \bar{J}_I^{-1} - 1} > 1 \quad (2 \bar{J}_I < P).$$

В обозначениях  $\chi, z, I \equiv \sqrt{J}$  уравнение стационара (7) запишется более компактно:  $\bar{I}z + 1 = \chi$ . Параметр  $\chi$  дополнительно характеризует зону вырождения  $\text{I} \rightarrow \text{II}$  в смысле  $\bar{c}_\ell \ll \bar{c}_0 \sim \chi \gg 1$ .

Приведем комментарии качественного характера. В модели I концентрации  $q_0, q_\ell$  могут оказаться сравнимыми ( $\chi \approx 1$ ). При фиксированных  $D, g$  определяющим является произведение  $bP$  – чем оно меньше, тем «дальше» модели I и II. Если значительно уменьшить падающий на входную поверхность поток  $P = \mu s \bar{p}_0$ , то проникающий поток  $\bar{J}$  будет очень мал и  $\bar{c}_\ell \approx \bar{c}_0$ . Если уменьшить  $b$ , то на выходе десорбция будет слабой, что способствует росту  $\bar{c}_\ell$  ( $c_\ell(t)$  монотонно растет до уровня  $\bar{c}_\ell$ ). Обратное, если  $b$  велик, то на выходной стороне активная десорбция понижает концентрацию  $\bar{c}_\ell$  и в пределе получаем задачу II с  $c_\ell(t) = 0$ . Рост  $bP$  влечет уменьшение времени установления концентрации:  $c_0(0) = 0 \rightarrow \bar{c}_0$ . Когда модели перекрываются ( $\text{I} \rightarrow \text{II}$ ), большие (но не слишком) вариации  $s, b$  практически не влияют на запаздывание  $t_0 \approx \ell^2/6D$ . В этом и проявляется некорректность обратной задачи. Подчеркнем, что вариации

$b, s \bar{p}_0$ , сохраняющие их произведение, практически не меняют  $t_0^I$ .

Приведенные рассуждения дают основание наряду с временем запаздывания ввести в рассмотрение диффузионное и поверхностное времена:  $\xi = \ell^2/2D$  и  $\eta = 2/\sqrt{bP}$ . Если  $\eta \gg \xi$ , то лимитирующим фактором являются поверхностные процессы. При  $\eta \ll \xi$  лимитирует диффузия (вырождение  $\text{I} \rightarrow \text{II}$ ). Разность  $\tilde{t}_0 = t_0 - t_0^{II}$  ( $t_0^{II} = \xi/3$ ) показывает, насколько поверхностные процессы увеличивают запаздывание. Следовательно,  $\tilde{t}_0$  и  $\eta$  должны быть связаны монотонной зависимостью. Удобнее сравнивать относительные величины:  $\delta t_0 = (t_0 - t_0^{II})/\xi$  и  $\eta/\xi$ . Коэффициент растворения  $g$  является связующим между поверхностью и объемом и играет особую роль.

*Замечание.* Помимо качественных рассуждений и соображений размерности ( $\xi \sim \ell^2/D$ ,  $\eta \sim 1/\sqrt{bP}$ ) приведем обоснование множителей. Рассмотрим стационар в модели II:

$$c_0(t) = \bar{c}_0, \quad c_\ell(t) = 0, \quad c(t, x) = (\ell - x) \bar{c}_0 / \ell, \quad t \geq t_*.$$

Обозначим через  $\bar{v}(x)$  «среднюю скорость стационарного переноса» в сечении  $x \in (0, \ell)$ . Тогда  $\bar{J} = \bar{v}(x) c(t_*, x) = D \bar{c}_0 / \ell$ ,

$$dt = dx / \bar{v}(x) = (\ell - x) dx / D$$

и после интегрирования на  $[0, \ell]$  получаем характеристическое время  $\tau_* = \ell^2/2D$ . Это значение возникает и при вероятностном анализе диффузии [Зельдович, Мышкис, 1973, гл. V]. Обратное. Пусть диффузия медленная на фоне поверхностных процессов. Рассмотрим установление

$$\dot{q}_0 = P - b q_0^2, \quad q_0(0) = 0 \rightarrow \bar{q}_0 = \sqrt{P/b}$$

( $Dc_x(t, 0) \approx 0$ ). Интегрируя, получаем

$$\sqrt{P} - \sqrt{b} q_0(t) = \exp\left[-2\sqrt{bPt}\right] \left(\sqrt{P} + \sqrt{b} q_0(t)\right),$$

$$1 - \sqrt{bP}^{-1/2} q_0(t) \leq 2 \exp\left[-2\sqrt{bPt}\right].$$

При  $t = \tau_* = \ell^2/2D$ ,  $N = 2$ , левая часть неравенства, характеризующая отклонение от установления на поверхности, меньше 3,7%. Можно было бы уточнить  $\tau_*$ , заменив в граничном условии функцию  $-Dc_x(t, 0)$  на  $\bar{J}$ :

$\dot{q}_0 = P - bq_0^2 - \bar{J}$ ,  $q_0(0) = 0 \rightarrow \bar{q}_0 = \sqrt{(P - \bar{J})/b}$ ,  
 $\tau_* = 2/\sqrt{b(P - \bar{J})}$ . Но стационарное значение  $\bar{J}$  зависит от всех параметров модели, а поскольку  $\bar{J} < P/2$ , то порядок оценки  $\tau_*$  не изменится.

Выясним теперь механизм влияния коэффициента быстрой растворимости  $g$  на свойства решений задачи I. Обозначим

$$F_0(t) \equiv -D \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_0 \quad (\bar{F}_0 = \bar{J}),$$

$$\Theta \equiv \bar{J}^{-1} \int_0^{t_*} [F_0(\tau) - \bar{J}] d\tau = \\ = - \left[ t_* - \bar{F}_0^{-1} \int_0^{t_*} F_0(\tau) d\tau \right] > 0.$$

Поясним смысл введения всплеск-времени  $\Theta$  (по аналогии с диффузионным и поверхностным временами). На начальном этапе входной диффузионный поток  $F_0(t)$  испытывает всплеск и затем  $F_0 \rightarrow \bar{J}$ . Продолжительность всплеска относительно невелика ( $\ll t_*$ ), но интеграл может оказаться значительной величиной. Следовательно,  $\Theta$  – интегральная мера продолжительности этого процесса. Геометрически  $\Theta$  – расстояние от нуля до точки пересечения с осью времени асимптоты графика количества атомов  $H$ , проникших в объем пластины с единичной поверхности. Аналогия с временем запаздывания. Когда модель I вырождается в II, значение  $\Theta$  (как и  $t_0$ ) можно вычислить аналитически:

$$\Theta = \Theta'' = \ell^2 / 3D = 2t_0'' . \text{ Это следует из}$$

$$\tilde{c}_0 = \bar{c}_0 = \bar{J}\ell / D, \quad t_0 = \ell^2 / 6D, \quad J = -Dc_x(t, \ell)$$

и материального баланса:

$$\int_0^\ell \bar{J} D^{-1} x dx = \int_0^{t_*} F_0 dt - \int_0^{t_*} J dt, \quad \frac{\bar{J}\ell^2}{2D} = [\Theta + t_*] \bar{J} - S_*$$

$$\Rightarrow 3t_0 = \Theta + t_* - S_* \bar{J}^{-1} = \Theta + t_0.$$

Отсюда  $\Theta = 2t_0$ . Здесь у  $J$ ,  $S_*$ ,  $t_*$ ,  $t_0$ ,  $\Theta$  подразумевается индекс II.

Остановимся на свойствах величины  $\Theta = \Theta'$ , характеризующей жесткость задачи переноса. Разделим  $\Theta$  на два слагаемых:  $\Theta = \Theta'' + \tilde{\Theta}$ . При  $t = t_*$  из баланса (4) с учетом  $-Dc_x(t, 0) = [F_0(t) - \bar{J}] + \bar{J}$ , представления (6) и условия  $Dc_x(t, \ell) = -J(t) - \dot{q}_\ell(t)$  имеем:

$$\bar{J}\Theta + \bar{J}t_* - S_* - \bar{q}_\ell = \int_0^\ell c(t_*, x) dx = \\ = \bar{c}_0 \ell - \frac{\bar{J}\ell^2}{2D} = \bar{c}_0 \ell - \bar{J}\xi.$$

Здесь  $S_*$  – интеграл от  $J(\tau) = bq_\ell^2(\tau)$ ,  $\tau \in [0, t_*]$ .

Подставляя выражения

$$\bar{c}_0 = \bar{c}_\ell + \bar{J}\ell / D, \quad \bar{c}_\ell = g\bar{q}_\ell = g\sqrt{\bar{J}/b},$$

после деления на  $\bar{J}$  для времени запаздывания  $t_0 = t_* - S_* / \bar{J}$  получаем соотношение

$$t_0 + \Theta = \frac{\ell^2}{2D} + \frac{g\ell + 1}{\bar{I}\sqrt{b}}, \quad I \equiv \sqrt{J} \Rightarrow \quad (9)$$

$$\tilde{t}_0 + \tilde{\Theta} = (g^{-1} + \ell)[\bar{J}\tilde{b}]^{-1/2}$$

Аналогичное выражение для модели III:

$$\tilde{t}_0 + \tilde{\Theta} = \ell[\bar{J}\tilde{b}]^{-1/2}.$$

Критерии вырождения  $\xi \ll \eta$ ,  $\xi \gg \eta$  асимптотические. Как указать «шкалу соизмеримости» в конкретной задаче, когда диапазон допустимых значений параметров относительно мал (не 5–10 порядков)? Запишем соотношение (9) в переменных

$$\xi = \ell^2 / 2D, \quad \eta = 2 / \sqrt{bP} : t_0 + \Theta = \xi + G\eta,$$

$$\tilde{t}_0 + \tilde{\Theta} = G\eta, \quad G \equiv \sqrt{PJ^{-1}}(g\ell + 1) / 2.$$

Переход I  $\rightarrow$  II характеризуется  $G\eta \rightarrow 0$  ( $G\eta \ll \xi$ ),  $G = G(D, b, g, s)$ . Для оценки влияния поверхностных процессов на водородопроницаемость необходимо исследовать окрестность соизмеримости  $G\eta \sim \xi$ .

Для дальнейшего анализа удобно преобразовать множитель  $G$ . Введем безразмерный параметр  $\nu = \sqrt{g\ell}$ , характеризующий соизмеримость емкостей поверхности и объема пластины (в равновесии в объемном столбике под единичной площадкой находится  $qg\ell$  атомов водорода). Воспользуемся выражением  $g\ell / \bar{J}$  из уравнения стационара:

$$G = \frac{1}{2} \left( \nu + \frac{1}{\nu} \right) \sqrt{g\ell P \bar{J}^{-1}} = M \left( \nu + \frac{1}{\nu} \right) \sqrt{\frac{\xi}{\eta}},$$

$$M \equiv \left( \frac{\sqrt{P}}{\sqrt{P - \bar{J}} - \sqrt{\bar{J}}} \right)^{1/2} > 1, \quad G\eta = M \left( \nu + \frac{1}{\nu} \right) \sqrt{\xi\eta}$$

$$\Rightarrow \tilde{t}_0 + \tilde{\Theta} = t_0 + \Theta - \xi = M \left( \nu + \frac{1}{\nu} \right) \sqrt{\xi\eta}.$$

В знаменателе дроби в  $M$  под знаком корня выполняется  $\sqrt{P-\bar{J}}-\sqrt{\bar{J}}=\bar{J}_z > 0$ ,

$$\sqrt{P-\bar{J}}-\sqrt{\bar{J}}=\sqrt{P}-\sqrt{\bar{J}}+o(\sqrt{\bar{J}}),$$

$$\bar{J}=\bar{J}(D, b, g, s) < P/2.$$

Основной вариант. Рассмотрим условие  $P \gg \bar{J}$ , когда падающий на вход поток значительно превосходит пропускную способность материала. Этого можно добиться за счет  $\{\bar{p}_0, \ell\}$ . Уменьшение  $\bar{p}_0$  увеличивает время эксперимента и снижает точность измерений. Поэтому понятно стремление увеличить  $P$ . Но желательно не доводить дело до  $\sqrt{P} \gg \bar{I}$ , поскольку растет некорректность задачи оценивания  $b, g$ . Вместе с тем, область эксперимента  $\sqrt{P} \gg \bar{I}$  (проверяется после определения  $s$  по двум стационарам) позволяет заметить качественные закономерности, которые в более широком диапазоне подтверждаются численным анализом. Итак, при  $M \approx 1$  получаем

$$\sigma \equiv \tilde{t}_0 + \tilde{\Theta} = \left( \nu + \frac{1}{\nu} \right) \sqrt{\xi \eta}, \quad \nu \equiv \sqrt{g \ell} \quad (10)$$

$$\Rightarrow \delta \sigma \equiv \frac{\sigma}{\xi} = \delta \tilde{t}_0 + \delta \tilde{\Theta} = \left( \nu + \frac{1}{\nu} \right) \sqrt{\frac{\eta}{\xi}},$$

где  $\delta t_0 = \tilde{t}_0 / \xi$ ,  $\delta \Theta = \tilde{\Theta} / \xi$ ,  $\tilde{t}_0 = t_0 - t_0''$ ,  $t_0'' = \ell^2 / 6D$ ,  $\tilde{\Theta} = \Theta - \Theta'' = \Theta - 2t_0''$ . Отсюда ясно, что величины  $\sigma$  и  $\delta \sigma$ , характеризующие отклонение модели I от II по входному всплеску и запаздыванию, зависят лишь от седлового параметра  $g$  и соотношения времен  $\xi = \ell^2 / 2D$ ,  $\eta = 2 / \sqrt{bP}$  ( $\sigma$  – от среднего геометрического времени,  $\delta \sigma$  – от их отношения). Выбором  $\ell$  можно влиять на коэффициент усиления  $(\nu + 1/\nu)$ . Для модели III  $\sigma = \nu \sqrt{\xi \eta}$  точка перегиба отсутствует.

Результаты численного моделирования. Для фиксированных значений  $P, D$  (в указанных выше границах) рассматривались значения  $\nu \in [10^{-2}, 10^2]$  и варьированием параметра десорбции  $b$  определялся примерный диапазон соизмеримости  $G\eta / \xi \in [10^{-2}, 10^2]$ . Величины  $\tilde{\Theta}$  и  $\tilde{t}_0$  характеризуют «вход» и «выход». При  $P \gg \bar{J}$  ( $\sqrt{P} \gg \bar{I}$ ) знаем качественное поведение их суммы  $\sigma$ . Желательно иметь информацию о них в отдельности.

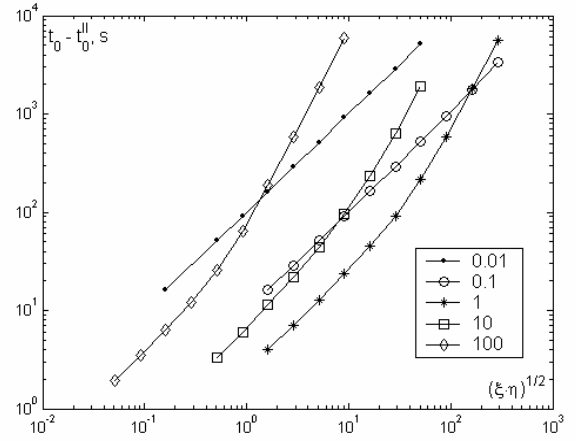


Рис. 1. Зависимость  $\tilde{t}_0$  от  $\sqrt{\xi \eta}$  (перегиб при  $\nu = 1$ )

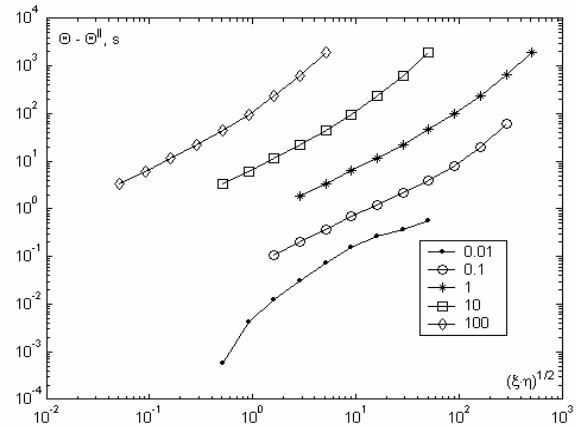


Рис. 2. Зависимость  $\tilde{\Theta}$  от  $\sqrt{\xi \eta}$  (монотонность по  $\nu$ )

На рис. 1, 2 представлены зависимости  $\tilde{t}_0, \tilde{\Theta}$  от  $\sqrt{\xi \eta}$  при различных  $\nu \in [10^{-2}, 10^2]$ . Графики  $\delta t_0, \delta \Theta$  от  $\sqrt{\eta / \xi}$  качественно аналогичны (перегиб по  $\nu$  и его отсутствие). Для определенности фиксированы значения  $\bar{p}_0 = 0,1$ ,  $\ell = 0,01$ ,  $D = 10^{-6}$ , их вариации не приводят к качественным изменениям графиков. Указанным во врезках значениям  $\nu$  соответствуют  $g = \nu^2 / \ell$ . Абсцисса  $x = \sqrt{\xi \eta}$  дает значение комплекса  $bs = 4\xi^2 / (x^4 \mu \bar{p}_0)$ , определяющего время запаздывания  $t_0 = t_0'$ . Соизмеримость времен  $G\eta \sim \xi$  иллюстрируется таблицей.

Соизмеримость времен  $G\eta \sim \xi$

$\nu$	0,01	0,1	1	10	100
$G\eta / \xi$	0,3–100	0,3–70	0,1–100	0,3–200	0,3–100

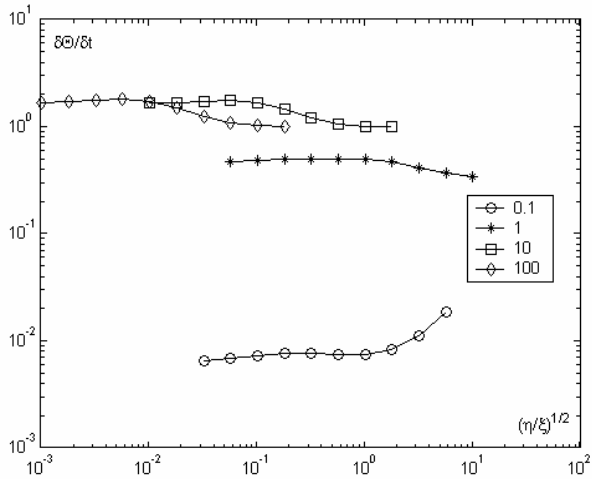


Рис. 3. «Производная входа по выходу»:  $\delta\Theta/\delta t_0$  от  $\sqrt{\eta/\xi}$

Рис. 3 демонстрирует почти постоянство «производной входа по выходу», т. е. слабую зависимость  $\delta\Theta/\delta t_0$  от поверхностного времени. Управляющим параметром является в основном  $g$ . При переходе через значение  $\nu = 1$  перегиб происходит только у  $\tilde{t}_0$ , при этом  $\tilde{\Theta}$  растет монотонно с ростом  $\nu$  до значения «насыщения»  $\tilde{\Theta}^{III}$  (для малых  $\nu$  может оказаться  $\tilde{\Theta} < 0$ ). Формула (10) получена в предположении  $\bar{J} \ll P$ , но вычисления показали, что положение точки перегиба не меняется в широком диапазоне параметров (рис. 4, 5). Рис. 6 показывает динамику перехода I  $\rightarrow$  III с ростом  $g$ .

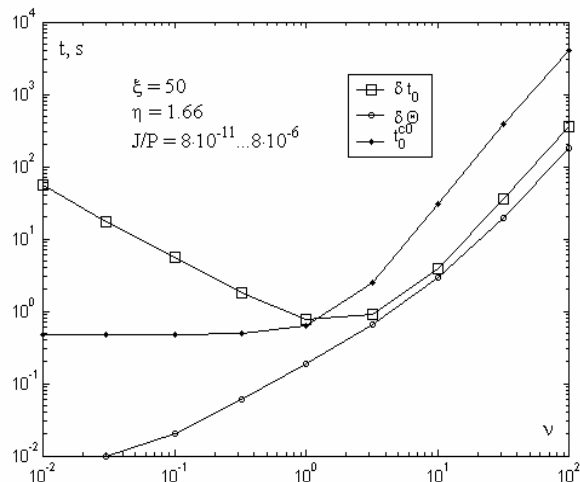


Рис. 4. Сравнительное поведение времен запаздывания,  $\bar{J} \ll P$

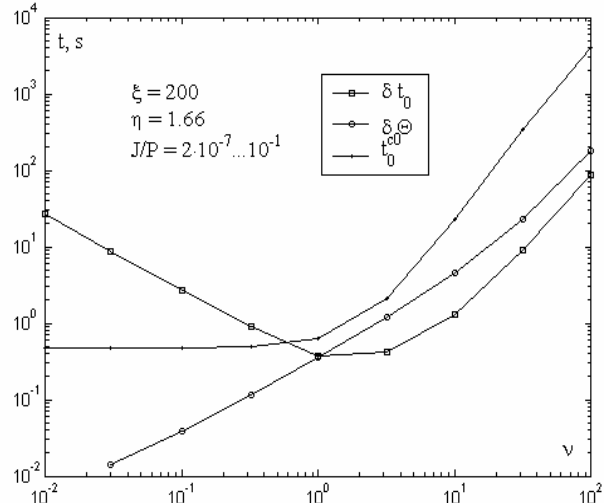


Рис. 5. Сравнительное поведение времен запаздывания,  $\bar{J} \approx P$

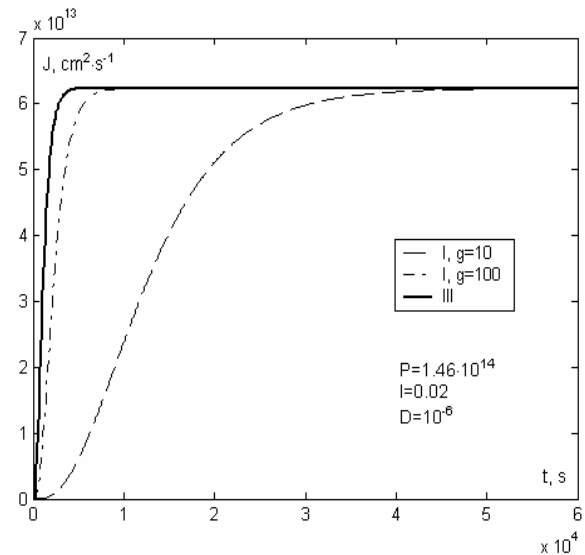


Рис. 6. Динамика перехода модели I в III с ростом  $g$

Остановимся подробнее на зависимости показателя пропускной способности пластины  $\bar{J}/P$  от параметров моделей I и III. Численно установлено, что при фиксированном  $\xi$  в модели III приращение времени запаздывания  $\tilde{t}_0^{III} = t_0^{III} - t_0^{II}$  и стационарная водородопроницаемость  $\bar{J}/P$  зависят только от произведения  $\tilde{b}P$ . Обозначим  $\nu^{III} \equiv [\tilde{b}P]^{1/2}$ . Величина  $\nu^{III}$  имеет размерность скорости и характеризует динамику поверхностных процессов при быстром насыщении поверхности.

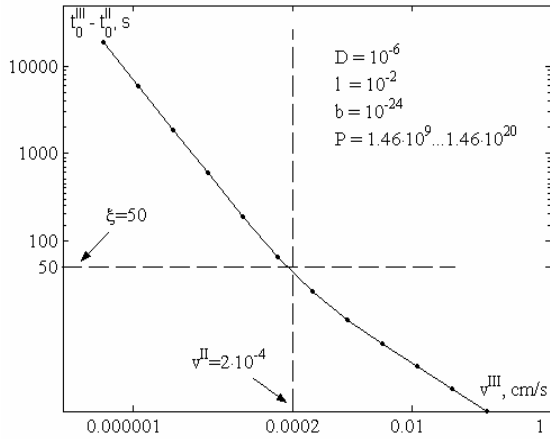


Рис. 7. Зависимость  $\tilde{t}_0$  от  $\sqrt{\tilde{b}P}$  (модель III)

Рис. 7 демонстрирует уменьшение  $\tilde{t}_0^{III}$  с ростом поверхностной скорости  $v^{III}$ . При  $v^{III} = v^{II} \equiv 2D/\ell$  ( $v^{II}$  – «средняя скорость» диффузионного переноса в модели II) с относительно малой погрешностью справедливо  $\tilde{t}_0 \approx \xi$  ( $\xi = \ell^2/2D$  – диффузионное время).

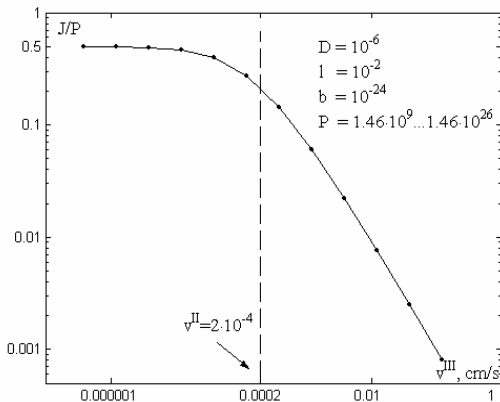


Рис. 8. Зависимость  $\bar{J}/P$  от  $\sqrt{\tilde{b}P}$  (модель III)

Рис. 8 показывает, как вместе с  $\tilde{t}_0^{III}$  уменьшается проницаемость  $\bar{J}/P$ . При  $v^{III} \ll v^{II}$  показатель  $\bar{J}/P$  практически не зависит от  $v^{III}$  и близок к максимальному значению 1/2. С ростом  $v^{III}$  зависимость  $\bar{J}/P$  от  $v^{III}$  становится линейной в логарифмических координатах.

В модели I при фиксированном  $\xi$  отношение  $\bar{J}/P$  зависит только от скорости  $v^I \equiv \sqrt{\tilde{b}P}/g$ , поскольку стационарные потоки в I и III совпадают. Характер этой зависимости уточняет рис. 9.

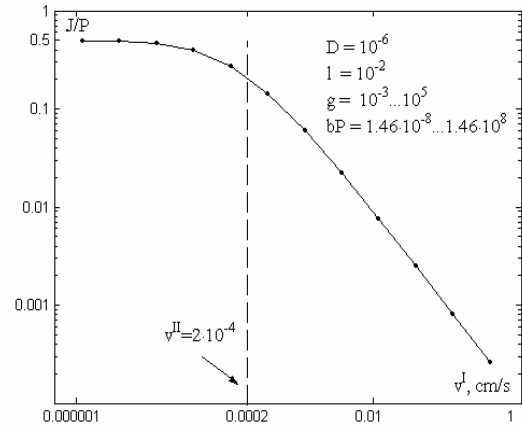


Рис. 9. Зависимость  $\bar{J}/P$  от  $\sqrt{\tilde{b}P}/g$  (модель I)

Но время задержки  $\tilde{t}_0 = t_0 - t_0^{II}$  определяется при этом не только величиной  $v^I$ , но и значением  $g$ . Поэтому при качественном исследовании модели I использовались не скорости, а времена. С ростом  $g$  происходит вырождение I  $\rightarrow$  III и точка с координатами  $(v^I, \xi)$  попадает на график  $\tilde{t}_0(v^I)$  (рис. 10).

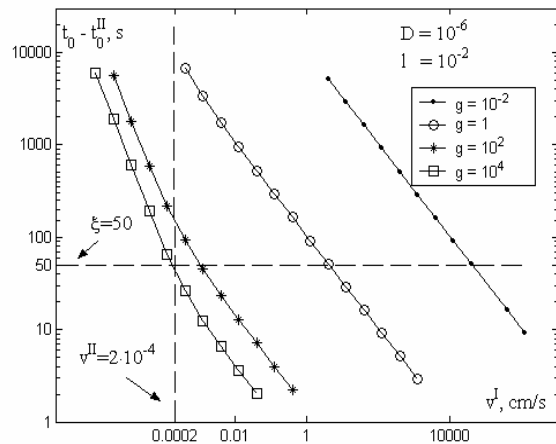


Рис. 10. Зависимость  $\tilde{t}_0$  от  $\sqrt{\tilde{b}P}/g$  (модель I)

### Алгоритм определения параметров

По классической кривой проницаемости нельзя однозначно сделать вывод о соизмеримости поверхностных процессов и диффузии. Если взять  $\bar{J}$  и  $t_0 = t_* - S_*/\bar{J}$  из задачи I и принять в II  $D = D_{II} = \ell^2/6t_0$ ,  $\tilde{c}_0 = \bar{J}\ell/D_{II}$ , то в II получим то же значение  $\bar{J}$ . Близкими могут быть и переходные процессы. Например, при  $g \sim 10^{-2}$ ,  $\tilde{b}P \sim 10^{-7}$ ,  $D_I = 10^{-6}$  концентрация  $\tilde{c}_0$  больше

$\ell\bar{J}/D_I$  почти в два раза и  $t_0 \approx \ell^2/2D_I$ . Однако  $J(t)$  в моделях I и II (при указанных  $D_{II}$  и  $\tilde{c}_0$ ) совпадают в пределах 5%. Поэтому и предлагается эксперимент с двумя давлениями и «стартом» на втором этапе не с нуля, а с достигнутого стационара.

Вначале продолжим рассуждения в рамках модели II ( $\tilde{c}_0 = \bar{c}_0$ ). Для второго этапа ( $\bar{p}_0 \rightarrow \bar{p}_0^+$ ,  $t \in [t_*, t_*^*]$ ) сделаем замену  $c_{\Delta}(t, x) = c(t, x) - c(t_*, x)$  и примем  $t_*$  за начало отсчета времени. Здесь  $c(t_*, x) = \bar{J}D^{-1}(\ell - x)$ ,  $\bar{J} = \bar{J}_{II}$ ,  $t_* = t_*^{II}$ ,  $t_*^* = t_{II}^*$ . Получим ту же краевую задачу для  $c_{\Delta}$ , только вместо  $\bar{c}_0, J_{II}(t)$  будут  $\Delta\bar{c}_0 = \bar{c}_0^+ - \bar{c}_0$  и  $\Delta J_{II} = J_{II} - \bar{J}_{II}$  ( $J_{II} = F_{\ell}$ ). Новое время запаздывания вычисляем по формуле

$$\Delta t_0 = \Delta t_* - \frac{\Delta S_*}{\Delta \bar{J}}, \quad \Delta S_* \equiv \int_0^{\Delta t_*} \Delta J_{II}(\tau) d\tau, \quad (11)$$

$$\Delta t_* \equiv t_*^* - t_*, \quad \Delta \bar{J}_{II} \equiv \bar{J}_{II}^+ - \bar{J}_{II}.$$

В исходном времени интегрирование ведется по  $\tau \in [t_*, t_*^*]$  и  $\Delta t_0$  определяется длиной отрезка между точкой  $(t_*, S_*)$  и точкой пересечения асимптоты для  $S_* + \Delta S(t)$  ( $t > t_*$ ) с горизонтальной прямой  $S = S_*$ . В модели II  $\Delta t_0 = t_0 = \ell^2/6D$  и не зависит от значений  $b, g, s, \bar{p}_0, \bar{p}_0^+$ .

**Вырожденный случай.** Напомним, что значения  $s$  и  $z = \ell\sqrt{b}(gD)^{-1} = \tilde{b}^{1/2}\ell D^{-1}$  определяются из анализа стационаров. По известной из эксперимента плотности десорбции  $J(t) = bq_{\ell}^2(t)$  вычисляем  $t_1 = t_* - S_*/\bar{J}$  и  $t_2 = \Delta t_* - \Delta S_*/\Delta \bar{J}$ , т. е. в (11) вместо  $\Delta J_{II}(t)$  используем  $\Delta J(t) = J(t) - \bar{J}$ ,  $\Delta \bar{J} = \bar{J}^+ - \bar{J}$ . Если  $t_i$  совпадают с высокой точностью, то обоснованно полагаем, что эксперимент находится в зоне I  $\rightarrow$  II. Ведь в модели I на втором этапе изменилось не только входное давление, но и начальные данные. Хотя теоретически времена запаздывания  $t_i$  могут совпасть и в I при специально подобранных  $\bar{p}_0, \bar{p}_0^+$ . Из  $t_i = \ell^2/6D$  находим оценку коэффициента диффузии  $D$ . Соотношение (7) дает значение комплекса  $g/\sqrt{b}$ . Однозначно определяется коэффициент объемной десорбции  $\tilde{b} = b/g^2$ .

Для разделения параметров  $g, b$  требуется дополнительная информация, например, значение равновесного коэффициента  $\gamma$  ( $\tilde{\gamma}$ ). Если  $t_1 \approx t_2$ , но  $P \sim \bar{J}$  и (или)  $P^+ \sim \bar{J}^+$ , то можно перейти к нелинейной модели, считая полученные оценки  $D, \tilde{b}$  подлежащими уточнению.

**Нелинейная модель.** Пусть вычисленные  $t_i$  существенно различны в масштабе времени установления  $t_*$ . Обратную задачу решаем последовательно в соответствии с усложнением модели: II  $\rightarrow$  III  $\rightarrow$  I. Известны значения  $t_i, s, z = \tilde{b}^{1/2}\ell D^{-1}$ ,  $P = \mu s \bar{p}_0$  и грубые оценки  $D, \tilde{b}$  после обработки измерений  $J(t)$  по линейной модели II.

1. В рамках нелинейной модели III справедливы соотношения

$$t_0 + \Theta = \xi + \ell[\tilde{b}\bar{J}]^{-1/2} = \xi(1 + 2/[z\bar{J}]) = \xi[\chi + 1],$$

$$t_0 = t_1 = t_* - S_*\bar{J}^{-1}, \quad z\bar{J} + 1 = \chi, \quad (12)$$

$$z \equiv \tilde{b}^{1/2}D^{-1}, \quad \chi \equiv \sqrt{P\bar{J}^{-1} - 1} > 1, \quad \Theta = \Theta^{III}(\tilde{b}, D).$$

Имеем нижнюю грань

$$t_0 + \Theta = \ell^2/D = 2[t_0^I + \Theta^I].$$

Решаем краевую задачу III с оценками  $D, \tilde{b}$  и вычисляем приближение  $\Theta^{(1)}$ . Заменив в уравнении (12) неизвестную величину  $\Theta$  на  $\Theta^{(1)}$ , находим значения  $\xi^{(1)}$  и  $D^{(1)} = \ell^2/2\xi^{(1)}$ ,  $\tilde{b}^{(1)} = (D^{(1)}z/\ell)^2$ . Повторяем итерации до установления, ориентируясь на невязку  $|\bar{J} - \bar{J}^{(1,2)}|$ .

2. Переходим к модели I, только когда существенна разница в переходном процессе  $J(t) - J_{III}(t)$  (поскольку  $\bar{J}_I = \bar{J}_{III}$ , см. рис. 6). Известны  $s, \tilde{b} = b/g^2, D = \tilde{b}^{1/2}\ell/z$ . Осталось определить параметр  $g$  или  $b$ . Выбирая  $\Theta^{(1)} = \Theta^{III}$ ,  $\Theta^{(1)} = 2\xi/3$  или даже  $\Theta^{(1)} = 0$  (когда очень велика разница между  $J_{III}$  и  $J, g \ll 1$ ), можно организовать итерационный процесс на основе соотношения (9). Но в конкретной задаче сразу ясно (см. рис. 6, 11) в каком направлении нужно изменять значения  $g$ .



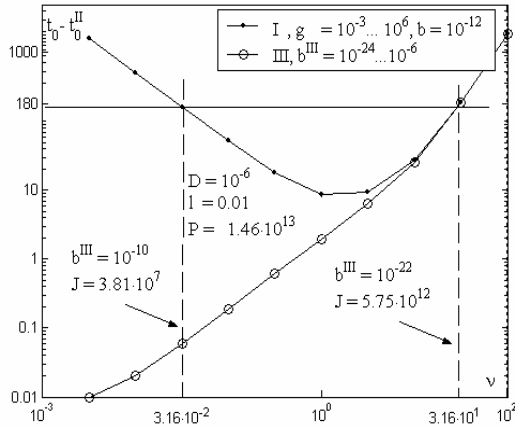


Рис. 11. Идентификация моделей I–III по временам запаздывания,  $b^{\text{III}} \equiv \tilde{b}$

### Сопряженные уравнения

Выше при уточнении величины  $\Theta$  использовался метод простой итерации. Можно реализовать и (квази)ньютоновский алгоритм, но это представляется громоздким. Основная проблема для сходимости – начальное приближение. Этот этап вызывает определенные трудности в связи с начальным всплеском входного потока  $F_0(t) = -Dc_x(t, 0)$ . Попытаемся сгладить эту неприятность, нацелившись на итерации интеграла от входной концентрации, которая монотонна и «глаже» (в силу  $\dot{q}_0 = P - bq_0^2 - F_0$  концентрация  $c_0$  интегрально зависит от  $F_0$ ).

Воспользуемся техникой сопряженных уравнений [Марчук, 1992]. Определим сопряженное к (1) уравнение  $\psi_t = -D\psi_{xx}$ . Для любого решения (сопряженной функции) интегрированием по частям получаем

$$0 = \int_0^{t_*} \int_0^{\ell} \psi [c_t - Dc_{xx}] dx dt = \int_0^{t_*} (\psi c) \Big|_{x=0}^{\ell} dx - D \int_0^{t_*} (c_x \psi) \Big|_{x=0}^{\ell} dt + D \int_0^{t_*} (\psi_x c) \Big|_{x=0}^{\ell} dt. \quad (13)$$

Смысл такого выбора  $\psi(t, x)$  в том, чтобы после преобразований не появилось двойного интеграла. Остались величины, связанные с краевыми условиями (и измерениями). В простейшем случае ( $\psi = 1$ ) с учетом  $z\bar{I} + 1 = \chi$  получаем уравнение баланса (9):

$$t_0 + \Theta = \frac{\ell^2}{2D} + \frac{g\ell + 1}{\bar{I}\sqrt{b}} = \frac{\ell^2}{2D} \cdot \frac{\chi + 1}{\chi - 1} + \frac{1}{\bar{I}\sqrt{b}}. \quad (14)$$

В тождество (13) можно подставить выражения  $c(t_*, x)$  согласно (6) и  $c(t, \ell) = g\sqrt{J/b}$ ,  $c(0, x) = 0$ . Нет информации о  $c_0(t)$  и  $F_0(t) \equiv -Dc_x(t, 0)$ . От одного из соответствующих слагаемых в (13) можно избавиться дополнительным ограничением  $\psi(t, 0) = 0$  или  $\psi_x(t, 0) = 0$ . Предпочтительнее исключить плотность входного потока  $F_0$  ( $\psi(t, 0) = 0$ ). Значения  $s, z$  считаем уже известными. Для варианта  $\psi = x/\ell$  (знаменатель для нормировки) с учетом граничного условия (2) ( $x = 0$ ) получаем

$$f(b, D) \equiv \frac{\bar{c}_0 \ell}{2} - \frac{\bar{J} \ell^2}{3D} + \frac{\bar{I}}{\sqrt{b}} + S(t_*) + \frac{gDS_{1/2}(t_*)}{\ell\sqrt{b}} - \frac{D}{\ell} \int_0^{t_*} c_0(t) dt = 0, \quad (15)$$

$$S(t_*) = S_* = \int_0^{t_*} J(\tau) d\tau, \quad S_{1/2}(t_*) = S_{1/2}^* = \int_0^{t_*} I(\tau) d\tau, \\ I = \sqrt{J}, \quad \bar{c}_0 = g\sqrt{b^{-1}(P - \bar{J})}.$$

По аналогии с  $t_0$  введем времена запаздывания для  $c_0(t)$  и  $I(t)$ :

$$t_{c0} = t_* - \bar{c}_0^{-1} \int_0^{t_*} c_0(\tau) d\tau, \quad t_{1/2} = t_* - \bar{I}^{-1} \int_0^{t_*} I(\tau) d\tau.$$

Тогда уравнение (15) с подстановкой  $z\bar{I} + 1 = \chi$  переписывается в форме

$$\frac{\ell^2}{6D} [\chi + 2] + \frac{z}{\sqrt{b}} = [\chi - 1]t_0 + t_{1/2} - t_{c0}\chi. \quad (16)$$

Подставим выражение  $\sqrt{b}$  из уравнения (14):

$$\xi = \tilde{\Theta}[\chi - 1] + t_{c0}\chi - t_{1/2} \\ (\xi \equiv \ell^2/2D, \quad \tilde{\Theta} \equiv \Theta - \Theta^{\text{II}} = \Theta - \ell^2/3D). \quad (17)$$

Итак, диффузионное время  $\xi$  представлено в виде  $\xi = t_1 + t_2 - t_3$  (рис. 12). Рассмотрим асимптотику  $t_2 - t_3$  с ростом  $g$ . Стационарные концентрации  $\bar{c}_{0,\ell}$  ( $\bar{c}_0 > \bar{c}_\ell$ ) удовлетворяют соотношениям

$$P - \bar{c}_0^2 b / g^2 = \bar{J}, \quad \bar{c}_\ell^2 b / g^2 = \bar{J} \Rightarrow$$

$$\bar{c}_0 / \bar{c}_\ell = \chi \equiv \sqrt{P\bar{J}^{-1} - 1} > 1, \quad \bar{J} < P/2.$$

В силу уравнения стационара  $\chi = z\bar{I} + 1$  формально при  $g \rightarrow +\infty$  ( $z = \ell\sqrt{b}/(gD) \rightarrow +0$ ) имеем  $\chi \rightarrow +1$ ,  $\bar{c}_0 - \bar{c}_\ell \rightarrow +0$ ,  $\bar{c}_{0,\ell}^2 b / g^2 \rightarrow P/2$ . Кон-

центрации  $\bar{c}_{0,\ell}$  растут согласованно с  $g$ . Далее большая входная концентрация на начальном этапе приводит к быстрому переносу к выходной стороне, но из-за большого  $g$  относительно малы  $q_\ell$  и соответствующий десорбционный отток. Наблюдается тенденция к выравниванию интегралов от  $c_{0,\ell}(t)$ , а не только предельных значений  $\bar{c}_{0,\ell}$ . Следовательно, разность  $t_2 - t_3 = \chi t_{c_0} - t_{1/2}$  убывает с ростом  $g$  (рис. 13), поскольку

$$I(t) = c_\ell(t)g^{-1}\sqrt{b}, \quad t_{1/2} = t_* - \bar{I}^{-1} \int_0^{t_*} I(\tau) d\tau = t_* - \bar{c}_\ell^{-1} \int_0^{t_*} c_\ell(\tau) d\tau \equiv t_{c_\ell}.$$

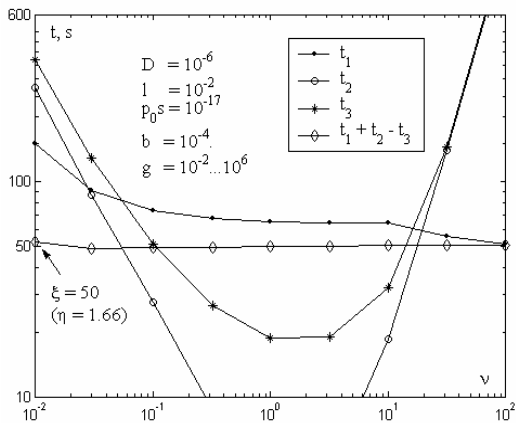


Рис. 12. Зависимость слагаемых в формуле (17) от  $\nu$

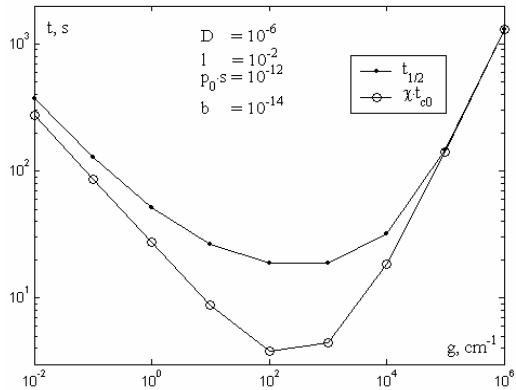


Рис. 13. Зависимость  $t_2$  и  $t_3$  от  $g$

Вместе с тем,  $\Theta$  быстро растет (в том числе из-за роста  $t_*$ ), так что при  $g \gg 1$  практически  $\ell^2/(2D) \approx [\chi - 1][\Theta - \ell^2/(3D)]$  (установлено численно). Это дает хорошее начальное приближение  $\Theta \approx \Theta^{(0)}$  в форме линейной функции от  $\xi$ .

Итак, при  $g \ll 1$   $\Theta^{(0)} \approx 0$ , а при больших  $g$  следует брать  $\Theta^{(0)}$  из  $\ell^2/2D \approx [\Theta - \ell^2/3D][\chi - 1]$ .

Идентификация модели III. Вырождение I  $\rightarrow$  III происходит с ростом  $g$  при  $\tilde{b} = b/g^2 = const$ . Уравнения вида (14), (16) для модели III получают формальным предельным переходом  $1/\sqrt{b} = 1/(g\tilde{b}^{1/2}) \rightarrow 0$ :

$$t_0 + \Theta = \frac{\ell^2}{2D} \cdot \frac{\chi + 1}{\chi - 1},$$

$$\frac{\ell^2}{6D}[\chi + 2] = [\chi - 1]t_0 + t_{1/2} - \chi t_{c_0}$$

( $z = \ell\tilde{b}^{1/2}D^{-1}$ ). Полагаем  $t_{c_0}^{(0)}$  из  $t_{1/2} - \chi t_{c_0} \approx 0$ , находим из второго уравнения приближение  $D^{(0)}$  и значение  $\tilde{b}^{(0)}$  из  $z$ . Решая краевую задачу численно, находим  $t_{c_0}^{(1)}$  и так до установления (несколько итераций). Если рассматриваем переход I  $\rightarrow$  III, то, совместив таким образом  $\bar{J}_I$  и  $\bar{J}_{III}$ , растворимость  $g$  рациональнее подбирать по монотонности (см. рис. 6, 11).

В общей модели I выбор начального приближения – проблема, которую будем решать аппроксимацией интеграла  $K \equiv \int_0^{t_*} c_0(t) dt$  в соотношениях (16), (17) ( $t_{c_0}^{(0)} \approx ?$ ).

Аппроксимация интеграла K. Когда входная поверхность насыщается очень быстро, можно считать

$$K \approx t_* \bar{c}_0 = t_* g \sqrt{b^{-1}(P - \bar{J})} = t_* \ell \sqrt{P - \bar{J}} / (zD).$$

Следующий шаг – учтем интегрально входной поток значением  $\bar{J}$ :

$$\dot{q}_0 = -bq_0^2 + P - \bar{J}, \quad q_0(0) = 0 \Rightarrow c_0(t) = gq_0(t) = \bar{c}_0 \tanh\{t\alpha/2\}, \quad \alpha \equiv 2\sqrt{b(P - \bar{J})}.$$

Такое приближение функции  $c_0(t)$  качественно отражает реальную картину: график является S-образной кривой насыщения с характерными показателем экспоненты  $-\alpha t$  и временем установления  $\tau_*$ . Поскольку  $F_0(t) \rightarrow \bar{J}$ , то стационарная концентрация не изменится ( $\tanh \rightarrow 1$ ). Вычисляем интеграл от  $c_0(t)$  ( $t_*: \exp\{-\alpha t_*\} \approx 0$ ):

$$K \approx \bar{c}_0 [t_* - [b(P - \bar{J})]^{-1/2} \ln 2] = \bar{c}_0 [t_* - g^{-1} [\tilde{b}(P - \bar{J})]^{-1/2} \ln 2]$$

Эта оценка неэффективна при I→III с ростом  $g$ , вырождаясь в  $K \approx \bar{c}_0 t_*$ ,  $t_{c_0} \approx 0$  (в то время как  $t_{c_0}$  растет, см. рис. 4, 5, 14).

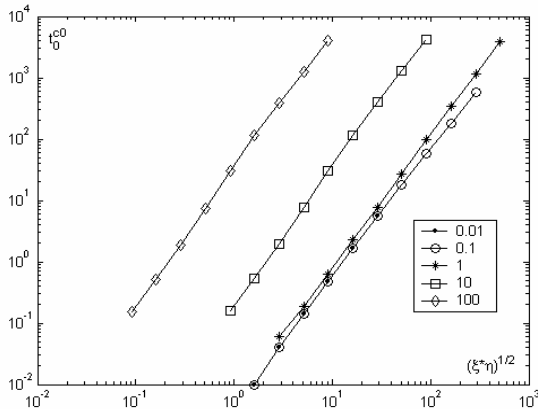


Рис. 14. Рост запаздывания  $t_{c_0}$  с увеличением  $\eta$  и  $\nu$

При относительно малых  $g$  полагаем в (14)  $\Theta \approx 0$  на фоне большого  $t_0$  и принимаем  $t_{c_0} = t_* - \bar{c}_0^{-1} K \approx \ln 2 / \sqrt{b(P - \bar{J})}$  в (16). Тогда получаем систему линейных уравнений для оценки параметров  $\xi, \eta$  (а значит и  $D, b$ ):

$$\xi \frac{\chi + 1}{\chi - 1} + \eta \frac{\sqrt{P}}{2\bar{I}} = t_0, \quad \xi \frac{\chi + 2}{3} + \eta \frac{\sqrt{P}}{2\bar{I}} (\chi + \ln 2 - 1) = (\chi - 1)t_0 + t_{1/2}.$$

Перейдем к поиску приближения  $K$  в более широком диапазоне возможных значений растворимости  $g$ . В уравнении насыщения входной поверхности представим один сомножитель  $q_0(t)$  полученной аппроксимацией

$$\tilde{q}_0(t) = g^{-1} \bar{c}_0 \tanh\{t\alpha/2\}; \quad q_0(0) = 0, \\ \dot{q}_0(t) = -q_0(t) \tanh\{t\alpha/2\} \alpha/2 + P - F_0(t). \quad (18)$$

По построению, если заменить входной поток  $F_0(t)$  на  $\bar{J}$ , то функция

$$\tilde{q}_0(t) = \sqrt{b^{-1}(P - \bar{J})} \tanh\{t\sqrt{b(P - \bar{J})}\}$$

удовлетворяет уравнению (18). Ищем такую аппроксимацию  $\tilde{F}_0(t) \rightarrow \bar{J}$ , которая бы привела к оценке  $K \approx \tilde{K}$ , пригодной и при больших  $g$ . В силу условия (2) ориентируемся на  $\tilde{F}_0 < P$ . Кроме того, требуем соблюдения материального баланса (14):

$$\int_0^{t_*} \tilde{F}_0(\tau) d\tau = \int_0^{t_*} F_0(\tau) d\tau \equiv \Theta = \xi \frac{\chi + 1}{\chi - 1} + \eta \frac{\sqrt{P}}{2\bar{I}}. \quad (19)$$

Из физических соображений примем  $\tilde{F}_0(t) = \bar{J}[1 + A \exp\{-\beta t\}]$ . При выборе показателя  $\beta$  ориентируемся на величину  $D(\pi/\ell)^2$ , характеризующую скорость убывания входного диффузионного потока в аппроксимирующей линейной краевой задаче II. Выше принята верхняя оценка показателя скорости насыщения поверхности  $\alpha = 2\sqrt{b(P - \bar{J})}$ . Значение  $\beta$  уточним позже. Предэкспонента  $A$  фиксируется в силу интегрального соотношения (19) (да и интересует нас именно интеграл  $K$ ):

$$\int_0^{t_*} \tilde{F}_0 d\tau = \bar{J}[t_* + A/\beta] = \int_0^{t_*} F_0 d\tau = \bar{J}[\Theta + t_*] \Rightarrow A/\beta = \Theta.$$

Уточнение показателя  $\beta$ . Интегрируя линейное уравнение

$$\dot{q}_0 = -q_0 \tanh\{t\alpha/2\} \alpha/2 + (P - \bar{J}) - \bar{J}A \exp\{-\beta t\}, \quad \text{получаем}$$

$$q_0(t) = \sqrt{b^{-1}(P - \bar{J})} \tanh\{t\alpha/2\} - \frac{\bar{J}A}{\exp\{t\alpha/2\} + \exp\{-t\alpha/2\}} \times \\ \times \left[ \frac{\exp\{(-\beta - \alpha/2)t\} - 1}{-\beta - \alpha/2} + \frac{\exp\{(-\beta + \alpha/2)t\} - 1}{-\beta + \alpha/2} \right],$$

$$K = \int_0^{t_*} c_0(t) dt \approx \bar{c}_0 \left[ t_* - \frac{\ln 2}{\sqrt{b(P - \bar{J})}} \right] + \quad (20)$$

$$+ 4gA\bar{J} \frac{\gamma \int_0^1 \frac{u^\gamma - 1}{u^\gamma + 1} du + \frac{\pi}{\gamma} - 1}{\beta^2 [\gamma - 2][\gamma + 2]}, \quad \gamma \equiv \frac{\alpha}{\beta}.$$

При интегрировании выбиралось  $u = \exp\{-\beta t\}$ ,  $\exp\{-\beta t_*\} \approx 0$ . Рассмотрим показатель  $\beta = D(\pi/\ell)^2$ , характерный для краевой задачи II (решение представимо рядом по  $\exp\{-D(\pi k/\ell)^2\}$ ). Тогда грубо

$$\sqrt{b(P - \bar{J})} \approx \sqrt{bP}, \quad \gamma = \alpha/\beta \approx \xi/\eta.$$

Число  $\gamma$  имеет важный физический смысл – оно характеризует соизмеримость диффузионного и поверхностного времен. Поскольку речь идет о приближении, то разумно остановиться на рациональных значениях (чтобы интеграл вычислялся в элементарных функциях), например,  $\gamma = 1/3, 1/2, 1, 2, 3$ .

Пусть  $\gamma = 1/2$  (поверхностные процессы медленнее, относительно низкие температуры). Тогда получаем оценку

$$K = \int_0^{t_*} c_0(t) dt \approx \bar{c}_0 \left[ t_* - \frac{\ln 2}{\sqrt{b(P-\bar{J})}} \right] -$$

$$- A \frac{g\bar{J}}{b(P-\bar{J})} \cdot \frac{8\pi + 4 \ln 2 - 7}{60},$$

$$\frac{A}{4\sqrt{b(P-\bar{J})}} = \Theta = \frac{\ell^2}{D} + \frac{g\ell + 1}{\bar{I}\sqrt{b}} - t_0,$$

$$t_{c_0} = \frac{\ln 2}{g\sqrt{\bar{b}(P-\bar{J})}} + \Theta \frac{\bar{J}}{P-\bar{J}} \cdot \frac{8\pi + 4 \ln 2 - 7}{60}.$$

Отсюда следует, что при малых  $g$  имеем прежнюю оценку  $t_{c_0}$  ( $\Theta \rightarrow 0$ ). С ростом  $g$  при вырождении I  $\rightarrow$  III первое слагаемое убывает и получаем быстрый рост  $t_{c_0} \sim \Theta$ . При  $\gamma = 1, 2$  изменится лишь константа в форме дроби:  $[2\pi - 2 \ln 2 - 1]/3$ ,  $[\pi - 3]/2$ . Правда, в случае  $\gamma = 2$  (поверхностные процессы быстрее, относительно высокие температуры) приходится раскрывать неопределенность дроби в (20). Это делается стандартно. Обозначим числитель через  $f(\gamma)$ . Тогда  $f(2) = 0$ ,

$$f'(2) = [\pi - 3]/2, f(\gamma) = f'(2)(\gamma - 2) + o(|\gamma - 2|).$$

Сокращаем на  $\gamma - 2$  и переходим к пределу  $\gamma \rightarrow 2$ . Не останавливаясь на арифметических преобразованиях, отметим лишь, что уточненное представление запаздывания  $t_{c_0}$  по-прежнему линейно по искомым переменным  $\xi, \eta$ .

Если нужно более точно учесть начальный быстрый рост входного потока от нуля, то полагаем

$$F_0(t) \approx \tilde{F}_0(t) = \tanh\{t\alpha/2\} \bar{J} [1 + A \exp\{-\beta t\}].$$

Первый множитель в масштабе времени насыщения поверхности растет от нуля до единицы (S-образно), появляется начальный всплеск. Величина  $A$  по-прежнему определяется материальным балансом:

$$\int_0^{t_*} F(t) dt = \int_0^{t_*} \tilde{F}(t) dt \Rightarrow \Theta = -\frac{2 \ln 2}{\alpha} + \frac{A\gamma}{\alpha} \int_0^1 \frac{1-u^\gamma}{1+u^\gamma} du \quad (\alpha \equiv 2\sqrt{b(P-\bar{J})} = \gamma\beta).$$

Вычисляя как и выше соответствующий интеграл  $K$ , получаем

$$t_{c_0} = \frac{P2 \ln 2 - \bar{J}\pi}{(P-\bar{J})\alpha} + \frac{2\bar{J}Ah(\gamma)}{(P-\bar{J})\alpha},$$

$$h(\gamma) \equiv \frac{\gamma^2}{[\gamma-2][\gamma+2]} \left[ \int_0^1 \frac{1-u^\gamma}{1+u^\gamma} du + \frac{\gamma}{2} - \frac{\pi}{2} \right].$$

Линейность запаздывания  $t_{c_0}$  по  $\eta, \Theta$  (а значит и по  $\eta, \xi$ ) сохраняется.

## Заключение

Параметры поверхностных и диффузионных процессов определяются в одном эксперименте. Это представляется более корректным, чем использование «табличных данных» по каждому коэффициенту из различных источников. К тому же свойства поверхности существенно зависят от условий производства материала. Информация на входе «черного ящика» (о концентрации или потоке при  $x = 0$ ) существенно улучшила бы обусловленность обратной задачи идентификации. Желательно, чтобы скорости диффузии и поверхностных процессов были соизмеримыми по порядкам ( $[\bar{b}^{1/2}\sqrt{P}] = [D/\ell] = cm/s$ ). Следовательно, речь идет о не слишком высоких температурах: химические процессы активируются с ростом  $T$  значительно быстрее диффузии, модель I вырождается в II. В прикладном плане модель I нацелена на исследование тонких пленок или стенок, когда концентрации малы и требуется оценить медленное (но на значительном интервале времени) накопление водорода или его изотопов с внешней стороны.

В алгоритме используются только интегральные операторы обработки информации  $J(t)$ , что нацелено на помехоустойчивость оценивания. Рассмотренный диапазон порядков величин очень широк. В конкретном случае следует переходить к безразмерным переменным  $x_i$ :  $D = \bar{D}x_1$ ,  $b = \bar{b}x_2$ ,  $s = \bar{s}x_3$ ,  $g = \bar{g}x_4$  (чертой фиксируются характерные порядки) с учетом общей априорной информации о материале (можно ли считать коэффициент растворимости малым/большим; достаточно ли велика/мала температура, чтобы считать поверхностные процессы сравнимыми с диффузией).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-01-00439).

## Литература

Водород в металлах / ред. Г. Алефельд, В. Фёлькль. М.: Мир, 1981. Т. 1. 506 с., Т. 2. 430 с.

*Габис И. Е., Комтаниец Т. Н., Курдюмов А. А.* Поверхностные процессы и проникновение водорода сквозь металлы // Взаимодействие водорода с металлами / ред. А. П. Захаров. М.: Наука, 1987. С. 177–206.

*Зельдович Я. Б., Мышкис А. Д.* Элементы математической физики. М.: Наука, 1973. 352 с.

*Кунин Л. Л., Головин А. И., Суровой Ю. И., Хохрин В. М.* Проблемы дегазации металлов. М.: Наука, 1972. 324 с.

*Марчук Г. И.* Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 336 с.

*Zaika Yu. V., Bormatova E. P.* Algorithms of parameters estimation of hydrogen permeability model // NATO Science for Peace and Security, Series C, Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems, Springer, 2008. P. 403–414.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

### **Заика Юрий Васильевич**

зав. лаб. моделирования природно-технических систем,  
д. ф.-м. н.

Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910

эл. почта: zaika@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 766312

### **Борматова Елена Павловна**

доцент, к. т. н.

ГОУ ВПО Петрозаводский государственный университет,  
кафедра математического моделирования систем  
управления

ул. Ленина, 33, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910

эл. почта: bormat@petsu.ru  
тел.: (8142) 719606

### **Zaika, Yury**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: zaika@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 766312

### **Bormatova, Elena**

Petrozavodsk State University

33 Lenin St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: bormat@petsu.ru  
tel.: (8142) 719606

УДК 519.6, : 539.2

## ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ДИФФУЗИИ И ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА В КРАЕВОЙ ЗАДАЧЕ ТДС-ДЕГАЗАЦИИ

Ю. В. Заика, Е. К. Костикова

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

Рассматривается дегазация пластины, предварительно насыщенной водородом. Эксперимент проводится методом термодесорбционной спектроскопии (ТДС). В соответствующей краевой задаче с нелинейными граничными условиями учтены основные физико-химические процессы: диффузия и десорбция. Предложена методика оценки параметров модели по результатам измерений.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** водородопроницаемость, нелинейные краевые задачи, параметрическая идентификация.

**Yu. V. Zaika, E. K. Kostikova. ESTIMATION OF HYDROGEN  
DIFFUSION AND DESORPTION PARAMETERS IN THE BOUNDARY-  
VALUE PROBLEM OF TDS-DEGASSING**

Degassing of a plate saturated with hydrogen is considered. The experiment is based on the thermal desorption spectrometry (TDS) method. The model is a boundary-value problem with nonlinear boundary conditions. The main physical and chemical processes, such as diffusion and desorption, are taken into account. The method of estimating model parameters by measurements is proposed. The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 09-01-00439).

**Key words:** hydrogen permeability, nonlinear boundary-value problems, parameters identification.

---

### Постановка задачи

Водород рассматривается как один из перспективных экологически чистых энергоносителей. Кроме того, безопасность систем транспортировки и переработки углеводородного сырья во многом определяется уровнем защиты конструкционных материалов от водородной коррозии. Экспериментальный метод термодесорбци-

онной спектроскопии (ТДС) является одним из основных при исследовании взаимодействия водорода с твердым телом [Кунин и др., 1972; Водород в металлах, 1981; Взаимодействие водорода..., 1987]. Пластина толщины  $\ell$  из металла или сплава, нагретая до температуры  $T = \bar{T}$ , находится в камере с газообразным водородом под давлением  $\bar{p}$ . После насыщения раствором

атомарным водородом образец быстро охлаждается (отключается ток нагрева), камера вакуумируется, и в условиях медленного нагрева с помощью масс-спектрометра определяется десорбционный поток. По этой экспериментальной информации судят о характеристиках взаимодействия водорода с исследуемым материалом.

Рассмотрим симметричную по постановке эксперимента нелинейную краевую задачу ТДС-дегазации:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(T) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad t \in (0, t_*), \quad x \in (0, \ell), \quad (1)$$

$$c(0, x) = \varphi(x) = \varphi(\ell - x), \quad x \in [0, \ell], \quad (2)$$

$$D(T)c_x(t, 0) = b(T)c_0^2(t),$$

$$D(T)c_x(t, \ell) = -b(T)c_\ell^2(t), \quad t \in [0, t_*]. \quad (3)$$

Здесь  $c(t, x)$  – концентрация атомарного водорода (H), растворенного в пластине,

$$c_0(t) \equiv c(t, 0), \quad c_\ell(t) \equiv c(t, \ell), \quad c_0(t) = c_\ell(t);$$

$t_*$  – время дегазации;  $D, b$  – коэффициенты диффузии и десорбции;  $J(t) = b(T)c_{0,\ell}^2(t)$  – плотность десорбционного потока (торцами пластины пренебрегаем). Параметры модели  $D$  и  $b$  зависят от температуры  $T$ . Как правило, в «рабочем диапазоне» достаточно точно выполняется закон Аррениуса:

$$D(T) = D_0 \exp\{-E_D/[RT]\},$$

$$b(T) = b_0 \exp\{-E_b/[RT]\},$$

$D_0, E_D, b_0, E_b, R = \text{const}$  ( $E_D, E_b$  – энергии активации). Нагрев обычно линейный:  $T(t) = T_0 + \nu t$ ,  $\nu > 0$ . Сокращенно будем обозначать  $D(t) \equiv D(T(t))$ ,  $b(t) \equiv b(T(t))$ .

Что касается начальных данных  $\varphi(x)$ , то в силу относительной скоротечности подготовительного этапа (охлаждение – вакуумирование – нагрев) можно считать начальное распределение практически равномерным:  $\varphi(x) = \bar{c} = \text{const}$ . Несогласованность граничных условий при этом не принципиальна, поскольку используем лишь интегральные соотношения (решение (1)–(3) понимается как обобщенное). Для тонких мембран следует учесть «начальный прогиб» концентрации по краям. В статье ограничимся вариантом

$$\varphi(x) = \bar{c} - A_0(x - \ell_0)^{2k}, \quad k = 1, \quad \ell_0 = \ell/2, \quad A_0 > 0.$$

Цель работы состоит в разработке вычислительного алгоритма для определения по плотности десорбции (потоку)  $J(t)$ ,  $t \in [0, t_*]$  ( $J(t) \approx 0$ ,

$t \geq t_*$ ), параметров  $D_0, E_D, b_0, E_b$ , характеризующих водородопроницаемость конструкционного материала.

Из-за большого разброса порядков величин при численном моделировании  $J(t)$  (в соответствии с краевой задачей (1)–(3) и теорией разностных схем [Самарский, Гулин, 1989]) проводилось масштабирование:

$$\begin{aligned} x &= \ell z, \quad z \in [0, 1], \quad u = c/\bar{c}, \quad u_t = Du_{zz}, \\ Du_z \Big|_{0,1} &= \pm bu_{0,1}^2 \equiv \pm J, \quad D = D/\ell^2, \quad b = b\bar{c}/\ell, \\ u(0, z) &= 1 - A(z - 0.5)^2, \quad A = A\ell^2/\bar{c}. \end{aligned}$$

### Параболическое приближение

Сходимость в нелинейных обратных задачах параметрической идентификации, как правило, локальная. «Куполообразный» характер распределения  $c(t, x)$  известен. В эксперименте  $\ell < \text{мм}$ . Поэтому целесообразно в качественном плане за первое приближение взять параболу

$$c(t, x) \approx \tilde{c}(t, x) = B(t) - A(t)(x - \ell_0)^2,$$

$$2\ell_0 = \ell, \quad A(0) = A_0, \quad B(0) = \bar{c}.$$

Считаем известной равновесную растворимость  $\bar{c} = \bar{c}(\bar{p}, \bar{T}) \sim \sqrt{\bar{p}}$ , она определяется давлением и температурой насыщения и пропорциональна корню из давления. Симметрия выполнена, функция  $B(t) > 0$  аппроксимирует  $c(t, \ell_0)$ ,  $A(t) > 0$ ,  $t > 0$ . Считая, что к моменту  $t_*$  произошла дегазация образца ( $c(t, x) \approx 0$ ,  $t \geq t_*$ ), определим константу  $A_0$ . В силу симметрии и материального баланса

$$\begin{aligned} S_* &\equiv \int_0^{t_*} J(\tau) d\tau = \int_0^{\ell_0} [\bar{c} - A_0(x - \ell_0)^2] dx = \\ &= \bar{c}\ell_0 - A_0\ell_0^3/3. \end{aligned} \quad (4)$$

Отсюда  $A_0 = 3(\bar{c}\ell_0 - S_*)/\ell_0^3$ . Кроме того, условия согласования начальных данных и граничных условий дает  $D_0/b_0 = f(E_b - E_D)$ :

$$D(0)A_0\ell = b(0)[\bar{c} - A_0\ell_0^2]^2 \Rightarrow \frac{D_0}{b_0}A_0\ell = \quad (5)$$

$$= \exp\{(E_D - E_b)/[RT_0]\}[\bar{c} - A_0\ell_0^2]^2.$$

Теперь воспользуемся квадратичной аппроксимацией. Из условия материального баланса выразим  $B(t) > 0$  и подставим в  $\tilde{c}(t, x)$ :

$$\int_0^{\ell_0} \varphi(x) dx - S(t) = \int_0^{\ell_0} \tilde{c}(t, x) dx,$$

$$S(t) \equiv \int_0^t J(\tau) d\tau \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}\bar{c}\ell_0 - A_0\ell_0^3/3 - S(t) &= B(t)\ell_0 - A(t)\ell_0^3/3, \\ B(t) &= A(t)\ell_0^2/3 + \bar{c} - A_0\ell_0^2/3 - S(t)/\ell_0, \\ \Rightarrow \tilde{c}(t, x) &= Q(t)/\ell - A(t)[x^2 - \ell x + \ell^2/6], \\ Q(t) &\equiv 2\int_t^{t_*} J(\tau) d\tau.\end{aligned}$$

Подставим теперь выражение для аппроксимации  $\tilde{c}(t, x)$  в граничное условие  $D(T)\tilde{c}_x(t, 0) = b(T)\tilde{c}_0^2(t)$ , выразим функцию  $A(t) > 0$  через параметры модели  $D$ ,  $b$  и известную по экспериментальным данным  $Q(t)$ . Оба корня квадратного уравнения относительно  $A(t)$  положительные, выбираем меньший из них (по физическому смыслу  $c_0(t) \geq 0$ ). Из условия  $\sqrt{J} = \tilde{c}_0\sqrt{b}$  получаем соотношение для оценки  $D_0, E_D, b_0, E_b$ :

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{J(t)}{b(T)}} &= \frac{3D(T)}{\ell b(T)} \left[ \sqrt{1 + Q(t) \frac{2b(T)}{3D(T)}} - 1 \right], \quad (6) \\ T &= T(t), \quad t \in [0, t_*].\end{aligned}$$

Поскольку  $J(t)$  соответствует исходной модели (1)–(3), а на предварительном этапе используется параболическое приближение концентрации  $N$  в объеме, то это равенство является приближенным.

График  $J(t)$  растет, потом убывает, причем на начальном и конечном этапах измерения менее точны. Поэтому нормируем уравнение на  $I_{\max} = \sqrt{J_{\max}}$  (по порядку) и выделим безразмерные переменные:

$$\begin{aligned}I(t)I_{\max}^{-1} &= \left( \sqrt{1 + 2Q(t)t_*^{-1}J_{\max}^{-1}X} - 1 \right) Y, \\ I(t) \equiv \sqrt{J(t)}, \quad X &\equiv \frac{t_*J_{\max}b(T)}{3D(T)}, \quad Y \equiv \frac{3D(T)}{I_{\max}\ell\sqrt{b(T)}},\end{aligned}$$

$t \in [t_1, t_2] \subset (0, t_*)$ . Формально допуская  $E < 0$ , удобно считать новые переменные  $X(t) \equiv X(T(t))$ ,  $Y(t) \equiv Y(T(t))$  «аррениусовскими»:

$$X_0 \equiv \frac{t_*J_{\max}b_0}{3D_0}, \quad Y_0 \equiv \frac{3D_0}{I_{\max}\ell\sqrt{b_0}},$$

$$E_X = E_b - E_D, \quad E_Y = E_D - E_b/2.$$

Тогда

$$\begin{aligned}f(t; X_0, E_X, Y_0, E_Y) &\equiv I(t)I_{\max}^{-1} - \\ - \left( \sqrt{1 + q(t)X} - 1 \right) Y &= 0, \quad q \equiv 2Qt_*^{-1}J_{\max}^{-1}.\end{aligned} \quad (7)$$

Заметим, что параметры начального распределения  $A_0, \bar{c}$  входят в соотношение лишь неявно посредством  $J(t)$ .

Преобразуем теперь  $Y$  с учетом связи  $D_0/b_0 = f(E_X)$  (см. (5)):

$$\begin{aligned}Y &= Y_0 \exp\{-E_Y/[RT(t)]\} = \\ &= Z_0 \exp\{-E_X/[RT_0]\} \exp\{-E_Y/[RT(t)]\},\end{aligned}$$

$$Z_0 \equiv \frac{3A_0\bar{c}^2\ell_0^2\sqrt{b_0}}{4I_{\max}}, \quad Z_0 = Z_0(b_0) \leftrightarrow b_0.$$

Разумеется,  $I_{\max}$  зависит от всех входных данных  $\{\varphi, D, b\}$ . Запись  $Z_0 = Z_0(b_0)$  означает, что значения  $\bar{c}, A_0$  уже найдены, а  $J(t)$  при решении обратной задачи воспринимается как заданная фиксированная функция времени. Аналогично представим  $X$ :

$$\begin{aligned}X &= X_0 \exp\{-E_X/[RT(t)]\} = \\ &= \frac{t_*J_{\max}A_0\ell}{[\bar{c} - A_0\ell_0^2]^2} \exp\{E_X/[RT_0]\} \exp\{-E_X/[RT(t)]\}.\end{aligned}$$

Подставляя в уравнение (7), получаем зависимость  $f = f(t; Z_0, E_X, E_Y)$ . Далее с учетом зашумленности реальных измерений  $J(t)$  и погрешности параболической аппроксимации целесообразно следовать методу наименьших квадратов (МНК):

$$F(Z_0, E_X, E_Y) = \int_{t_1}^{t_2} f^2(\tau) d\tau \rightarrow \min, \quad [t_1, t_2] \subset (0, t_*).$$

Производные функции  $F$  по указанным аргументам можно выписать явно (подсчет интеграла по квадратурной формуле считаем элементарной операцией). Задача оптимизации решается стандартными средствами (авторы использовали пакет Scilab) в физически оправданном диапазоне параметров (в пределах одного-двух порядков). Укажем принятые в данной работе опорные значения:

$$\bar{c} = 10^{18} \text{ 1/см}^3; \quad T_0 = 300 \text{ К}; \quad \ell = 10^{-2} \text{ см};$$

$$b_0 = 10^{-3} \text{ см}^4/\text{с}; \quad E_b = 90 \text{ кДж/моль};$$

$$D_0 = 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}; \quad E_D = 40 \text{ кДж/моль}.$$

Результаты вычислительных экспериментов показали, что без учета погрешностей измерений и модели (т. е.  $J(t)$  определялся решением прямой задачи (1)–(3)) погрешность оценивания параметров находится в пределах 20%. Начальные приближения энергий активации  $E_D, E_b$  в диапазоне нескольких десятков кДж/моль можно



указать для конкретного материала из физико-химических соображений. Приближение  $b_0$  ( $Z_0$ ) берем в силу

$$J(0) = b(T_0)c_{0,\ell}^2(0) = b_0 \exp\{-E_b / RT_0\} [\bar{c} - A_0 \ell_0^2]^2.$$

Именно как начальное приближение в реальном ТДС-эксперименте значение  $J(0)$  известно с большой погрешностью.

*Замечание.* Задача несколько усложняется, когда равновесную концентрацию  $\bar{c}$  также приходится считать неизвестной. Тогда задача четырехмерная в соответствии с (7). По оценкам  $X_0, E_X, Y_0, E_Y$  значения  $\bar{c}, A_0$  находятся из уравнений (4), (5).

Далее переходим к локальному уточнению оценок  $D_0, E_D, b_0, E_b$  в соответствии с исходной моделью (1)–(3). При этом учитываем, что искомым независимых переменных 3 в силу  $D_0 / b_0 = f(E_b - E_D)$ .

### Функция Грина

Поскольку зависимость от времени  $J(t)$  известна по результатам ТДС-эксперимента, решение краевой задачи удобно представить с помощью функции Грина [Мартинсон, Малов, 2002, гл. 2]. Для  $\varphi(x) = \bar{c}$  имеем

$$c(t, x) = \bar{c} - \int_0^t D^{-1}(\tau) J(\tau) \times \\ \times \{G(x, t, 0, \tau) + G(x, t, \ell, \tau)\} d\tau,$$

$$G(x, t, y, \tau) = \\ = \frac{1}{\ell} + \frac{2}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2 \pi^2}{\ell^2} (\tau - t)\right\} \cos \frac{n\pi x}{\ell} \cos \frac{n\pi y}{\ell}.$$

Для уточнения оценок параметров модели используем соотношение  $J = bc_{0,\ell}^2$ , поэтому далее нас интересует представление граничной концентрации  $c_0(t)$ . Для варианта  $\varphi(x) = \bar{c} - A(x - \ell_0)$  получаем:

$$c_0(t) = \bar{c} - \frac{2}{\ell} \int_0^t J(\tau) d\tau - \\ - A_0 \ell \left[ \frac{\ell}{12} + \frac{4}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n} \exp\{-\mu_n \gamma(t, 0)\} \right] - \\ - \frac{4}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t \exp\{-\mu_n \gamma(t, \tau)\} J(\tau) d\tau,$$

$$\gamma(t, \tau) \equiv \int_{\tau}^t D(s) ds, \quad \mu_n \equiv (n\pi/\ell_0)^2.$$

Заменим в скобке [...] экспоненту на  $[\exp\{-\mu_n \gamma(t, 0)\} - 1] + 1$ :

$$c_0(t) = \bar{c} - \frac{2}{\ell} \int_0^t J(\tau) d\tau + 4A_0 \sum_{n=1}^{\infty} v_n(t) - \frac{4}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} J_n(t),$$

$$v_n(t) \equiv \frac{1 - \exp\{-\mu_n \gamma(t, 0)\}}{\mu_n},$$

$$J_n(t) \equiv \int_0^t \exp\{-\mu_n \gamma(t, \tau)\} J(\tau) d\tau.$$

Соотношение  $\sqrt{J} = \sqrt{bc_0(t)}$  имеет форму семейства уравнений для оценки параметров:

$$\Phi = \Phi(t; D_0, E_D, b_0, E_b) = 0,$$

$t \in [t_1, t_2] \subset (0, t_*)$ . При численной реализации ряды заменялись частичными суммами:

$$\Phi = \sqrt{J(t)} - \sqrt{b} \times \quad (8)$$

$$\left[ \varphi(0) - \frac{2}{\ell} \int_0^t J d\tau + 4A_0 \sum_{n=1}^{N_1} v_n(t) - \frac{4}{\ell} \sum_{n=1}^{N_2} J_n(t) \right] = 0.$$

Используя пакет Scilab, численно решалась задача  $\int_{t_1}^{t_2} \Phi^2 d\tau \rightarrow \min$  при  $N_1 = N_2 = 5$ .

За начальное приближение принимались значения, полученные в предыдущем пункте. Уровень ошибок оценивания в среднем понизился до нескольких процентов (на «идеальном» сигнале  $J(t)$  из (1)–(3)). Численные эксперименты показали, что при  $N_i \geq 10$  невязка резко возрастает, возможно, из-за накопления вычислительных погрешностей.

### Сопряженные уравнения

Если неопределенность значений  $D, b$  очень велика (например, 3–5 порядков), то нелишне иметь в распоряжении дополнительное семейство уравнений, поскольку на универсальный алгоритм параметрической идентификации нелинейной распределенной модели рассчитывать не приходится. Укажем один из возможных подходов, основанный на общей идее использования сопряженных уравнений [Марчук, 1992].

Используя интегрирование по частям, для произвольной достаточно гладкой функции  $\psi(t, x)$  получим:

$$0 = \int_0^{t_*} \int_0^{\ell} \psi(t, x) [c_t - Dc_{xx}] dx dt = \\ = \int_0^{t_*} J(t) \psi(t, 0) dt + \int_0^{t_*} J(t) \psi(t, \ell) dt +$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^{t_*} D(t) \sqrt{J(t)b^{-1}(t)} \psi_x(t, \ell) dt - \\
& - \int_0^{t_*} D(t) \sqrt{J(t)b^{-1}(t)} \psi_x(t, 0) dt - \\
& - \bar{c} \int_0^{\ell} \psi(0, x) dx + A \int_0^{\ell} (x - \ell_0)^2 \psi(0, x) dx. \quad (9)
\end{aligned}$$

Здесь опущен двойной интеграл, поскольку в дальнейшем изложении считаем функцию  $\psi(t, x)$  подчиненной сопряженному уравнению  $\partial \psi / \partial t = -D \partial^2 \psi / \partial x^2$ . Подчеркнем, что краевые условия не ставятся, «пробных» функций  $\psi$  бесконечно много. Выберем, например,  $\psi(t, x) = \beta(t) \exp \alpha x$ . При нормировке  $\beta(t_*) = 1$  получаем

$$\begin{aligned}
\psi(t, x) &= \exp\{\sigma^2 \gamma(t_*, t)\} \exp \alpha x, \\
\gamma(t, \tau) &\equiv \int_0^t D(s) ds.
\end{aligned}$$

Перепишем (9) в обозначениях

$$X \equiv \int_0^{t_*} J \beta dt, \quad Y \equiv \int_0^{t_*} D \sqrt{J b^{-1}} \beta dt :$$

$$\kappa \equiv \frac{\exp \sigma \ell + 1}{\exp \sigma \ell - 1}, \quad \kappa \alpha X + \sigma^2 Y + \frac{\beta(0)}{\sigma^2} \times$$

$$\times \{2 A_0 - \sigma^2 (\bar{c} - A_0 [\ell_0^2 - \ell \kappa / \sigma])\} = 0.$$

Аналогично рассматривается вариант  $\psi(t, x) = \beta(t) \sin \alpha x$  ( $\beta(t) \cos \alpha x$ ):  $\psi(t, x) = \exp\{-\sigma^2 \gamma(t_*, t)\} \sin \alpha x$  ( $\psi(t, x) = \exp\{-\sigma^2 \gamma(t_*, t)\} \cos \alpha x$ ),

$$\kappa \alpha X + \sigma^2 Y + \frac{\beta(0)}{\sigma^2} \times$$

$$\times \{2 A_0 + \sigma^2 (\bar{c} - A_0 [\ell_0^2 - \ell \kappa / \sigma])\} = 0,$$

$$\kappa \equiv \frac{\sin \sigma \ell}{\cos \sigma \ell - 1} \left( \kappa \equiv \frac{\cos \sigma \ell + 1}{-\sin \sigma \ell} \right).$$

Получаем дополнительное семейство уравнений. Параметр  $\sigma$  целесообразно варьировать в пределах  $\sigma \ell \sim 1$ .

### Заключительные замечания

В предлагаемой итерационной процедуре оценивания используется подсчет интегралов по

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

#### Заика Юрий Васильевич

зав. лаб. моделирования природно-технических систем, д. ф.-м. н. Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910  
эл. почта: zaika@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 766312

времени, а не численное решение краевой задачи при текущих приближениях параметров (как того требует, например, «стандартный» градиентный метод минимизации невязки). Если мембрана не очень тонкая, следует использовать вариант

$$\varphi(x) = \bar{c} - A_0 (x - \ell_0)^{2k}, \quad k > 1$$

(в середине пластины равновесная концентрация и только у самого края концентрация не много меньше).

При обработке зашумленных экспериментальных кривых следует, по-видимому, отказаться от использования условия согласования краевых условий (5). В интегральном смысле (рассматриваем решение краевой задачи (1)–(3) как обобщенное) считаем  $\varphi(x) = \bar{c}$  ( $A_0 = 0$ ). В силу (4) имеем оценку равновесной концентрации  $\bar{c}$ . Далее считаем параметры  $X_0, E_X, Y_0, E_Y$  (однозначно определяющие  $D_0, E_D, b_0, E_b$ ) независимыми в соотношении (7). Последующие преобразования  $X, Y$  не проводим, уравнение (5) и соответствующее соотношение  $D_0 / b_0 = f(E_b - E_D)$  исключаем из модели. Задача оптимизации становится четырехмерной.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-01-00439).

### Литература

- Взаимодействие водорода с металлами / ред. А. П. Захаров. М.: Наука, 1987. С. 177–206.  
Водород в металлах / ред. Г. Алефельд, В. Фёлькль. М.: Мир, 1981. Т. 1. 506 с. Т. 2. 430 с.  
Кунин Л. Л., Головин А. И., Суровой Ю. И., Хохрин В. М. Проблемы дегазации металлов. М.: Наука, 1972. 324 с.  
Мартинсон Л. К., Малов Ю. И. Дифференциальные уравнения математической физики. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2002. 368 с.  
Марчук Г. И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 336 с.  
Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.

#### Zaika, Yuriy

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: zaika@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 766312

**Костикова Екатерина Константиновна**

стажер-исследователь

Институт прикладных математических исследований

КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,

Россия, 185910

эл. почта: [fedorova@krc.karelia.ru](mailto:fedorova@krc.karelia.ru)

тел.: (8142) 766312

**Kostikova, Ekaterina**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: [fedorova@krc.karelia.ru](mailto:fedorova@krc.karelia.ru)

tel.: (8142) 766312

УДК 519.872.6

## ПРИМЕНЕНИЕ ГАУССОВСКИХ ПРОЦЕССОВ В МОДЕЛИРОВАНИИ СЕТЕВОГО ТРАФИКА

О. В. Лукашенко<sup>1</sup>, Е. В. Морозов<sup>1</sup>, М. Пагано<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН

<sup>2</sup>Факультет информационного инжиниринга, Университет Пизы, Италия

Эта обзорная статья посвящена моделированию сетевого трафика с помощью гауссовских процессов. Основное внимание уделено аналитическим свойствам моделей, и, кроме того, обсуждаются методы имитационного моделирования, а также проверка нормальности сетевого трафика на основе статистических данных. Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 10-07-00017.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** коммуникационная сеть, гауссовские процессы, самоподобие, долговременная зависимость.

### O. V. Lukashenko, E. V. Morozov, M. Pagano. APPLICATIONS OF GAUSSIAN PROCESSES IN NETWORK TRAFFIC MODELING

This review article is devoted to network traffic modeling based on Gaussian processes. We concentrate on the analytical properties of such models. Moreover, the simulation methods of Gaussian processes and methods to detect normality of the network traffic are also discussed. The paper is supported by RFBR, project 10-07-00017.

**К e y w o r d s :** communication network, Gaussian processes, self-similarity, long-range dependence.

---

#### Введение

В последнее время широкое распространение получили различные сетевые приложения, что естественным образом вызвало увеличение информации, передаваемой по компьютерным сетям. Передача информации по сетям предъявляет к сетевой инфраструктуре достаточно жесткие требования. Поэтому возникает необходимость анализа загрузки компьютерных сетей, расчета их характеристик, таких, например, как емкости буферов, пропускная способность и т. д. Последние два десятилетия ознаменовались существенными достижениями в исследовании сетевого трафика. Было, в частности, установлено, что процессы, протекающие в сетях

передачи данных, обладают фрактальными свойствами (эффект *самоподобия*) и *долговременной зависимостью* (долгой памятью) [Leland et al., 1994; Willinger et al., 1995; Crovella, Bestavros, 1997]. Такие свойства радикально отличают современные модели от пуассоновских моделей, которые адекватно описывали процессы обслуживания и, в частности, сетевые процессы на протяжении долгого времени. Например, пуассоновские модели опираются на экспоненциальные распределения интервалов входного потока и времени обслуживания заявок (пакетов) и обладают *короткой памятью* и, с другой стороны, не обладают свойством самоподобия (фрактальности).

Разумеется, столь радикальное отличие новых моделей привлекло значительное внимание к анализу их свойств. В частности, наличие долговременной зависимости между данными сетевого трафика сделало весьма популярными модели, основанные на *гауссовских процессах*. Самым известным и изученным самоподобным гауссовским процессом с долговременной зависимостью является *фрактальное броуновское движение* (ФБД). Так, например, данный процесс, названный фрактальным трафиком, был использован в качестве модели, адекватно описывающей входной поток широкого класса сетевых узлов [Nottos, 1994].

В данной статье приведены основные свойства ФБД, а также обсуждаются некоторые методы имитационного моделирования такого процесса в системах обслуживания.

### Верификация гауссовских моделей

Во многих случаях сетевой трафик возникает как объединение значительного числа потоков от отдельных узлов сети (отдельных пользователей). Можно ожидать, что соответствующим образом нормированный и центрированный суммарный трафик будет сближаться с ФБД с ростом числа агрегированных узлов. Действительно, это подтверждается рядом функциональных центральных предельных теорем, утверждающих, что суперпозиция входных потоков от растущего числа независимых on/off-источников сходится к некоторому гауссовскому процессу с соответствующей корреляционной структурой [Taqqi et al., 1997]. Заметим, что on/off-модель описывает поведение отдельного пользователя, который чередует периоды активной работы в сети (on-период) с периодами молчания (off-период).

Пусть каждый источник описывается следующим процессом  $\{W(t), t \geq 0\}$ , где

$$W(t) = \begin{cases} 1, & t \in \text{On-период} \\ 0, & t \in \text{Off-период.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Отметим, что хвост функции распределения  $\bar{F}$  связан с функцией распределения  $F$  как  $\bar{F} = I - F$ . Предположим, что хвосты функции распределения on/off-периодов подчинены следующим законам (имеют тяжелые хвосты)

$$\begin{aligned} \bar{F}_{on} &\sim l_{on} \cdot x^{-\alpha_{on}} \cdot L_{on}(x), & 1 < \alpha_{on} < 2 \text{ или } \sigma_{on}^2 < \infty \\ \bar{F}_{off} &\sim l_{off} \cdot x^{-\alpha_{off}} \cdot L_{off}(x), & 1 < \alpha_{off} < 2 \text{ или } \sigma_{off}^2 < \infty, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где  $l_{on}$ ,  $l_{off}$  – константы;  $\sigma_{on}^2$ ,  $\sigma_{off}^2$  – дисперсии on/off-периодов;  $L_{on}(x)$ ,  $L_{off}(x)$  – медленно меняющиеся на бесконечности функции, т. е. удовлетворяющие условию

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{L(tx)}{L(x)} = 1, \text{ для любого } t > 0.$$

Обозначим через  $\mu_{on}$  и  $\mu_{off}$  математические ожидания on/off-периодов.

Предположим, что имеется  $M$  независимых одинаково распределенных источников. Источник  $m$  характеризуется процессом  $\{W^{(m)}(t), t \geq 0\}$  вида (2.1),  $m = 1, \dots, M$ . Совокупный агрегированный трафик на интервале  $[0, tT]$ , порожденный этими источниками, имеет следующий вид:

$$W_M^*(tT) = \int_0^{tT} \left( \sum_{m=1}^M W^{(m)}(u) \right) du,$$

т. е. это суммарное время активности всех  $M$  источников на интервале  $[0, tT]$ , где  $T > 0$  – параметр шкалы времени.

Интерес представляет поведение процесса  $\{W_M^*(tT), t \geq 0\}$  при больших значениях  $M$  и  $T$ . В [Taqqi et al., 1997] показано, что для больших  $M$  и  $T$  распределение этого процесса сближается с распределением процесса

$$\left\{ TM \frac{\mu_{on}}{\mu_{on} + \mu_{off}} t + T^H \sqrt{L(T)Mc} B_H(t), t \geq 0 \right\}, \quad (2.3)$$

где  $c$  – положительная константа, зависящая от исходных параметров;  $L$  – медленно меняющаяся на бесконечности функция, также выраженная через исходные параметры, а  $B_H(t)$  – ФБД, у которого параметр Херста  $H$  определяется как

$$H = \frac{3 - \min(\alpha_{on}, \alpha_{off})}{2}.$$

Более точно (2.3) означает, что имеет место следующая функциональная центральная предельная теорема

$$\limlim_{T \rightarrow \infty, M \rightarrow \infty} \left\{ \frac{W_M^*(tT) - TM \frac{\mu_{on}}{\mu_{on} + \mu_{off}} t}{T^H L^{1/2}(T) M^{1/2}}, t \geq 0 \right\} =_d \{c B_H(t), t \geq 0\}, \quad (2.4)$$

где  $=_d$  означает равенство по распределению.

Этот результат говорит о том, что ФБД можно рассматривать как формальную модель сетевого трафика, где on/off-периоды имеют тяжелые хвосты вида (2.2). Тем не менее, нельзя априори предполагать асимптотическую нормальность сетевого трафика и его фрактальность, поскольку распределения on- и off-периодов должны, вообще говоря, удовлетворять некоторым моментным свойствам (иметь тяже-

лые хвосты). Кроме того, даже при наличии указанной асимптотики (2.4) соответствующая скорость сходимости может быть крайне медленной. Поэтому гауссовские модели, применяемые для описания асимптотического поведения трафика или величины загрузки коммуникационной сети, нуждаются в статистическом обосновании. Этот вопрос, а также методы имитационного моделирования гауссовских процессов рассматриваются ниже.

Пусть  $\{A(t), t \geq 0\}$  – процесс со стационарными приращениями, где  $A(t)$  есть объем информации, поступающей в интервале  $[0, t]$ ,  $t \geq 0$ . Таким образом, приращения  $\{A(i+1) - A(i) = \Delta A_i, i=1,2,\dots\}$  образуют стационарную последовательность одинаково распределенных случайных величин (с.в.) с неизвестной функцией распределения  $F$ . Сформулируем основную гипотезу:

$$H_0: F = \Phi_{\mu, \sigma},$$

где  $\Phi_{\mu, \sigma}$  – функция распределения нормальной с.в.  $N(\mu, \sigma)$  с неизвестными параметрами  $\mu$  и  $\sigma$ . Основная сложность в проверке данной гипотезы заключается в том, что элементы временного ряда в типичных ситуациях являются зависимыми. Для проверки гипотезы будем использовать N-Q график (normal quantile plot). Он представляет собой множество пар

$$\{a_i, x_{(i)}\}, i=1, \dots, n, \quad (2.5)$$

где  $n$  – количество наблюдений,  $x_{(1)} < \dots < x_{(n)}$  – порядковые статистики, полученные по входным данным,  $\Delta A_i = x_i$ , а значения  $a_i$  выбираются таким образом, что  $a_1 < \dots < a_n$  и, кроме того,

$\sum_{i=1}^n a_i = 0$ . Заметим, что для всех  $1 \leq i \leq n$  имеем  $\frac{i-1}{n} < \frac{i}{n+1} < \frac{i}{n}$ . Тогда значения  $a_i$  можно определить как

$$a_i = \Phi^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right), i=1, \dots, n,$$

где  $\Phi = \Phi_{0,1}$ .

Другой подход к выбору значений  $a_i$  предложен в [Brown, Hettmannsperger, 1996] и заключается в использовании так называемой метрики Вассерштейна

$$\int_0^1 \left(F_n^{-1}(t) - \mu - \sigma \cdot \Phi^{-1}(t)\right)^2 dt, \quad (2.6)$$

где  $F_n^{-1}(t)$  – обратная эмпирическая функция распределения. Смысл этой метрики состоит в том, что она оценивает расстояние между обратной эмпирической функцией и обратной функцией распределения  $N(\mu, \sigma)$ . Далее необходимо найти значения параметров  $\mu$  и  $\sigma$ , которые минимизируют выражение (2.6). Используя свойства эмпирической функции распределения и стандартной нормальной с. в., можно получить значения оценок параметров  $\hat{\mu} = \bar{x}$  и  $\hat{\sigma} = \sum_{i=1}^n b_i x_i$ , минимизирующих (2.6). Коэффициенты  $b_i$  определяются следующим образом:

$$b_i = \phi\left(\Phi^{-1}\left(\frac{i-1}{n}\right)\right) - \phi\left(\Phi^{-1}\left(\frac{i}{n}\right)\right),$$

где  $\phi$  – плотность  $N(0,1)$ . Обозначим

$$\phi_i = \phi\left(\Phi^{-1}\left(\frac{i}{n}\right)\right) \text{ и определим } a_i \text{ как}$$

$$a_i = \frac{\phi_{i-1} - \phi_i}{\sum_{i=1}^n (\phi_{i-1} - \phi_i)^2}, i=1, \dots, n.$$

Далее по полученным данным строится N-Q график (2.5). При справедливости нулевой гипотезы  $H_0$  данный график должен быть близок к прямой линии. Чтобы качественно проверить это утверждение, можно использовать оценку коэффициента корреляции

$$r = r(x, a) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{(i)} - \bar{x})(a_i - \bar{a})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{(i)} - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (a_i - \bar{a})^2}}.$$

В случае справедливости нулевой гипотезы следует ожидать, что  $r \approx 1$ . Отметим, что подробный анализ нормальности агрегированного трафика рассматривается в [Kilpi, Norros, 2002].

## Гауссовские модели

Часто удобно рассматривать сетевой трафик на произвольном интервале  $[0, t]$ . Пусть  $(A(t), t \in R)$  – объем информации, поступившей на интервале  $[0, t]$ ,  $t \geq 0$ . Тогда при  $s < t$ , нагрузка, поступившая на интервале  $[s, t]$ , равна  $A(s, t) = A(t) - A(s)$ .

Перечислим некоторые свойства, которыми, как правило, обладает входной трафик.

1. *Стационарность.* При достаточно общих условиях, можно считать, как отмечалось выше, что входной трафик образует процесс со стационарными приращениями.

(Однако, данное свойство, вообще говоря, не выполняется для больших промежутков времени, охватывающих различные периоды сетевой активности). Более точно процесс  $(A(t), t \in R)$  имеет стационарные приращения, если выполнено

$$A(s, t) =_d A(0, t-s), \text{ для любых } s < t.$$

2. *Высокий уровень агрегирования.* Для большинства современных коммуникационных систем характерно то, что входной поток представляет собой суперпозицию большого числа потоков от отдельных пользователей. Из стационарности приращений следует, что  $\mathbf{E}A(s, t) = m \cdot (t-s)$ , т. е. средний объем поступающего в любом интервале трафика пропорционален длине интервала. Заметим, что  $m = \mathbf{E}A(1)$ . Также ввиду стационарности, дисперсия поступающего объема трафика зависит только от длины интервала, т. е.  $\text{Var}(A(s, t)) = v(t-s)$ .

Гауссовским источником  $A(\cdot)$  будем называть гауссовский процесс со стационарными приращениями, если для любых  $s < t$

$$A(s, t) =_d N(m \cdot (t-s), v(t-s)). \quad (3.1)$$

Рассмотрим ковариацию входного трафика на интервале длины  $\varepsilon$

$$C(t, \varepsilon) = \text{Cov}(A(0, \varepsilon), A(t, t+\varepsilon)) = \frac{1}{2}(v(t+\varepsilon) - 2v(t) + v(t-\varepsilon)) \quad (3.2)$$

где  $\varepsilon > 0$  – любое фиксированное число.

Гауссовский источник обладает свойством *долговременной зависимости (долгой памяти)* в том и только том случае, если

$$\sum_{k=1}^{\infty} C(k, 1) = \infty,$$

т. е. если ряд из коэффициентов автокорреляции расходится [Mandjes, 2007]. Иначе источник обладает кратковременной зависимостью (короткой памятью).

Приведем два важных примера гауссовских источников:

1. *Фрактальный броуновский источник:* это гауссовский источник  $\{A(t), t \geq 0\}$  вида (3.1), для которого математическое ожидание  $\mathbf{E}A(t) = mt$ , а дисперсия  $v(t) = t^{2H}$ , где  $H \in (0, 1)$  – параметр Херста. Можно показать,

что фрактальный гауссовский источник обладает свойством долговременной зависимости при  $H > 1/2$ . Действительно из (3.2) имеем  $C(k, 1) = ((t+1)^{2H} - 2t^{2H} + (t-1)^{2H})/2$ , тогда

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{C(k, 1)}{k^{2H-2}} &= \frac{1}{2} \cdot \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{(1+1/k)^{2H} - 2 + (1-1/k)^{2H}}{1/k^2} \\ &= \frac{1}{2} \cdot v''(1) = \text{const} \neq 0. \end{aligned}$$

Поэтому ряды с общими членами  $C(k, 1)$  и  $k^{2H-2}$  сходятся или расходятся одновременно, в то время как функция  $k^{2H-2}$  несуммируема при  $H > 1/2$ .

2. *Интегральный процесс Орнштейна-Уленбека,* для которого  $v(t) = t - 1 + e^{-t}$ . Данный процесс обладает свойством коротковременной зависимости, поскольку ковариация в этом случае равна

$$C(k, 1) = \frac{1}{2}(e^{-k-1} - 2e^{-k} + e^{-k+1}), \text{ и, очевидно,}$$

является суммируемой. Несмотря на короткую память, данный процесс также рассматривается как модель сетевого источника [Mandjes, 2007].

Напомним, что входной процесс  $(A(t), t \in R)$  представляет собой суперпозицию большого числа  $n$  независимых одинаково распределенных входных потоков  $(A_i(t), t \in R)$  со стационарными приращениями, т. е.  $A(t) = \sum_{i=1}^n A_i(t)$ .

Тогда в силу центральной предельной теоремы можно ожидать, что для каждого  $t \in R$ , значение  $A(t)$  распределено приблизительно как

$$n \cdot \mathbf{E}A_1(1)t + \sqrt{n \text{Var}(A_1(t))} N(0, 1).$$

Обозначим  $\mathbf{E}A_1(1) = m$ ,  $\text{Var}(A_1(t)) = v(t)$ . Тогда значение  $A(t)$  близко к значению гауссовского процесса со средним  $nm$  и дисперсией  $nv(t)$ .

Отметим, что к настоящему времени применимость гауссовских моделей для описания трафиков при высоком уровне агрегирования и наличии тяжелых хвостов является широко признанной.

Следует отметить, что гауссовский процесс допускает отрицательные значения, что противоречит физическому смыслу сетевого трафика. Например, вероятность отрицательного трафика на интервале  $[0, t]$  равна

$$P(A(t) < 0) = P\left(N(0,1) < -\frac{m \cdot t \sqrt{n}}{\sqrt{v(t)}}\right).$$

Для преодоления этого недостатка модели такая возможность игнорируется, что допустимо, если вероятность отрицательного трафика мала, т. е., если величина  $m \cdot t \sqrt{n} / \sqrt{v(t)}$  принимает большие значения. Это действительно так при больших значениях  $n$ , а также в случае ФБД, у которого величина  $m \cdot t \sqrt{n} / \sqrt{v(t)}$  имеет вид  $\sqrt{nm}t^{1-H}$ .

Из предшествующего анализа следует, что во многих случаях модель сетевого трафика может быть представлена в следующем виде:

$$A(t) = mt + X(t), \quad (3.3)$$

где  $m$  – средняя интенсивность входящего трафика, а  $X(t)$  – некоторый центрированный гауссовский процесс, описывающий флуктуации трафика вокруг среднего. Впервые данная модель предложена в [Norros, 1994], где в качестве  $X(t)$  рассматривался процесс ФБД и соответствующий трафик (3.3) назван фрактальным броуновским трафиком.

Теперь также предположим, что интенсивность обслуживания определяется как  $r = m + \mu$ , где  $\mu$  – некоторый положительный параметр. Поскольку  $r > m$ , то система обладает стационарным режимом. В частности, существует стационарная (текущая) загрузка системы  $Q$ . Тогда вероятность того, что величина загрузки  $Q$  превысит некоторое пороговое значение  $b$ , определяется как [Norros, 1994]:

$$P(Q \geq b) = P\left(\sup_{t \in S} (X(t) - \mu t) \geq b\right) \quad (3.4)$$

где  $S$  – множество (дискретное или непрерывное) моментов времени, на котором рассматривается процесс  $Q$ .

Пусть теперь в данную систему поступает информация от  $n$  независимых одинаково распределенных гауссовских источников. В этом случае вероятность переполнения (3.4) запишется в виде:

$$\begin{aligned} P(Q \geq nb) &= P\left(\sup_{t \in S} \left(\sum_{i=1}^n X^{(i)}(t) - n\mu t\right) \geq nb\right) \\ &= P\left(\sup_{t \in S} (\sqrt{1/n} X(t) - \mu t) \geq b\right). \end{aligned}$$

Обозначим  $\varepsilon = 1/\sqrt{n}$ , тогда интересующая нас вероятность (3.4) может быть переписана в виде:

$$p_\varepsilon = P\left(\sup_{t \in S} (\varepsilon X(t) - \mu t) \geq b\right). \quad (3.5)$$

Отметим, что при малом  $\varepsilon$  переполнение буфера становится редким событием. Задача оценки (малой) вероятности редкого события важна при проектировании коммуникационных сетей. Например, чтобы обеспечить приемлемое качество обслуживания (QoS) коммуникационной сетью, вероятность переполнения (3.5) должна быть порядка  $10^{-9}$  и меньше. Эффективное вычисление оценки вероятности (3.5) требует применения специальных ускоренных методов, поскольку прямой метод Монте-Карло в данной ситуации оказывается неприменимым ввиду неприемлемо большого времени моделирования, необходимого для построения оценки с заданной точностью. Эта проблема более подробно обсуждается в [Dieker, Mandjes, 2006].

Приведем известные результаты для асимптотики  $p_\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$  [Debicki, Mandjes, 2002].

В случае если множество  $S = \mathbb{N}$  – множество натуральных чисел, то для (3.5) справедливо асимптотическое выражение

$$p_\varepsilon = P\left(\sup_{t \in \mathbb{N}} (\varepsilon X(t) - \mu t) \geq b\right) \sim \Psi(\varphi(t^*) \varepsilon^{-1}), \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0,$$

где  $\varphi(t) = \frac{b + \mu t}{\sqrt{v(t)}}$ ,  $t^* = \arg \inf_{t \in S} \varphi^2(t)$ , а  $\Psi(x)$  –

хвост функции распределения с. в.  $N(0,1)$ ,

т. е.

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_x^\infty e^{-y^2/2} dy, \quad x \geq 0.$$

Отметим, что  $t^*$  – так называемое *наиболее вероятное время достижения переполнения буфера*.

В случае, если процесс  $X(t)$  является ФБД  $\{B_H(t), t \geq 0\}$ , то легко получить, что

$$t^* = \frac{H}{1-H} \cdot \frac{b}{\mu}, \quad \varphi(t^*) = \left(\frac{b}{1-H}\right)^{1-H} \left(\frac{\mu}{H}\right)^H.$$

Если  $S = [0, T]$  и  $T > t^*$ , то для вероятности переполнения (3.5) справедливо асимптотическое представление

$$p_\varepsilon \sim \frac{\beta_{2H}}{\pi} \frac{1}{\sqrt{H(1-H)}} \left(\frac{\varphi(t^*)}{\sqrt{2}}\right)^{\frac{1}{H}-1} \cdot \varepsilon^{-1-H} \Psi(\varphi(t^*) \varepsilon^{-1}), \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0,$$

где  $\beta_{2H}$  – константа Пиканда [Piterbarg, 1996], которая определяется следующим образом

$$\beta_\alpha = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \cdot \mathbf{E} \exp\left(\sup_{t \in [0, T]} (\sqrt{2} B_{\alpha/2}(t) - t^\alpha)\right).$$



## Моделирование гауссовских процессов

Выше говорилось о том, что гауссовские процессы могут являться приемлемыми моделями для описания сетевого трафика. В этой связи важна задача их имитационного моделирования. Одним из универсальных методов такого моделирования является факторизация Чёлески [Asmussen, Glynn, 2007], которая кратко описана ниже.

Будем рассматривать гауссовский процесс  $X(t)$  с дискретным временем и ковариационной функцией  $\Gamma(s, t)$ . Пусть  $\Gamma = (\gamma_{ij})_{i, j=0, \dots, n}$  – ковариационная матрица рассматриваемого процесса, где  $\gamma_{ij} = \text{Cov}(X(i), X(j))$ . Известно, что  $\Gamma$  – неотрицательно определена, т. е.  $x^T \Gamma x \geq 0$  для любого  $x \neq 0$ . Дополнительно предположим, что  $\Gamma$  положительно определена. Задача факторизации Чёлески состоит в том, чтобы для данной положительно определенной матрицы  $\Gamma$  найти нижнюю треугольную матрицу  $C = (c_{ij})_{i, j=0, \dots, n}$  ( $c_{ij} = 0$  при  $j > i$ ), такую, что  $\Gamma = CC^T$ . Поиск такой матрицы является хорошо известной алгебраической задачей. Формулы для элементов матрицы  $C$  приведены, например, в [Asmussen, Glynn, 2007]. Имитационное моделирование исходного процесса состоит в построении  $n+1$  его значения, т. е. с. в.  $X(0), \dots, X(n)$ . При этом вначале необходимо сгенерировать  $n+1$  независимых стандартных нормальных с. в.  $Y_0, \dots, Y_n$ . Затем значения  $X(i)$  вычисляются следующим образом:

$$X(i) = \sum_{k=0}^i c_{ik} Y_k, \quad i = 0, \dots, n.$$

Отметим, что данный метод является точным в том смысле, что он сохраняет корреляционную структуру моделируемого процесса. Действительно,

$$\begin{aligned} \text{Cov}(X_i, X_j) &= \text{Cov}\left(\sum_{k=0}^i c_{ik} Y_k, \sum_{s=0}^j c_{js} Y_s\right) \\ &= \sum_{k=0}^i \sum_{s=0}^j c_{ik} c_{js} \text{Cov}(Y_k, Y_s) \\ &= \sum_{k=0}^{\min(i, j)} c_{ik} c_{ks} = \gamma_{ij}, \end{aligned}$$

т. е. корреляционная матрица построенных с. в.  $X(0), \dots, X(n)$  совпадает с заданной матрицей  $\Gamma$ .

Таким способом можно моделировать любой гауссовский процесс и, в частности, ФБД, у которого ковариационная функция имеет вид:

$$\Gamma(s, t) = \frac{1}{2} (|t|^{2H} + |s|^{2H} - |t-s|^{2H}).$$

На рис. 1, 2 представлены графики ФБД для числа шагов  $n = 200$  и для различных значений параметра Херста  $H$ . Эти графики наглядно показывают различные типы последствия («предсказуемость» траекторий процесса) в зависимости от значений параметра  $H$ .

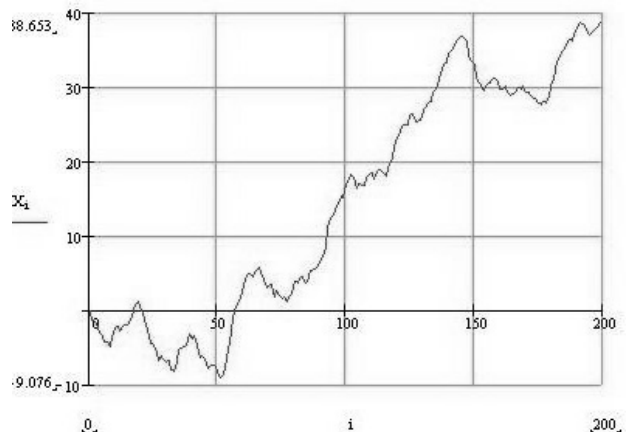


Рис. 1. Реализация ФБД для  $H=0,8$

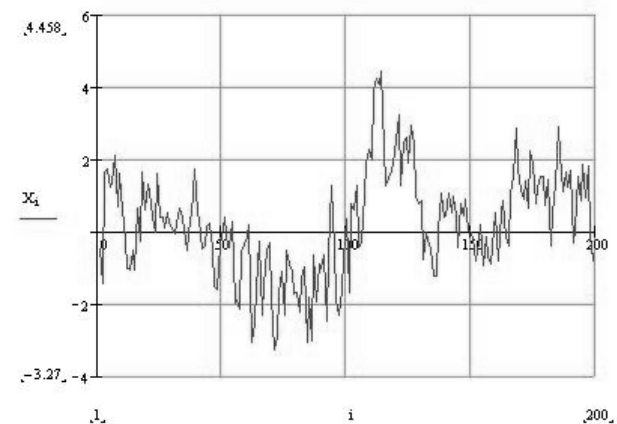


Рис. 2. Реализация ФБД для  $H=0,2$

Как уже отмечалось, факторизация Чёлески является общим методом для моделирования любого гауссовского процесса. Сложность этого метода составляет  $O(n^3)$ . Этот метод также требователен к объему памяти, поскольку необходимо хранить корреляционную матрицу  $\Gamma$  и матрицу  $C$ .

Чтобы промоделировать ФБД, можно воспользоваться его стохастическим представлением Мандельброта [Mandelbrot, van Ness, 1968], которое, в свою очередь, аппроксимируется следующим выражением:

$$\bar{B}_H(n) = C_H \left( \sum_{k=b}^0 [(n-k)^{H-1/2} - (-k)^{H-1/2}] B_1(k) + \sum_{k=0}^n (n-k)^{H-1/2} B_2(k) \right),$$

$$n = 1, \dots, N.$$

Здесь  $b = N^{3/2}$ ,  $B_1$  ( $B_2$ ) – вектор из  $b+1$  ( $N+1$ ) независимых одинаково распределенных стандартных нормальных с.в. (причем,  $B_1$  и  $B_2$  также взаимно независимы), а константа  $C_H$  определяется следующим образом:

$$C_H = \sqrt{\frac{2H}{(H-1/2)\beta(H-1/2, 2-2H)}},$$

где  $\beta(x, y)$  – бета-функция.

Данный подход является исторически первым, но в настоящее время используется довольно редко. Подробное описание методов моделирования ФБД представлено в [Coeurjolly, 2000].

Отметим, что стандартное броуновское движение  $B(t) = B_{1/2}(t)$  моделируется проще, чем ФБД. Для пояснения обозначим  $t_n^h = nh$ , где  $n = 1, 2, \dots$ , а  $h > 0$  – фиксированная длина шага. Обозначим приращения  $\Delta_n^h B = B(t_n^h) - B(t_{n-1}^h)$ . Имитационное моделирование броуновского движения осуществляется по следующей схеме. Сначала генерируются приращения  $\Delta_n^h B$  как независимые одинаково распределенные с.в. вида  $N(0, h)$ ; после этого вычисляются значения  $B(t)$  в моменты времени  $\{t_k^h\}$

$$B(t_n^h) = \Delta_1^h B + \dots + \Delta_n^h B, \quad k = 1, \dots, n. \quad (4.1)$$

При моделировании приходится заменять исходный процесс с непрерывным временем на процесс с дискретным временем, а это приводит к так называемой ошибке дискретизации. Фактически траектория процесса представляет собой линейный интерполяционный сплайн, построенный по точкам  $B(t_k^h)$ , удовлетворяющим (4.1). Выберем шаг  $h = h_N = 1/N$ , где  $N > 0$  – некоторое фиксированное число, а  $B^h(t)$  – траектория броуновского движения, сгенерированная по схеме (4.1). В работе [Asmussen, Glynn, 2007] показано, что средняя ошибка рассматриваемой линейной интерполяции удовлетворяет соотношению

$$\mathbf{E} \int_0^1 |B^h(t) - B(t)| dt = c / N^{1/2}, \quad c = \sqrt{\pi/32}.$$

После того как мы выяснили, каким образом статистически моделируются гауссовские процессы, мы промоделируем процесс загрузки в коммуникационной системе с гауссовским

входным потоком. Пусть в такую систему на интервале  $[0, t]$  поступает объем нагрузки, равный величине  $A(t)$ , которая определяется следующим образом:

$$A(t) = mt + \sqrt{am} B_H(t),$$

где  $B_H(t)$  – ФБД с параметром Херста  $H$ . Пусть обслуживание трафика осуществляется с некоторой постоянной скоростью  $C$ . Моделирование стационарного процесса загрузки  $Q(k)$ ,  $k \geq 0$ , (в дискретном времени) осуществляется по следующей схеме. В начальный момент времени система пуста ( $Q(0) = 0$ ), далее загрузка в момент времени  $k$  рассчитывается по следующему рекуррентному соотношению [Norros, 1994]

$$Q(k) = \max\left(0, Q(k-1) - C + m + \sqrt{am}(B_H(k) - B_H(k-1))\right),$$

$$k = 1, 2, \dots \quad (4.2)$$

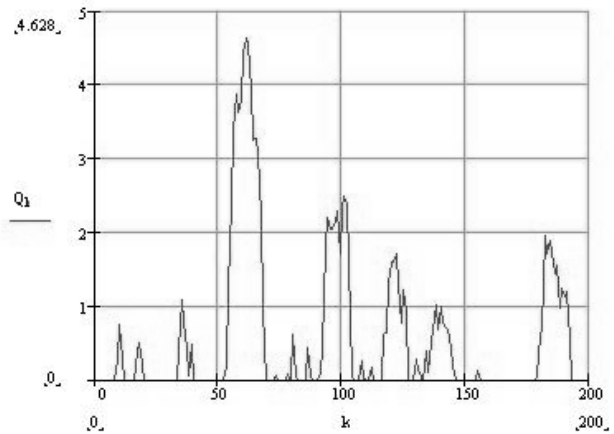


Рис. 3. Моделирование загрузки для  $H=0,8$ ,  $a=1$ ,  $C=1$ ,  $m=0,5$

Пример моделирования по схеме (4.2) представлен на рис. 3.

## Заключение

В статье рассмотрена применимость гауссовских моделей для моделирования трафиков и процесса загрузки в современных телекоммуникационных сетях. Представлен элементарный N-Q тест для проверки нормальности сетевого трафика. Обсуждается проблема оценки вероятности переполнения, которая играет важную роль при планировании мощностей телекоммуникационных систем. Приведены важные асимптотические результаты для случая агрегированного входного потока при растущем числе слагаемых потоков от отдельных источников (пользователей). Рассматриваются основные методы имитационного моделирования ФБД и стандартного броуновского движения. Кроме

того, представлены результаты численного моделирования ФБД и процесса загрузки в системе обслуживания с таким входным процессом.

### Литература

*Asmussen S., Glynn P.* Stochastic Simulation: algorithms and analysis. Springer. 2007. P. 488.

*Brown B., Hettmannsperger T.* Normal scores, normal plots, and tests for normality // Journal of the American Statistical Association. 1996. Vol. 91, N. 436. P. 1668–1675.

*Coeurjolly J. F.* Simulation and identification of the fractional Brownian motion: a bibliographical and comparative study // Journal of Stat. Software. 2000. 5.

*Crovella M. E., Bestavros A.* Self-Similarity in World Wide Web Traffic: Evidence and Possible Causes in IEEE/ACM Transactions on Networking, 1997. 5(6). P. 835–846.

*Debicki K., Mandjes M.* Exact overflow asymptotics for queues with many Gaussian inputs. Report PNA-R0209 March 31, 2002.

*Dieker A., Mandjes M.* Fast simulation of overflow probabilities in a queue with Gaussian input. ACM, 2006. 16(2). P. 1–33.

*Kilpi J., Norros I.* Testing the Gaussian approximation of aggregate traffic, Proceedings of the second ACM SIGCOMM Workshop, Marseille, France. 2002. P. 49–61.

*Leland W. E., Taqqu M. S., Willinger W., Wilson D. V.* On the self-similar nature of ethernet traffic (extended version). IEEE/ACM Transactions of Networking, 1994. 2(1). P. 1–15.

*Mandelbrot B. B., van Ness J. W.* Fractional Brownian motions, fractional noises and applications. SIAM Review, 1968. 10. P. 422–437.

*Mandjes M.* Large Deviations of Gaussian Queues. Chichester: Wiley, 2007. P. 339.

*Norros I.* A storage model with self-similar input, Queueing Systems. 1994. Vol. 16. P. 387–396.

*Piterbarg V.* Asymptotic methods in the theory of Gaussian processes and fields. Translations of Mathematical Monographs. 1996. 148, AMS, Providence.

*Taqqu M. S., Willinger W., Sherman R.* Proof of a fundamental result in self-similar traffic modeling. Computer communication review. 1997. 27. P. 5–23.

*Willinger W., Taqqu M. S., Leland W. E., Wilson D.* Self-similarity in high-speed packet traffic: analysis and modeling of Ethernet traffic measurements, Statistical Sciences. 1995. Vol. 10, N. 1. P. 67–85.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

#### Лукашенко Олег Викторович

аспирант  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: lukashenko-oleg@mail.ru  
тел.: (8142) 763370

#### Морозов Евсей Викторович

ведущий научный сотрудник, д. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: emorozov@karelia.ru  
тел.: (8142) 763370

#### Пагано Микеле

преподаватель  
факультет информационной инженерии Университета г.  
Пизы, Италия  
эл. почта: m.pagano@iet.unipi.it  
тел.: +39 050 2217575

#### Lukashenko, Oleg

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: lukashenko-oleg@mail.ru  
tel.: (8142) 763370

#### Morozov, Evsey

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: emorozov@karelia.ru  
tel.: (8142) 763370

#### Pagano, Michele

Associated Professor  
Department of Information Engineering,  
University of Pisa, Italy  
e-mail: m.pagano@iet.unipi.it  
tel.: +39 050 2217575

УДК 519.2

## О ПРЕДЕЛЬНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ МАКСИМАЛЬНОЙ СТЕПЕНИ ВЕРШИНЫ В СЛУЧАЙНОМ ГРАФЕ ИНТЕРНЕТ-ТИПА

Ю. Л. Павлов<sup>1</sup>, Е. Н. Дертишникова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН

<sup>2</sup>Институт социально-экономического развития территорий (г. Вологда)

Рассматриваются случайные графы, состоящие из  $N$  занумерованных вершин. Степени вершин определяются независимо в соответствии со степенным распределением с показателем  $\tau > 0$ . Все полуребра вершин занумерованы. Граф строится путем равновероятного соединения полуребер для образования ребер. Последние исследования показали, что такие случайные графы можно использовать для моделирования топологии сети Интернет. Получено предельное распределение максимальной степени вершины при условии, что сумма степеней равна  $n$ , где  $n$  четно,  $\tau < 1$  и  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $n/N^{1/\tau} \rightarrow \infty$ .

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** случайные графы, Интернет, максимальная степень вершины, предельное распределение.

**Yu. L. Pavlov, E. N. Dertishnikova. ON LIMIT DISTRIBUTION OF  
MAXIMUM VERTEX DEGREE IN RANDOM GRAPH OF INTERNET TYPE**

We study random graphs consisting of  $N$  numbered vertices. The degrees of the vertices are drawn independently from power-law distribution with the exponent  $\tau > 0$ . All of the stubs of the vertices are numbered. The graph is constructed by joining each stub to another equiprobably to form edges. Recent studies show that such random graphs can be used for modeling the Internet topology. We obtain the limit distribution of the maximum vertex degree under the condition that the sum of vertex degrees is equal to  $n$ ,  $n$  is even,  $\tau < 1$  and  $N, n \rightarrow \infty$  such that  $n/N^{1/\tau} \rightarrow \infty$ .

**Key words :** random graphs, Internet, maximum vertex degree, limit distribution.

В последнее время появилось большое число книг и статей, посвященных использованию случайных графов для моделирования сложных сетей передачи данных, включая Интернет (см. например, [Janson et al., 2000; Reittu, Norros, 2004; Durrett, 2007]). В связи с этим такие графы иногда называют графами Интернет-типа. Степени их вершин являются независимыми случайными величинами, об-

щим распределением которых служит дискретный аналог распределения Парето с положительным показателем  $\tau$ .

Пусть в графе содержится  $N$  вершин, занумерованных числами от 1 до  $N$ , а степени вершин обозначим  $\eta_1, \dots, \eta_N$ . Пусть  $\eta$  – случайная величина, равная степени произвольной вершины, и положим

$$P\{\eta \geq k\} = k^{-\tau}, \quad \tau > 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (1)$$

Для удобства описания структуры графа будем использовать понятие полуребра, т. е. ребра, инцидентного конкретной вершине, но для которой смежная вершина еще не определена. Предполагается, что все полуребра графа являются различными (занумерованными). Процесс формирования графа состоит из двух этапов. На первом этапе для каждой вершины определяется ее степень, т. е. число выходящих из нее полуребер, являющееся реализацией случайной величины  $\eta$ . На втором этапе полуребра, выходящие из всех вершин, соединяются равновероятно; два полуребра, соединившись, образуют ребро. Понятно, что для построения графа необходимо, чтобы общее число полуребер было четным. Для обеспечения этого условия искусственно вводят дополнительную вершину, степень которой равна 0 или 1 в зависимости от того, является ли суммарное число полуребер основных вершин четным или нет. Нетрудно видеть, что такая конструкция графа допускает петли и кратные ребра.

Во многих работах (см., например, [Reittu, Norros, 2004; Durrett, 2007]) указываются возможные варианты содержательной интерпретации рассмотренной модели. Например, при моделировании Интернета, вершинам графа могут соответствовать локальные сети (точнее, автономные системы), кратные ребра означают одновременную передачу данных несколькими компьютерами одной сети в другую, а петля соответствует подключению одного компьютера к другому через общий маршрутизатор внутри одной локальной сети.

В различных статьях и монографиях (см. например, [Janson et al., 2000; Reittu, Norros, 2004; Durrett, 2007; Павлов, 2007, 2009; Павлов, Чеплюкова, 2008]) изучалось предельное поведение различных характеристик Интернет-графов при  $N \rightarrow \infty$ . В ходе исследований выяснилось, что свойства графов существенно зависят от значения параметра  $\tau$ . Наблюдения за реальными сетями показали, что предложенная модель является адекватной, если  $\tau \in (1, 2)$ , хотя с развитием сетей уже встречаются случаи  $\tau < 1$ . Отмечается также, что если параметр  $\tau$  изменяется так, что его значение переходит через точки  $\tau = 1$  или  $\tau = 2$ , то происходят значительные изменения свойств графа. Поэтому представляет интерес изучение графов Интернет-типа и при значениях параметра  $\tau$  вне интервала  $(1, 2)$ . Заметим, что если  $\tau \in (1, 2)$ , то распределение (1) имеет конечное математическое ожидание и бесконечную дисперсию.

Представляют интерес Интернет-графы с заданной суммой степеней вершин  $v_N = \eta_1 + \dots + \eta_N$ , так как на практике иногда удается оценить число связей в реальных сетях, а если известны результаты о таких графах в различных зонах изменения  $N$  и  $v_N$ , то их можно распространить и на графы со случайным числом ребер.

В настоящей работе рассматривается подмножество Интернет-графов, для которых сумма степеней вершин известна и равна  $n$ . Расположим степени вершин в виде вариационного ряда  $\eta_{(1)} \leq \eta_{(2)} \leq \dots \leq \eta_{(N)}$ , записав  $\eta_{(1)}, \dots, \eta_{(N)}$  в убывающем порядке. Обозначим  $\eta_{(N)}$  максимальную степень вершины, т. е.  $\eta_{(N)} = \max_{1 \leq i \leq N} \eta_i$ .

В работе [Павлов, Чеплюкова, 2008] было найдено предельное распределение максимальной степени вершины при  $\tau > 0$  и  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $1 < n/N < \zeta(\tau)$ , где  $\zeta(\tau)$  – значение дзета-функции Римана в точке  $\tau$ . В этой работе рассматривались также случаи  $n/N \downarrow 1$  и  $n/N \uparrow \zeta(\tau)$ . Заметим, что при  $\tau \leq 1$  справедливо равенство  $\zeta(\tau) = \infty$ . В случае  $n/N \rightarrow \infty$  и  $\tau < 1$  было дополнительное условие  $n/N I^\tau \rightarrow 0$ . В работе [Павлов, 2009] получены предельные теоремы для  $\eta_{(N)}$  в случае  $\tau > 1$  и  $n/N \rightarrow \zeta(\tau)$ .

В настоящей работе доказана теорема о предельном поведении максимальной степени вершины при условии, что  $\tau \in (0, 1)$ ,  $v_N = n$  и  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $n/N I^\tau \rightarrow \infty$ . Справедливо следующее утверждение.

**Теорема.** Пусть  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $n/N I^\tau \rightarrow \infty$ ,  $\tau \in (0, 1)$ . Тогда

$$P \left\{ \frac{n - \eta_N}{N^{1/\tau}} \leq z \right\} \rightarrow \int_0^z g(x) dx,$$

где  $g(x)$  – плотность устойчивого распределения с показателем  $\tau$  и характеристической функцией

$$f(t) = \exp \left\{ -\Gamma(1-\tau) |t|^\tau \left( 1 - i \frac{t}{|t|} \operatorname{tg} \frac{\pi\tau}{2} \right) \cos \frac{\pi\tau}{2} \right\}, \quad (2)$$

а  $\Gamma(1-\tau)$  означает значение гамма-функции в точке  $1-\tau$ .

Методом доказательства теоремы является обобщенная схема размещения частиц по ячейкам, введенная и изученная В. Ф. Колчиным (см., например, [Колчин, 2004]). Ниже приводятся вспомогательные утверждения (леммы 1-3), с помощью которых в конце статьи доказывается сформулированная теорема.

Из (1) ясно, что

$$p_k = P\{\eta = k\} = k^{-\tau} - (k+1)^{-\tau}, \quad k=1, 2, \dots \quad (3)$$

Пусть  $\xi_1, \dots, \xi_N$  – независимые одинаково распределенные случайные величины, каждая из которых имеет распределенные (3). Отсюда следует, как легко видеть, что если  $k_1, \dots, k_N$  – натуральные числа такие, что  $k_1 + \dots + k_N = n$ , то справедливо равенство

$$\begin{aligned} P\{\eta_1 = k_1, \dots, \eta_N = k_N\} = \\ P\{\xi_1 = k_1, \dots, \xi_N = k_N \mid \xi_1 + \dots + \xi_N = n\}, \end{aligned} \quad (4)$$

а если  $k_1 + \dots + k_N \neq n$ , то  $P\{\eta_1 = k_1, \dots, \eta_N = k_N\} = 0$ . Соотношение (4) означает, что для двух наборов случайных величин  $(\eta_1, \dots, \eta_N)$  и  $(\xi_1, \dots, \xi_N)$  выполнены условия обобщенной схемы размещения.

Введем вспомогательные случайные величины  $(\xi_1^{(r)}, \dots, \xi_N^{(r)})$ , для которых

$$P\{\xi_i^{(r)} = k\} = P\{\xi_i = k \mid \xi_i \leq r\}, \quad i = 1, \dots, N,$$

и обозначим

$$\zeta_N = \xi_1 + \dots + \xi_N, \quad \zeta_N^{(r)} = \xi_1^{(r)} + \dots + \xi_N^{(r)},$$

$$P_r = P\{\xi_1 > r\}.$$

Используя (4), легко получить следующую лемму.

**Лемма 1.** Справедливо равенство

$$P\{\eta_{(N)} \leq r\} = (1 - P_r)^N \frac{P\{\zeta_N^{(r)} = n\}}{P\{\zeta_N = n\}}.$$

Рассмотрим предельное поведение вероятности  $P\{\zeta_N = n\}$ .

**Лемма 2.** Пусть  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $n/N^{1/\tau} \rightarrow \infty$ . Тогда для  $n$  таких, что  $P\{\zeta_N = n\} > 0$ ,

$$P\{\zeta_N = n\} = \tau N n^{-(\tau+1)} (1 + o(1)).$$

*Доказательство.* Нетрудно проверить, что лемма 2 вытекает из результатов работы [Ткачук, 1973]. Однако, следуя этой работе и лемме 2.5.2 книги [Pavlov, 2000], мы приведем подробное доказательство леммы 2, поскольку, как будет видно ниже, оно послужит основой для аналогичного доказательства в схеме серий (лемма 3), для которой использовать статью [Ткачук, 1973] нельзя. Обозначим

$$\gamma = (N^{1/\tau} / n)^\alpha, \quad (5)$$

где  $\alpha = \tau / (2\tau + 2)$ . Легко видеть, что

$$P\{\zeta_N = n\} = P_1(n) + NP_2(n) + P_3(n), \quad (6)$$

где

$$P_1(n) = P\{\zeta_N = n; \xi_i \leq \gamma, \quad i = 1, \dots, N\},$$

$$P_2(n) =$$

$$P\{\zeta_N = n; \xi_i \leq \gamma, \quad i = 1, \dots, N-1, \xi_N > \gamma\},$$

$$P_3(n) = P\left\{\zeta_N = n; \bigcup_{i \neq j} (\xi_i > \gamma, \xi_j > \gamma)\right\}.$$

Оценивая последовательно эти вероятности, мы увидим ниже, что основной вклад в сумму (6) дает второе слагаемое.

Рассмотрим вероятность  $P_1(n)$ . Обозначим

$$R(w) = \sum_{k \leq \gamma n} \exp\{kw\} p_k. \quad (7)$$

Из (3) следует, что при  $k \rightarrow \infty$

$$pk = \tau k^{(\tau+1)} (1 + o(1)). \quad (8)$$

Отсюда нетрудно получить, что при достаточно больших  $l$

$$\sum_{k \leq l} kp_k \leq C_1 l^{1-\tau}, \quad \sum_{k > l} p_k \leq C_2 l^{-\tau}, \quad (9)$$

здесь и далее символы  $C_1, C_2, \dots$  означают некоторые положительные постоянные.

Поскольку  $N^{1/\tau} / n \rightarrow 0$ , из (5) следует, что  $(\gamma n)^{-\tau} = o(N^{-1})$ .

Используя это соотношение и учитывая, что при  $0 \leq y \leq 1$  справедливо равенство  $e^y = 1 + \delta(y)$ , где  $\delta(y) \leq 2y$ , из (7) и (9) получаем, что

$$R(1/(\gamma n)) = \sum_{k \leq \gamma n} p_k \exp\{k/(\gamma n)\} =$$

$$\sum_{k \leq \gamma n} p_k (1 + \delta(k/(\gamma n))) = 1 - \sum_{k > \gamma n} p_k + Q,$$

где, в силу (9), (10), при  $N \rightarrow \infty$

$$Q < 2(\gamma n)^{-1} \sum_{k \leq \gamma n} kp_k = o(N^{-1}),$$

$$\sum_{k > \gamma n} p_k = o(N^{-1}). \quad (11)$$

Учитывая это, находим, что

$$R(1/(\gamma n)) = 1 + o(N^{-1}). \quad (12)$$

Введем вспомогательные независимые, одинаково распределенные случайные величины  $\xi_1(\gamma), \dots, \xi_N(\gamma)$ , имеющие следующее распределение вероятностей:

$$P\{\xi_i(\gamma) = k\} = p_k \exp\{k/(\gamma n)\} R^{-1}(1/(\gamma n)), \quad k \leq \gamma n.$$

Обозначим  $\zeta_N(\gamma) = \xi_1(\gamma) + \dots + \xi_N(\gamma)$ . Легко видеть, что

$$P_1(n) = R^N(1/(\gamma n)) \exp\{-1/\gamma\} P\{\zeta_N(\gamma) = n\}. \quad (13)$$

Докажем, что при  $N \rightarrow \infty$

$$P\{\zeta_N(\gamma) = n\} \leq C_3 N^{-1/\tau}. \quad (14)$$

Обозначим  $\varphi(t), \varphi_\gamma(t)$  характеристические функции случайных величин  $\xi_1$  и  $\xi_1(\gamma)$  соответственно. Воспользуемся формулой обращения и представим вероятность  $P\{\zeta_N(\gamma) = n\}$  в виде

$$P\{\zeta_N(\gamma) = n\} =$$

$$\frac{1}{2\pi N^{1/\tau}} \int_{-\pi N^{1/\tau}}^{\pi N^{1/\tau}} \exp\left\{-\frac{itn}{N^{1/\tau}}\right\} \left(\varphi_\gamma\left(\frac{t}{N^{1/\tau}}\right)\right)^N dt. \quad (15)$$

Нетрудно видеть, что

$$\varphi_\gamma(t) = R(it + 1/(\gamma)) / R(1/(\gamma)). \quad (16)$$

Поскольку  $\exp\{k/(\gamma)\} \leq 1 + 2k/(\gamma)$ ,

$$|R(it + 1/(\gamma))| \leq \left| \sum_{k \leq \gamma} p_k e^{ik} \right| + 2(\gamma)^{-1} \times \quad (17)$$

$$\sum_{k \leq \gamma} kp_k \leq |\varphi(t)| + 2(\gamma)^{-1} \sum_{k \leq \gamma} kp_k + O\left(\sum_{k > \gamma} p_k\right).$$

Отсюда и из (11) получаем, что

$$|R(it + 1/(\gamma))| \leq |\varphi(t)| + o(N^{-1}).$$

Тогда из (12) и (16) следует, что

$$|\varphi_\gamma(t)|^N \leq |\varphi(t)|^N |1 + o(\varphi^{-1}(t)N^{-1})|^N. \quad (18)$$

Покажем, что для  $t \in [-\pi, \pi]$  справедливо неравенство  $|\varphi_\gamma(t)| \geq C_4 > 0$ .

Из (3) получаем, что

$$\varphi(t) = 1 + (e^{it} - 1)\Phi(e^{it}, \tau, 1), \quad (19)$$

где  $\Phi(z, s, a)$  – трансцендентная функция Лерча, имеющая вид:

$$\Phi(z, s, a) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{(j+a)^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{t^{s-1} e^{-at}}{1 - ze^{-t}} dt. \quad (20)$$

При  $s < 1$  и  $z \rightarrow 1$  известна асимптотика функции (20) (см., например, [Flajolet, Sedgewick, 2009]):

$$\Phi(z, s, 1) = \Gamma(1-s)(-\ln z)^{s-1}(1 + o(1)). \quad (21)$$

Отсюда и из (19) нетрудно получить, что  $\varphi(t) \rightarrow 1$  при  $t \rightarrow 0$ . Рассмотрим случай  $0 < \varepsilon \leq |t| \leq \pi$ . Из (19) и (20) следует, что

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \varphi(t) &= 1 + (\cos t - 1) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos kt}{(k+1)^\tau} - \\ \sin t \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin kt}{(k+1)^\tau} &= 1 + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos(k+1)t}{(k+1)^\tau} - \\ &\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos kt}{(k+1)^\tau}. \end{aligned} \quad (22)$$

Согласно [Прудников и др., 1981] (см. примеры 5.4.3.1 и 5.4.2.1)

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos kt}{(k+1)^\tau} = \frac{1}{\Gamma(\tau)} \int_0^{\infty} \frac{x^{\tau-1} e^{-x} (1 - e^{-x} \cos t)}{1 - 2e^{-x} \cos t + e^{-2x}} dx,$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos(k+1)t}{(k+1)^\tau} = \frac{1}{\Gamma(\tau)} \int_0^{\infty} \frac{x^{\tau-1} (e^x \cos t - 1)}{1 - 2e^x \cos t + e^{2x}} dx.$$

Подставляя эти выражения в (22), получаем, что

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \varphi(t) &= \\ 1 - \frac{1}{\Gamma(\tau)} \int_0^{\infty} x^{\tau-1} e^{-x} \frac{(1 - \cos t)(1 + e^{-x})}{1 - 2e^{-x} \cos t + e^{-2x}} dx. \end{aligned} \quad (23)$$

Для того чтобы выполнялось равенство  $\operatorname{Re} \varphi(t) = 0$ , последнее слагаемое в (23) должно равняться единице. Но это возможно только, если для всех  $x$

$$\frac{(1 - \cos t)(1 + e^{-x})}{1 - 2e^{-x} \cos t + e^{-2x}} = 1,$$

или  $\cos t = e^{-x}$ , что исключено. Поэтому  $\operatorname{Re} \varphi(t) \neq 0$  и из (18) следует, что при любом фиксированном  $t$

$$|\varphi_\gamma(t)|^N \leq C_5 |\varphi(t)|^N. \quad (24)$$

Из (19) и (21) находим, что при  $t \rightarrow 0$

$$\varphi(t) = 1 + (it - t^2/2 + O(t^3))\Gamma(1-\tau)(-it)^{\tau-1},$$

откуда получаем, что при  $|t| < \varepsilon$  и достаточно малом  $\varepsilon$

$$|\varphi(t)| \leq \exp\{-C_6 |t|^\tau\}. \quad (25)$$

Поскольку при  $\varepsilon \leq |t| \leq \pi$  справедливо неравенство

$$|\varphi(t)| \leq e^{-C_7}, \quad (26)$$

из (15), (24) и (25) следует, что

$$P\{\zeta_N(\gamma) = n\} \leq C_8 N^{-1/\tau} \times$$

$$\int_{|t| < eN^{1/\tau}} \exp\{-C_9 |t|^\tau\} dt + C_{10} N^{-1/\tau} \int_{eN^{1/\tau} \leq |t| \leq \pi N^{1/\tau}} e^{-C_{11} N} dt,$$

откуда и следует (14). Из (5) и (12)-(14) находим, что

$$P_1(n) \leq C_{12} N^{-1/\tau} e^{-1/\gamma} = o(Nn^{-(\tau+1)}). \quad (27)$$

Оценим вероятность  $P_2(n)$ . Очевидно, что

$$\begin{aligned} P_2(n) &= \sum_{N-1 \leq k < n - \gamma} P\{\xi_N = n - k\} P\{\xi_1 + \dots + \xi_{N-1} = k, \\ &\xi_i \leq \gamma, i = 1, \dots, N-1\}. \end{aligned} \quad (28)$$

Обозначим  $\xi_1(\gamma), \dots, \xi_N(\gamma)$  вспомогательные независимые одинаково распределенные случайные величины, для которых

$$P\{\xi_1(\gamma) = k\} = P\{\xi_1 = k \mid \xi_1 \leq \gamma\}.$$

Обозначим также  $\zeta_{N-1}(\gamma) = \xi_1(\gamma) + \dots + \xi_{N-1}(\gamma)$ . Тогда

$$\begin{aligned} P\{\xi_1 + \dots + \xi_{N-1}, \xi_i \leq \gamma, i = 1, \dots, N-1\} &= \\ P^{N-1}\{\xi_1 \leq \gamma\} P\{\xi_1 + \dots + \xi_{N-1} = k \mid \xi_1 \leq \gamma, i = 1, \dots, N-1\} &= \\ P^{N-1}\{\xi_1 \leq \gamma\} P\{\zeta_{N-1}(\gamma) = k\}. \end{aligned}$$

Отсюда и из (9), (10), (28) следует, что

$$\begin{aligned} P_2(n) &= \\ (1 + o(1)) \sum_{N-1 \leq k < n - \gamma} P\{\xi_N = n - k\} P\{\zeta_{N-1}(\gamma) = k\} \end{aligned} \quad (29)$$

Покажем, что при достаточно больших  $n$

$$P\{\zeta_{N-1}(\gamma) > \gamma^{-1} N^{1/\tau}\} \leq C_{13} \gamma^\tau. \quad (30)$$

Легко видеть, что

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} \leq (N-1)\mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} + \\ & \left(\mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}\}\right)^{N-1} \times \\ & \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau} \mid \xi_i(\mathcal{M}) \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}, i=1, \dots, N-1\} \leq \\ & (N-1)\mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} + \left(\frac{1 - \mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\}}{1 - \mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \mathcal{M}\}}\right)^{N-1} \times \\ & \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\gamma^{-1}N^{1/\tau}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} \end{aligned} \quad (31)$$

Заметим, что

$$\mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} = \sum_{k > \gamma^{-1}N^{1/\tau}} \mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) = k\} \leq$$

$$C_{14} \mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\}.$$

Отсюда и из (9) получаем неравенство

$$\begin{aligned} (N-1)\mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} & \leq C_{15} N (\gamma^{-1}N^{1/\tau})^{-\tau} \\ & = C_{15} \gamma^\tau. \end{aligned} \quad (32)$$

С помощью (9) для достаточно больших  $n$  нетрудно вывести оценку:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\xi_{N-1}(\gamma^{-1}N^{1/\tau}) & = \\ & \sum_{k < \gamma^{-1}N^{1/\tau}} k \mathbb{P}\{\xi_{N-1} = k \mid \xi_{N-1} \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} \leq C_{16} (\gamma^{-1}N^{1/\tau})^{1-\tau}. \end{aligned}$$

Используя неравенство Чёбышева, отсюда получаем, что

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\gamma^{-1}N^{1/\tau}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} \leq \\ & \gamma N^{1-1/\tau} \mathbb{E}\xi_1(\gamma^{-1}N^{1/\tau}) \leq C_{17} \gamma^\tau, \end{aligned} \quad (33)$$

а из (9) находим, что

$$\left(\frac{1 - \mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\}}{1 - \mathbb{P}\{\xi_1(\mathcal{M}) > \mathcal{M}\}}\right)^{N-1} = 1 + o(1),$$

поэтому из (31)-(33) следует оценка (30).

Учитывая (29), представим вероятность

$$P_2(n) \text{ в виде суммы} \quad (34)$$

$$P_2(n) = S_1 + S_2 + S_3,$$

где

$$S_i = (1 + o(1)) \sum_{K_i} \mathbb{P}\{\xi_N = n - k\} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) = k\},$$

$$i = 1, 2, 3;$$

$$K_1 = \{k : N - 1 \leq k \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}\},$$

$$K_2 = \{k : \gamma^{-1}N^{1/\tau} < k \leq n(1 - \gamma^a)\},$$

$$K_3 = \{k : n(1 - \gamma^a) < k \leq n(1 - \gamma)\}.$$

С помощью (5) и (8) нетрудно получить, что для  $k \in K_1$  справедливо равенство

$$p_{n-k} = \tau(n-k)^{-(\tau+1)}(1 + o(1)), \text{ следовательно,}$$

$$S_1 = \tau(1 + o(1)) \sum_{K_1} (n-k)^{-(\tau+1)} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) = k\} =$$

$$\tau n^{-(\tau+1)} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} (1 + o(1)) =$$

$$\tau n^{-(\tau+1)} (1 + o(1)).$$

Покажем, что при выполнении условий леммы имеют место соотношения

$$S_2, S_3 = o(n^{-(\tau+1)}). \text{ Если } k \in K_2, \text{ то, как не-}$$

трудно видеть,

$$S_2 \leq C_{18} (n\gamma^a)^{-(\tau+1)} \sum_{K_2} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) = k\} \leq$$

$$C_{19} (n\gamma^a)^{-(\tau+1)} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\}$$

и, как следует из (30),  $S_2 \leq C_{20} n^{-(\tau+1)} \gamma^{\tau/2}$ , по-

этому

$$S_2 = o(n^{-(\tau+1)}). \quad (36)$$

Рассмотрим  $S_3$ . Если  $k \in K_3$ , то, как и вы-

ше,  $p_{n-k} \leq C_{21} (\mathcal{M})^{-(\tau+1)}$ , откуда следует, что

$$S_3 \leq C_{22} (\mathcal{M})^{-(\tau+1)} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) > n(1 - \gamma^a)\}. \quad (37)$$

Учитывая (9), нетрудно получить, что  $\mathbb{E}\xi_1(\mathcal{M}) \leq C_{23} (\mathcal{M})^{1-\tau}$ . Поэтому с помощью неравенства Чёбышева находим, что

$$\mathbb{P}\{\zeta_{N-1}(\mathcal{M}) > n(1 - \gamma^a)\} \leq C_{24} N n^{-\tau} \gamma^{1-\tau},$$

следовательно, как видно из (5) и (37),

$S_3 = o(n^{-(\tau+1)})$ . Отсюда, из оценок (35), (36) и

представления (34) получаем, что в условиях леммы

$$P_2(n) = \tau n^{-(\tau+1)} (1 + o(1)). \quad (38)$$

Оценим, наконец, вероятность  $P_3(n)$ . Легко заметить, что

$$P_3(n) = \binom{N}{2} \times$$

$$\sum_{k < n(1-2\gamma)} \mathbb{P}\{\xi_1 + \dots + \xi_{N-2} = k\} \mathbb{P}\{\xi_{N-1} + \xi_N = n - k, \xi_{N-1} > \mathcal{M}, \xi_N > \mathcal{M}\}.$$

Отсюда следует, что

$$P_3(n) \leq C_{25} N^2 \times$$

$$\sum_{k < n(1-2\gamma)} \mathbb{P}\{\xi_1 + \dots + \xi_{N-2} = k\} \left( \sum_S \mathbb{P}\{\xi_{N-1} = i\} \mathbb{P}\{\xi_N = n - k - i\} \right), \quad (39)$$

где  $S = \{i : \gamma n < i < n(1 - \gamma) - k\}$ . В силу (8) при  $i > \gamma n$

$$\mathbb{P}\{\xi_{N-1} = i\} < C_{26} (\mathcal{M})^{-(\tau+1)}, \text{ поэтому, используя}$$

(9), получаем, что

$$\sum_S \mathbb{P}\{\xi_{N-1} = i\} \mathbb{P}\{\xi_N = n - k - i\} \leq$$

$$C_{27} (\mathcal{M})^{(\tau+1)} \mathbb{P}\{\xi_N > \mathcal{M}\} \leq C_{28} (\mathcal{M})^{-(2\tau-1)}$$

Отсюда и из (39) следует, что

$$P_3(n) \leq C_{29} N^2 (\mathcal{M})^{-2\tau-1} = o(N n^{-(\tau+1)}),$$

и из (6), (27), (38) получаем утверждение леммы 2.

Для суммы  $\zeta_N^{(r)}$  справедлив следующий результат.



**Лемма 3.** Пусть  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $n / N^{1/\tau} \rightarrow \infty$ ,  $r = n - zN^{1/\tau}$ , где  $z$  – фиксированное положительное число. Тогда

$$\mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\} = (1 + o(1)) z N n^{-(\tau+1)} \int_z^\infty g(x) dx,$$

где  $g(x)$  – плотность устойчивого распределения с показателем  $\tau$  и характеристической функцией (2).

*Доказательство.* Мы будем следовать методу доказательства леммы 2. Все введенные там обозначения сохраняют силу и далее, а случайные величины  $\zeta_N$  и  $\xi_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , естественным образом заменяются на  $\zeta_N^{(r)}$  и  $\xi_i^{(r)}$  соответственно. Представим вероятность  $\mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\}$  в виде суммы, аналогичной (6):

$$\mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\} = P_1(n) + NP_2(n) + P_3(n). \quad (40)$$

Для оценки  $P_1(n)$  нетрудно получить неравенства, подобные (9):

$$\sum_{k \leq l} \mathbb{P}\{\xi_1^{(r)} = k\} \leq C_1 l^{1-\tau}, \quad \sum_{k > l} \mathbb{P}\{\xi_1^{(r)} = k\} \leq C_2 l^{-\tau}. \quad (41)$$

Используя эти соотношения, легко находим, как и в (12), что

$$R(1/(\mathcal{M})) = 1 + o(N^{-1}). \quad (42)$$

Опять вводятся вспомогательные независимые одинаково распределенные случайные величины  $\xi_i^{(r)}(\gamma), \dots, \xi_N^{(r)}(\gamma)$ , для которых

$$\mathbb{P}\{\xi_i^{(r)}(\gamma) = k\} = \exp\{k / (\mathcal{M})\} \mathbb{P}\{\xi_i^{(r)} = k\} R^{-1}(1/(\mathcal{M})), \quad k \leq \mathcal{M}.$$

Легко видеть, что

$$P_1(n) = R^N(1/(\mathcal{M})) \exp\{-1/\gamma\} \mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)}(\gamma) = n\}, \quad (43)$$

где  $\zeta_N^{(r)}(\gamma) = \xi_1^{(r)}(\gamma) + \dots + \xi_N^{(r)}(\gamma)$ .

Обозначим  $\varphi_{\gamma,r}(t)$  характеристическую функцию случайной величины  $\xi_1^{(r)}(\gamma)$  и представим вероятность  $\mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)}(\gamma) = n\}$  по формуле обращения

$$\mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)}(\gamma) = n\} = \frac{1}{2\pi N^{1/\tau}} \times \quad (44)$$

$$\int_{-\pi N^{1/\tau}}^{\pi N^{1/\tau}} \exp\left\{-\frac{itn}{N^{1/\tau}}\right\} \left(\varphi_{\gamma,r}\left(\frac{t}{N^{1/\tau}}\right)\right)^N dt.$$

Рассматривая выражение

$$|\varphi_{\gamma,r}(t)|^N = \left| \frac{R(it + 1/(\mathcal{M}))^N}{R(1/\mathcal{M})} \right|^N$$

и используя (41), нетрудно получить, аналогично (17) – (24), что при любом фиксированном  $t$

$$|\varphi_{\gamma,r}(t)|^N \leq C_3 |\varphi_r(t)|^N \quad (45)$$

и, кроме того,

$$\varphi_r(t) = \varphi(t) + o(N^{-1}). \quad (46)$$

При доказательстве леммы 2 мы видели, что если  $|t| < \varepsilon$ , то выполняется неравенство (25), а если  $\varepsilon \leq |t| \leq \pi$ , то (26). Используя эти оценки и разбивая интеграл, стоящий в правой части равенства (43), на сумму двух интегралов, соответствующих указанным областям изменения переменной  $t$ , получим из (45), (46), что

$$\mathbb{P}\{\zeta_N^{(r)}(\gamma) = n\} \leq C_4 N^{1/\tau}.$$

Отсюда и из (5), (42), (43) приходим к соотношению

$$P_1(n) \leq C_5 N^{-1} e^{-1/\gamma} = o(N n^{-(\tau+1)}). \quad (47)$$

Оценим  $P_2(n)$ . Обозначим

$\xi_1^{(r)}(\mathcal{M}), \dots, \xi_N^{(r)}(\mathcal{M})$  вспомогательные независимые одинаково распределенные случайные величины, для которых

$$\mathbb{P}\{\xi_1^{(r)}(\mathcal{M}) = k\} = \mathbb{P}\{\xi_1^{(r)} = k \mid \xi_1^{(r)} \leq \mathcal{M}\}.$$

Обозначим также

$$\zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) = \xi_1^{(r)}(\mathcal{M}) + \dots + \xi_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}).$$

$$\mathbb{P}\{\xi_1^{(r)} + \dots + \xi_{N-1}^{(r)} = k, \quad \xi_i^{(r)} \leq \mathcal{M}, \quad i = 1, \dots, N-1\} =$$

$$\mathbb{P}^{N-1}\{\xi_i^{(r)} \leq \mathcal{M}\} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) = k\}.$$

Отсюда и из (41) следует, что в условиях леммы

$$P_2(n) = (1 + o(1)) \times$$

$$\sum_{n-r \leq k \leq n-\gamma n} \mathbb{P}\{\xi_N^{(r)} = n-k\} \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) = k\}. \quad (48)$$

Обозначим функцию распределения случайной величины  $\xi_1$  через  $F(x)$ . Из (1) следует, что при  $x \rightarrow \infty$

$$F(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ 1 - x^{-\tau} + o(x^{-\tau}), & x > 0. \end{cases} \quad (49)$$

Согласно теореме 2.6.1 книги [Ибрагимов, Линник, 1965] условия (49) достаточно для того, чтобы  $F(x)$  принадлежала области притяжения устойчивого закона с показателем  $\tau$ , а в силу теоремы 2.1.1 этой же книги получаем, что такой закон является предельным для случайной величины  $\zeta_{N-1} / N^{1/\tau}$ . Используя теорему 2.2.2 [Ибрагимов, Линник, 1965], нетрудно найти, что

$$\ln \varphi(t) = -\Gamma(1-\tau) |t|^\tau \left( 1 - i \frac{t}{|t|} \operatorname{tg} \frac{\pi\tau}{2} \right) \cos \frac{\pi\tau}{2},$$

откуда

$$\left( \varphi\left(\frac{t}{N^{1/\tau}}\right) \right)^{N-1} \rightarrow \quad (50)$$

$$\exp\left\{-\Gamma(1-\tau) |t|^\tau \left( 1 - i \frac{t}{|t|} \operatorname{tg} \frac{\pi\tau}{2} \right) \cos \frac{\pi\tau}{2}\right\}.$$

Учитывая (41), получаем оценку, аналогичную (30):

$$\mathbb{P}\{\zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} \leq C_6\gamma^\tau. \quad (51)$$

Если  $k \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}$ , то, учитывая (34) и следуя доказательству соотношения (35), получаем, что

$$S_1 = \mathfrak{n}^{-(\tau+1)} \mathbb{P}\{n-r \leq \zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} \times (1+o(1)). \quad (52)$$

Для вычисления вероятности  $\mathbb{P}\{n-r \leq \zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) \leq \gamma^{-1}N^{1/\tau}\}$  введем  $\varphi_{m,r}(t)$  – характеристическую функцию случайной величины  $\xi_1^{(r)}(\mathcal{M})$ :

$$\varphi_{m,r}(t) = \sum_{k \leq m} e^{ikt} \mathbb{P}\{\xi_1^{(r)}(\mathcal{M}) = k\} = (1 - \mathbb{P}\{\xi_1^{(r)} > m\})^{-1} \left( \varphi_r(t) - \sum_{k > m} e^{ikt} \mathbb{P}\{\xi_1^{(r)} = k\} \right).$$

Используя (41) и (46), получаем в итоге, что  $|\varphi_{m,r}(t)|^{N-1} = |\varphi(t)|^{N-1} (1+o(1))$ .

Отсюда и из (5), (50), (51) следует, что при любом фиксированном  $y$

$$\mathbb{P}\{N^{-1/\tau} \zeta_{N-1}^{(r)} \leq y\} \rightarrow \int_{-\infty}^y g(x) dx. \quad (53)$$

Учитывая (50) и равенство  $r = n - zN^{1/\tau}$ , из (52) и (53) находим, что

$$S_1 = (1+o(1)) \mathfrak{n}^{-(\tau+1)} \int_z^\infty g(x) dx. \quad (54)$$

Если  $k \in K_2$ , то, используя (51), получаем, что

$$S_2 \leq C_7(\gamma^\tau n) \mathbb{P}\{\zeta_{N-1}^{(r)}(\mathcal{M}) > \gamma^{-1}N^{1/\tau}\} = o(n^{-(\tau+1)}). \quad (55)$$

Если  $k \in K_3$ , то, как и в лемме 2, видим, что  $S_3 = o(n^{-(\tau+1)})$ , поэтому из (34), (48), (54), (55) следует, что

$$P_2(n) = (1+o(1)) \mathfrak{n}^{-(\tau+1)} \int_z^\infty g(x) dx. \quad (56)$$

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

##### Павлов Юрий Леонидович

зав. лаб. теории вероятностей и компьютерной статистики, д. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия, Россия, 185910  
эл. почта: pavlov@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 763370

##### Дертишников Екатерина Николаевна

аспирант  
Институт социально-экономического развития территорий ул. Комсомольская, 23, Вологда, Россия, 160014  
эл. почта: Katya-dert@mail.ru  
тел.: 89217021153

Оценка  $P_3(n)$  проводится аналогично соответствующему доказательству в лемме 2, поэтому из (40), (47) и (56) получаем утверждение леммы 3.

Теперь мы можем доказать теорему. Из (9) следует, что  $P_r \leq C_7 r^{-\tau} = o(N^{-1})$ , поэтому из лемм 1 – 3 очевидным образом получаем требуемое.

#### Литература

- Ибрагимов И. А., Линник Ю. В. Независимые и стационарно связанные величины. М.: Наука, 1965. 524 с.
- Колчин В. Ф. Случайные графы. М.: Физматлит, 2004. 256 с.
- Павлов Ю. Л. Предельное распределение объема гигантской компоненты в случайном графе Интернет-типа // Дискретная математика. 2007. Т. 19, № 3. С. 22–34.
- Павлов Ю. Л. О предельных распределениях степеней вершин в условных Интернет-графах // Дискретная математика. 2009. Т. 21, № 3. С. 14–23.
- Павлов Ю. Л., Чеплюкова И. А. Случайные графы Интернет-типа и обобщенная схема размещения // Дискретная математика. 2008. Т. 20, № 3. С. 3–18.
- Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981. 798 с.
- Ткачук С. Г. Локальные предельные теоремы, учитывающие большие отклонения в случае предельных устойчивых законов // Известия АН Узб. ССР. Сер. физ.-мат. наук. 1973. Т. 2. С. 30–33.
- Durrett R. Random Graph Dynamics. N.Y.: Cambridge University Press, 2007. 221 p.
- Flajolet P., Sedgewick R. Analytic Combinatorics. Cambridge: Cambridge University Press. 2009. 824 p.
- Janson S., Luczak T., Rucinski A. Random Graphs. Wiley, New York, 2000. 333 с.
- Pavlov Yu. L. Random Forests. Utrecht: VPS, 2000. 122 p.
- Reittu H., Norros I. On the power-law random graph model of massive data networks // Performance Evaluation. 2004. Vol. 55, N 1. P. 3–23.

##### Pavlov, Yury

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: pavlov@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 763370

##### Dertishnikova, Ekaterina

Institute for Socioeconomic Development  
23 Komsomolskaya St., 160014 Vologda, Russia  
e-mail: Katya-dert@mail.ru  
tel.: 89217021

УДК 519.2

## ОБ АСИМПТОТИКЕ СТАТИСТИКИ ТИПА $\chi^2$ ДЛЯ ИНТЕРНЕТ-ГРАФОВ

Ю. Л. Павлов, И. А. Чеплюкова

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

Рассматриваются Интернет-графы, состоящие из  $N$  вершин при условии, что сумма степеней вершин равна  $n$ . Получено предельное распределение статистики типа  $\chi^2$  для таких графов в случае, когда  $N, n \rightarrow \infty$ ,  $1 < C \leq n/N < \zeta(\tau)$ ,  $\tau > 0$ , где  $\zeta(\tau)$  – значение дзета-функции Римана в точке  $\tau$ .

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** случайные графы, Интернет, статистика типа  $\chi^2$ , предельное распределение.

### Yu. L. Pavlov, I. A. Cheplyukova. ON ASYMPTOTICS OF $\chi^2$ - TYPE STATISTICS IN CONDITIONAL RANDOM INTERNET GRAPHS

We consider random Internet graphs consisting of  $N$  vertices under the condition that the sum of vertex degrees is equal to  $n$ . We get the limit distribution of  $\chi^2$  type statistic for these graphs such that  $N, n \rightarrow \infty$ ,  $1 < C \leq n/N < \zeta(\tau)$ ,  $\tau > 0$ , where  $\zeta(\tau)$  is the Riemann's zeta-function.

**К e y w o r d s :** random graphs, Internet,  $\chi^2$  type statistic, limit distribution.

---

Для связанной с критерием согласия  $\chi^2$  полиномиальной схемы хорошо известно асимптотическое поведение соответствующей статистики. Однако во многих комбинаторных задачах, отличающихся от полиномиальной схемы, при проверке статистических гипотез также возникает необходимость получения подобных результатов. В настоящей работе рассматривается одна из таких задач. Объектом исследования яв-

ляется известная конструкция случайного графа (см., например, [Faloutsos et al., 1999; Jason et al., 2000; Newman et al., 2001; Reittu, Norros, 2004]), являющаяся подходящей моделью сети Интернет. В связи с этим такие модели иногда называют Интернет-графами. Опишем этот граф. Предполагается, что граф состоит из  $N$  основных и одной вспомогательной вершин. Степени основных вершин, занумерованных числами от

1 до  $N$ , задаются независимыми случайными величинами  $\eta_1, \dots, \eta_N$ , распределение которых имеет вид

$$\mathbf{P}\{\eta_i \geq k\} = k^{-\tau_i}, \quad (1)$$

$$i = 1, \dots, N, \quad k = 1, 2, \dots,$$

где  $\tau_i$  – некоторые положительные параметры.

Для описания структуры графа будем использовать понятие полуребра [Reittu, Norgos, 2004], т. е. ребра, инцидентного конкретной вершине, но для которой смежная вершина еще не определена. Чтобы суммарное число полуребер было четным, степень вспомогательной вершины полагается равной 1 или 0, в зависимости от того, является ли число полуребер основных вершин четным или нет. Предполагается, что все полуребра различны и при образовании ребер полуребра соединяются равновероятно.

Во многих работах изучалось предельное поведение различных характеристик Интернет-графов. В работе [Faloutsos et al., 1999] было показано, что на практике, как правило, параметры распределения  $\tau_1, \dots, \tau_N$  одинаковы и принадлежат интервалу (1,2). В работах [Cheplyukova, Pavlov, 2007; Павлов, Чеплюкова, 2008] впервые было предложено использовать обобщенную схему размещения частиц по ячейкам с целью исследования асимптотического поведения Интернет-графов. Эта схема была введена и изучена В. Ф. Колчиным (см., например, [Колчин, 2004]).

В настоящей работе мы рассматриваем подмножество Интернет-графов при условии, что сумма степеней основных вершин задана и равна  $n$ , т. е.

$$\eta_1 + \dots + \eta_N = n.$$

В качестве нулевой статистической гипотезы будем рассматривать гипотезу о том, что параметры распределения (1)

$$\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N = \tau.$$

Для проверки этой гипотезы кажется естественным использовать статистику типа  $\chi^2$  следующего вида

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(\eta_i - n/N)^2}{n/N}. \quad (2)$$

Введем независимые одинаково распределенные случайные величины  $\xi_1, \dots, \xi_N$ , распределение которых имеет вид

$$\mathbf{P}\{\xi_1 = k\} = \frac{\lambda^k}{1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1)} \left( \frac{1}{k^\tau} - \frac{1}{(k+1)^\tau} \right), \quad (3)$$

где  $k = 1, 2, \dots$ ;  $\Phi(x, s, a)$  означает трансцендентную функцию Лерча:

$$\Phi(x, s, a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{(k+a)^s}, \quad a > 0, \quad (4)$$

а параметр распределения  $\lambda$  выбран из интервала (0,1) так, что выполнено равенство

$$\frac{\Phi(\lambda, \tau, 1) - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 1, 1)}{1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1)} = \frac{n}{N}. \quad (5)$$

Нетрудно проверить, что уравнение (5) имеет единственное решение на интервале (0,1).

Пусть

$$v_i = \xi_i (\xi_i - 1)/2, \quad i = 1, \dots, N;$$

$$a = \mathbf{E} v_1, \quad \sigma^2 = \mathbf{D} v_1,$$

$$\rho = \text{cov}(v_1, \xi_1) / \sqrt{\mathbf{D} v_1 \mathbf{D} \xi_1}.$$

Ниже приведена локальная предельная теорема для статистики (2) в случае  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $1 < C_1 \leq n/N < \zeta(\tau)$ , где  $\zeta(\tau)$  – значение дзета-функции Римана в точке  $\tau$ . Заметим, что слабая сходимость распределения статистики (2) к нормальному закону следует из результатов работы [Ронжин, 1988]. Содержание данной статьи докладывалось на следующих конференциях: Barcelona Conference on Asymptotic Statistics (2008) [Cheplyukova, Pavlov, 2008], X Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике (2009) [Чеплюкова, 2009], 9<sup>th</sup> International Conference «Computer Data Analysis and Modeling: Complex Stochastic Data and Systems» (2010), формулировки утверждений приведены в трудах этих конференций. В настоящей работе эти результаты обобщаются в виде приведенной ниже теоремы и дается ее подробное доказательство.

Далее будем считать, что при  $n/N \rightarrow \zeta(\tau)$  выполнено одно из условий:

- 1)  $\tau > 6$ ;
- 2)  $\tau = 6$ ;  $\sqrt{N}/|\ln(1 - \lambda)| \rightarrow \infty$ ;
- 3)  $4 < \tau < 6$ ;  $\sqrt{N}(1 - \lambda)^{6-\tau} \rightarrow \infty$ ;
- 4)  $\tau = 4$ ;  $\sqrt{N}(1 - \lambda)^2 |\ln^3(1 - \lambda)| \rightarrow \infty$ ;
- 5)  $0 < \tau < 4$ ;  $N(1 - \lambda)^\tau \rightarrow \infty$ .

**Теорема.** Пусть  $N, n \rightarrow \infty$  так, что  $1 < C \leq n/N < \zeta(\tau)$ . Тогда равномерно относительно целых  $k$  таких, что

$(k - Na)/(\sigma\sqrt{N(1 - \rho^2)})$  лежит в любом конечном фиксированном интервале, справедливо

$$\mathbf{P}\left\{\chi^2 = \frac{2Nk}{n} + N - n\right\} = \frac{1 + o(1)}{\sigma\sqrt{2\pi N(1 - \rho^2)}} \exp\left\{-\frac{(k - Na)^2}{2N\sigma^2(1 - \rho^2)}\right\}.$$

Эта теорема будет доказана с помощью приведенных ниже лемм 1 – 3.

**Лемма 1.** Справедливо равенство

$$\mathbf{P}\left\{\chi^2 = \frac{2Nk}{n} + N - n\right\} = \frac{\mathbf{P}\{\zeta_N = n, \mu_N = k\}}{\mathbf{P}\{\zeta_N = n\}}, \quad (6)$$

где

$$\zeta_N = \xi_1 + \dots + \xi_N, \quad \mu_N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \xi_i (\xi_i - 1).$$

*Доказательство.* Учитывая равенство  $\eta_1 + \dots + \eta_N = n$ , из (2) легко получить, что

$$\mathbf{P}\left\{\chi^2 = \frac{2Nk}{n} + N - n\right\} = \mathbf{P}\left\{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \eta_i (\eta_i - 1) = k\right\}. \quad (7)$$

Из (1), (3) и (4) несложно показать, что для рассматриваемого множества условных графов справедливо равенство

$$\mathbf{P}\{\eta_1 = k_1, \dots, \eta_N = k_N\} = \mathbf{P}\{\xi_1 = k_1, \dots, \xi_N = k_N | \xi_1 + \dots + \xi_N = n\} \quad (8)$$

Это равенство означает, что выполнены условия обобщенной схемы размещения ([Колчин, 2004]). Из (7) и (8) нетрудно получить утверждение леммы 1.

Легко видеть, что суммы случайных величин, стоящие в правой части равенства (6), образуют схему серий, поэтому задача получения предельного распределения статистики (2) сводится к доказательству локальных предельных теорем для случайной величины  $\zeta_N$  и случайного вектора  $(\zeta_N, \mu_N)$ .

Введем следующие обозначения:  $\bar{X}_i = (\xi_i, \nu_i), \quad i = 1, \dots, N,$

$$S_N = (\bar{X}_1 + \dots + \bar{X}_N) = (\zeta_N, \mu_N),$$

$$A_N = \mathbf{E}S_N, \quad \sigma_1^2 = \mathbf{D}\xi_1,$$

$$Q_N = \begin{pmatrix} 1/(\sigma_1\sqrt{N}) & 0 \\ 0 & 1/(\sigma\sqrt{N}) \end{pmatrix},$$

$$\Sigma = \frac{1}{1 - \rho^2} \begin{pmatrix} 1 & -\rho \\ -\rho & 1 \end{pmatrix}.$$

**Лемма 2.** Пусть выполнены условия теоремы. Тогда последовательность распределений  $(S_N - A_N)Q_N$  слабо сходится к двумерному нормальному закону с плотностью

$$g(\bar{x}) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1 - \rho^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\bar{x}\Sigma\bar{x}^{-T}\right\}, \quad (9)$$

где  $\bar{x} = (x_1, x_2) \in \mathbf{R}^2$ .

*Доказательство.* Для справедливости утверждения леммы достаточно показать, что в каждой точке  $(t_1, t_2)$  выполнено равенство

$$\varphi(t_1, t_2) = \exp\left\{-\frac{1}{2}(t_1^2 + t_2^2 + 2\rho t_1 t_2)\right\} (1 + o(1)), \quad (10)$$

где  $\varphi(t_1, t_2)$  обозначает характеристическую функцию случайной величины  $(S_N - A_N)Q_N$ . Обозначим через  $f(t_1, t_2)$  характеристическую функцию случайного вектора  $(\xi_1 - \mathbf{E}\xi_1, \nu_1 - \mathbf{E}\nu_1)$ . Используя формулу Тейлора, получаем, что при достаточно малых  $t_1$  и  $t_2$

$$f(t_1, t_2) = 1 - (t_1\sigma_1)^2/2 - (t_2\sigma)^2/2 - t_1 t_2 \text{cov}(\xi_1, \nu_1) + r(t_1, t_2), \quad (11)$$

где

$$|r(t_1, t_2)| \leq C_1(|t_1|^3(\mathbf{E}\xi_1^3 + \mathbf{E}^3\xi_1) + |t_2|^3(\mathbf{E}\nu_1^3 + \mathbf{E}^3\nu_1)),$$

здесь и далее  $C_1, C_2, \dots$  означают некоторые положительные постоянные.

Из (3) несложно найти, что

$$\mathbf{E}\xi_1 = \frac{\Phi(\lambda, \tau, 1) - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 1, 1)}{1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1)};$$

$$\mathbf{E}\nu_1 = ((3 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 1, 1) - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 2, 1) - 2\Phi(\lambda, \tau, 1))(2(1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1)))^{-1};$$

$$\sigma_1^2 = (2\Phi(\lambda, \tau - 1, 1) - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 2, 1) - \Phi(\lambda, \tau, 1))(1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1))^{-1} - \mathbf{E}^2\xi_1;$$

$$\sigma^2 = ((1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 4, 1)/2 +$$

$$(3 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 3, 1) - \frac{1}{2}(13 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau - 2, 1) + \quad (12)$$

$$6\Phi(\lambda, \tau - 1, 1) - 2\Phi(\lambda, \tau, 1)) \times$$

$$(2(1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1)))^{-1} - \mathbf{E}^2\nu_1;$$

$$\mathbf{E}\xi_1^3 = ((\lambda - 1)\Phi(\lambda, \tau - 3, 1) +$$

$$3(\Phi(\lambda, \tau - 2, 1) - \Phi(\lambda, \tau - 1, 1)) + \Phi(\lambda, \tau, 1)) \times$$

$$(1 - (1 - \lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1))^{-1};$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \nu_1^3 &= ((\lambda-1)\Phi(\lambda, \tau-6, 1) + \\ & (9-3\lambda)\Phi(\lambda, \tau-5, 1) + (3\lambda-33)\Phi(\lambda, \tau-4, 1) + \\ & (63-\lambda)\Phi(\lambda, \tau-3, 1) - 66\Phi(\lambda, \tau-2, 1) + \\ & 36\Phi(\lambda, \tau-1, 1) - 8\Phi(\lambda, \tau, 1)) \times \\ & (8(1-(1-\lambda)\Phi(\lambda, \tau, 1)))^{-1}. \end{aligned}$$

Используя (3) и (5), легко показать, что  $\sigma_1 \geq C_2$ ,  $\sigma \geq C_3$ . Поэтому из соотношения

$$\varphi(t_1, t_2) = f^N(t_1/(\sigma_1\sqrt{N}), t_2/(\sigma\sqrt{N}))$$

находим, что

$$\begin{aligned} \ln \varphi(t_1, t_2) &= N \ln \left( 1 - \frac{t_1^2}{2N} - \frac{\rho t_1 t_2}{N} - \frac{t_2^2}{2N} + \right. \\ & \left. r \left( \frac{t_1}{\sigma_1\sqrt{N}}, \frac{t_2}{\sigma\sqrt{N}} \right) \right), \end{aligned} \quad (13)$$

где, как следует из (11),

$$\left| r \left( \frac{t_1}{\sigma_1\sqrt{N}}, \frac{t_2}{\sigma\sqrt{N}} \right) \right| \leq C_4 (|t_1|^3 E + |t_2|^3 F),$$

$$E = \frac{\mathbf{E} \xi_1^3 + \mathbf{E}^3 \xi_1}{(\sigma_1\sqrt{N})^3}; \quad F = \frac{\mathbf{E} \nu_1^3 + \mathbf{E}^3 \nu_1}{(\sigma\sqrt{N})^3}. \quad (14)$$

В лемме 3 [Павлов, Чеплюкова, 2008] показано, что в случае  $0 < C \leq n/N \leq C_5 < \zeta(\tau)$  справедливы неравенства  $C_6 \leq \lambda \leq C_7 < 1$ , поэтому из соотношений (12) следует, что  $E, F = O(N^{-3/2})$ , значит  $r = o(N^{-1})$ . Отсюда и из (13) видно, что в этом случае имеет место равенство (10).

Из леммы 3 [Павлов, Чеплюкова, 2008] следует, что  $\lambda \rightarrow 1$  при  $n/N \rightarrow \zeta(\tau)$ . При  $s < 1$  для функции Лерча  $\Phi(z, s, 1)$  справедливы соотношения (см., например, [Flajolet, Sedgewick, 2009]):  $\Phi(z, 1, 1) = -z^{-1} \ln(1-z)$ ;  $\Phi(z, 0, 1) = (1-z)^{-1}$ ;

при  $s < 1, z \rightarrow 1$

$$\Phi(z, s, 1) = \Gamma(1-s)(-\ln z)^{s-1}(1+o(1)), \quad (15)$$

где  $\Gamma(x)$  – значение гамма-функции в точке  $x$ . Тогда, используя (12) и (15), несложно показать, что

$$\mathbf{E} \nu_1 = \begin{cases} O(1) & \tau > 2; \\ O(\ln(1-\lambda)) & \tau = 2; \\ O((1-\lambda)^{\tau-2}) & 0 < \tau < 2. \end{cases}$$

$$\mathbf{E} \nu_1^3 = \begin{cases} O(1), & \tau > 6; \\ O(\ln(1-\lambda)), & \tau = 6; \\ O((1-\lambda)^{\tau-6}), & 0 < \tau < 6. \end{cases} \quad (16)$$

$$\sigma^2 \asymp \begin{cases} 1, & \tau > 2; \\ |\ln(1-\lambda)|, & \tau = 2; \\ (1-\lambda)^{\tau-4}, & 0 < \tau < 2, \end{cases}$$

где запись  $f \asymp g$  означает, как и в [Грэхем и др., 2006], что выполнены одновременно два неравенства  $|f| \leq C_8|g|$  и  $|g| \leq C_9|f|$ . Тогда из (14) и (16) получаем, что

$$F = \begin{cases} O(N^{-3/2}), & \tau > 6; \\ O(N^{-3/2} \ln(1-\lambda)), & \tau = 6; \\ O(N^{-3/2} (1-\lambda)^{\tau-6}), & 4 < \tau < 6; \\ O\left(\frac{(1-\lambda)^{-2}}{(\ln(1-\lambda)\sqrt{N})^3}\right), & \tau = 4; \\ O(N^{-3/2} (1-\lambda)^{-\tau/2}), & 0 < \tau < 4. \end{cases} \quad (17)$$

Аналогичным образом нетрудно показать, что

$$E = \begin{cases} O(N^{-3/2}), & \tau > 3; \\ O(N^{-3/2} \ln(1-\lambda)), & \tau = 3; \\ O(N^{-3/2} (1-\lambda)^{\tau-3}), & 2 < \tau < 3; \\ O\left(\frac{(1-\lambda)^{-1}}{(N \ln(1-\lambda))^{3/2}}\right), & \tau = 2; \\ O(N^{-3/2} (1-\lambda)^{-\tau/2}), & 0 < \tau < 2. \end{cases} \quad (18)$$

Из (17) и (18) следует, что  $r = o(N^{-1})$  и в случае  $n/N \rightarrow \zeta(\tau)$ , поэтому из (13) опять получаем соотношение (10), что и завершает доказательство леммы.

Лемма 2 показывает, что распределение статистики (2) слабо сходится к нормальному закону. Докажем, что имеет место локальная сходимость.

**Лемма 3.** Пусть выполнены условия теоремы. Тогда равномерно по  $\bar{z} = (z_1, z_2)$

$$\mathbf{P}\{S_N = \bar{z}\} = \det Q_N \left[ g(\bar{z} - A_N) Q_N \right] + o(1),$$

где  $g(\bar{x})$  определено в (9).

*Доказательство.* Пусть  $\langle \alpha \rangle$  обозначает расстояние от  $\alpha \in \mathbf{R}$  до ближайшего целого числа,  $\Omega(1/2, 1/4) =$

$$\{\bar{d} = (d_1, d_2) \in \mathbf{R}^2 : |d_1|, |d_2| \leq 1/2, |\bar{d}| > 1/4\}$$

Для двумерной случайной величины  $\bar{X}$  и вектора  $\bar{d}$  обозначим

$$H(\bar{X}, \bar{d}) = \mathbf{E} \left\langle \left( \bar{X}^*, \bar{d} \right) \right\rangle^2,$$

где  $\left( \bar{X}^*, \bar{d} \right)$  – скалярное произведение векторов  $\bar{X}^*$  и  $\bar{d}$ , случайная величина  $\bar{X}^*$  получена из  $\bar{X}$  путем симметризации. Пусть также

$$H_N(\bar{d}) = \sum_{i=1}^N H(\bar{X}_i, \bar{d}) = N \mathbf{E} \left\langle \left( \bar{X}^*, \bar{d} \right) \right\rangle^2, \quad (19)$$

$$H_N = \inf_{d \in \Omega(1/2, 1/4)} H_N(\bar{d}).$$

Поскольку  $\bar{X}^* = (\xi_1 - \xi_2, \nu_1 - \nu_2)$ , нетрудно показать, что

$$H_N(\bar{d}) = N \sum_{k,l} \left\langle (k-l)d_1 + \frac{(k-l)(k+l-1)}{2} d_2 \right\rangle^2 \times$$

$$\mathbf{P}\{\xi_1 = k\} \mathbf{P}\{\xi_2 = l\}.$$

Из (16) видно, что

$$\left| Q_N^{-1} \bar{d} \right|^2 = \sigma_1^2 N d_1^2 + \sigma_2^2 N d_2^2 =$$

$$\begin{cases} N, & \text{если } 0 < C \leq n/N \leq C_5 < \zeta(\tau) \\ & \text{или } n/N \rightarrow \zeta(\tau), \tau > 4; \\ N |\ln(1-\lambda)|, & \text{если } n/N \rightarrow \zeta(\tau), \tau = 4; \\ N(1-\lambda)^{\tau-4}, & \text{если } n/N \rightarrow \zeta(\tau), 0 < \tau < 4, \end{cases} \quad (20)$$

а для всех  $\bar{d} \in \Omega(1/2, 1/4)$  справедливо

$$H_N(\bar{d}) \geq C_{10} N \left( \langle (d_1 + d_2) \rangle^2 + \langle (2d_1 + 3d_2) \rangle^2 \right) \quad (21)$$

Отсюда, из (20) и леммы 2 следует, что в случаях, когда  $0 < C \leq n/N \leq C_5 < \zeta(\tau)$  и  $n/N \rightarrow \zeta(\tau), \tau > 4$ , выполнено условие 1 локальной предельной теоремы [Мухин, 1991] для двумерных случайных сумм в схеме серий, а именно, существует такое  $\alpha > 0$ , что

$$H_N(\bar{d}) \geq \alpha \left| Q_N^{-1} \bar{d} \right|^2,$$

поэтому в этих случаях утверждение леммы 3 справедливо.

Пусть  $n/N \rightarrow \zeta(\tau), \tau > 4$ . Проверим выполнение условия 2 указанной теоремы [Мухин, 1991]. Для этого достаточно показать, что  $H_N \rightarrow \infty$  и существуют такие  $\alpha > 0, \delta \in (0, 2], M > 0, \beta > 0, \nu \in (0, 1/2)$ , что

$$B_N^2(\bar{\theta}, u) \geq \alpha u^{2-\delta} \left| Q_N^{-1} \bar{\theta} \right|^\delta, \quad (22)$$

где

$$B_N^2(\bar{\theta}, u) = N \sum_{\left| \left( \bar{\theta}, \bar{X}_1 \right) \right| \leq u} \left( \bar{\theta}, \bar{X}_1 \right) \mathbf{P}^*,$$

а  $\mathbf{P}^*$  – симметризованное распределение  $\bar{X}^*$ ,

$$\bar{\theta} = (\theta_1, \theta_2), \left| \bar{\theta} \right| = 1, u \in \left[ M N^\nu, \beta \left| Q_N^{-1} \bar{\theta} \right| \right].$$

Нетрудно найти, что при  $\nu > 0$  справедливо соотношение

$$B_N^2(\bar{\theta}, u) = \quad (23)$$

$$N \sum_{\substack{k,l: \\ \left| \left( \bar{\theta}, \bar{X}_1 \right) \right| \leq u}} \left( \theta_1(k-l) + \theta_2 \left( \frac{k(k-1)}{2} - \frac{l(l-1)}{2} \right) \right)^2 \times$$

$$\mathbf{P}\{\xi_1 = k\} \mathbf{P}\{\xi_2 = l\} \geq$$

$$N \sum_{\substack{k: \\ \left| \left( \bar{\theta}, \bar{X}_1 \right) \right| \leq u}} \left( \theta_1(k-1) + \theta_2 \frac{k(k-1)}{2} \right)^2 \times$$

$$\mathbf{P}\{\xi_1 = k\} \mathbf{P}\{\xi_2 = 1\} \geq C_{12} N \sum_{\frac{1}{2} u \leq k \leq u} k^{3-\tau} \geq C_{12} N u^{4-\tau}.$$

Из (19) – (23) следует, что достаточно показать существование  $\nu$  и  $\delta$ , обеспечивающих выполнение неравенства

$$N^{1-\frac{\delta}{2}} u^{2-\tau+\delta} (1-\lambda)^{(4-\tau)\frac{\delta}{2}} \geq C_{13}. \quad (24)$$

В силу условия леммы  $N(1-\lambda)^\tau \rightarrow \infty$ , поэтому при достаточно малых  $\nu$  и  $\delta$  неравенство (24) выполнено и, следовательно, утверждение леммы 3 справедливо при  $0 < \tau < 4$ . Осталось рассмотреть случай  $\tau = 4$ . Аналогично предыдущему получаем, что

$$B_N^2(\bar{\theta}, u) \geq C_{14} N \ln u,$$

и, как нетрудно проверить, (22) справедливо и при  $\tau = 4$ , что завершает доказательство леммы 3.

Из результатов работ [Павлов, Чеплюкова, 2008] и [Павлов, 2009] следует, что в рассматриваемых условиях

$$\mathbf{P}\{\zeta_N = n\} = \left( \sigma_1 \sqrt{2\pi N} \right)^{-1} (1 + o(1)).$$

поэтому из лемм 1 и 3 получаем утверждение теоремы.

## Литература

- Грэхем Р., Кнут В., Паташник О. Конкретная математика / пер. с англ. М.: Мир, 2006. 703 с.  
 Колчин В. Ф. Случайные графы. М.: Физматлит, 2004. 256 с.  
 Мухин А. Б. Локальные предельные теоремы для решетчатых случайных вершин // Теория вероятностей и ее применения. 1991. Т. 36, № 4. С. 660 – 674.

Павлов Ю. Л. О предельных распределениях степеней вершин в условных Интернет-графах // Дискретная математика. 2009. Т. 21, № 3. С. 14–23.

Павлов Ю. Л., Чеплюкова И. А. Случайные графы Интернет-типа и обобщенная схема размещения // Дискретная математика. 2008. Т. 20, № 3. С. 3–18.

Ронжин А. Ф. Критерии согласия для обобщенных схем размещения частиц по ячейкам, основанные на разделимых статистиках // Теория вероятностей и ее применения. 1988. Т. 33, № 1. С. 94–104.

Чеплюкова И. А. Об асимптотике статистики типа  $\chi^2$  для условных случайных Интернет-графах // Обзорение прикладной и промышленной математики. 2009. Т. 16, № 4. С. 272.

Cheplyukova I. A., Pavlov Yu. L. Limit distributions of vertex degree in conditional power-law random graphs / Transactions of the XXVI International Seminar on Stability Problems for Stochastic Models (Karmiel, October 22–26 2007). Karmiel, 2007. P. 52–59.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

##### **Павлов Юрий Леонидович**

зав. лаб. теории вероятностей и компьютерной статистики,  
д. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: pavlov@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 763370

##### **Чеплюкова Ирина Александровна**

старший научный сотрудник, к. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: chia@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 763370

Cheplyukova I. A., Pavlov Yu. L. On asymptotics of a  $\chi^2$  - type statistics in conditional random Internet graphs / Barcelona Conference on Asymptotic Statistics (Bellatera // September 1–5 2008). Bellatera, 2008. P. 96.

Faloutsos C., Faloutsos P., Faloutsos M. On power-law relationships of the Internet topology // Computer communications Rev. 1999. Vol. 29. P. 251–252.

Flajolet P., Sedgewick R. Analytic combinatorics. Cambridge University Press. Cambridge, 2009. 826 p.

Jason S., Luzak T., Rucinski A. Random graphs. Wiley, New York, 2000. 333 p.

Newman M. E. Y., Strogatz S. H., Watts D. J. Random graphs with arbitrary degree distribution and their applications // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64, paper 026118.

Reittu H., Norros I. On the power-law random graph model of massive data networks // Performance Evaluation. 2004. Vol. 55, N 1. P. 3–23.

##### **Pavlov, Yury**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: pavlov@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 763370

##### **Cheplyukova, Irina**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: chia@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 763370



УДК 519.6 : 539.2

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА С ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

**Н. И. Родченкова, Ю. В. Заика**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

Рассматривается дегазация цилиндрического образца, содержащего растворенный водород. Эксперимент проводится методом термодесорбции. В соответствующей краевой задаче с нелинейными динамическими граничными условиями учтены физико-химические процессы в объеме и на поверхности металла: диффузия, десорбция, растворение и захват дефектами. На основе разностных аппроксимаций разработан вычислительный алгоритм моделирования десорбционного потока, приведены результаты численных экспериментов.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** термодесорбция водорода, математическое моделирование.

### **N. I. Rodchenkova, Yu. V. Zaika. NUMERICAL MODELLING OF HYDROGEN DESORPTION FROM CYLINDRICAL SURFACE**

Degassing of a cylindrical sample containing dissolved hydrogen is considered. The experiment is made by the thermodesorption method. In the corresponding boundary-value problem with nonlinear dynamic boundary conditions physical-chemical processes in the bulk and on the metal surface are taken into account: diffusion, desorption, capture by defects, and solution. Computational algorithm for desorption flux modelling is developed on the basis of difference approximations. The results of numerical modelling are presented. This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 09-01-00439) and by the Russian Science Support Foundation.

**Key words :** hydrogen thermodesorption, mathematical modelling.

---

### **Введение**

Значительная концентрация водорода в металле приводит к водородной хрупкости [Кунин и др., 1972; Колачев, 1985]. Естественные металлургические концентрации растворенного водорода составляют от 0,1 до 100 ppm. Для измерения концентрации водорода в твердой про-

бе в условиях заводской лаборатории авторами статьи [Полянский и др., 2006] разработан анализатор водорода (АВ-1). Цилиндрический образец помещается внутрь вакуумного экстрактора из кварцевого стекла. Экстрактор помещается в печь с заданной температурой экстракции. Контакт образца и стенок экстрактора точеч-

ный, теплопроводность кварца пренебрежимо мала, поэтому теплопередача происходит за счет излучения. При нагревании образца атомарный водород диффундирует внутри и десорбируется с поверхности в молекулярной форме. С помощью масс-спектрометрического анализатора водорода фиксируется экстракционная кривая, подлежащая дальнейшей обработке (в частности, оцениваются кинетические параметры моделей). График зависимости десорбционного потока от температуры при монотонном нагреве (ТДС-спектр) обычно содержит несколько пиков. Наряду с диффузией лимитирующими факторами являются поверхностные процессы (следует работе [Габис и др., 1987]) и захват атомов водорода различного рода дефектами (например, трещины, микрополости, включения гидридных фаз). Решение проблем водородного материаловедения, особенно это касается изотопов дейтерия и трития, требуют значительных затрат. Поэтому роль математического моделирования в таких задачах является достаточно весомой. Работа посвящена математическому обеспечению экспериментальных исследований. При численном моделировании десорбционного потока будем использовать параметры, характерные для алюминия и его сплавов.

### Математическая модель

Уравнение нагрева. Образец имеет форму цилиндра с характерными размерами (ГОСТ 21132.1-98): радиус основания  $L = 4 \cdot 10^{-3} \text{ м}$ , высота  $H = 2 \cdot 10^{-2} \text{ м}$ . Концентрация в начальный момент времени  $c(0, r, z) = \bar{c}$  постоянная (формируется в процессе изготовления материала). Без принципиальных изменений численного алгоритма при необходимости можно учесть снижение концентрации водорода в приповерхностном слое, например, в результате предварительной механической и термообработки. Если прогрев образца равномерный (достаточно медленный,  $T = T(t)$ ,  $[T] = K$ ), то динамику изменения температуры можно описать дифференциальным уравнением (ДУ) теплового баланса [Полянский и др., 2008]:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sigma S}{\tilde{c} \rho V} 7 \cdot 10^{-5} (T + 64.3) [T^4 - T_e^4].$$

$T_0 = T(0) = 293 \text{ К}$ . Здесь  $T_e = \text{const}$  – температура стенки экстрактора,  $S = 2\pi LH$ ,  $V = \pi L^2 H$  – площадь поверхности и объем ци-

линдра,  $\rho = 2,71 \cdot 10^3 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$  – объемная плотность,  $\tilde{c} = 1,15 \cdot 10^3 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{ К}^{-1}$  – удельная теплоемкость,  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Дж} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-2} \text{ К}^{-4}$  – постоянная Стефана-Больцмана.

Поскольку не при всех  $T_e$  предположение о равномерном прогреве справедливо с достаточной точностью, рассмотрим альтернативную распределенную модель. С учетом «трубчатой» геометрии экстрактора считаем, что нагрев идет в основном через боковую поверхность. Тем самым речь идет о нижней оценке динамики прогрева «центра» образца. Приведенное уравнение из [Полянский и др., 2008] является мажорантным сверху. Примем радиально симметричную модель:

$$\begin{aligned} T(0, r) &= T_0 < T_e, \quad r \in [0, L], \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \kappa \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \\ \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_L &= \alpha [T_e^4 - T^4(t, L)]. \end{aligned}$$

Здесь  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности (для алюминия в диапазоне  $T \in [300, 800]$   $\lambda \approx 236 \text{ Дж} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ );  $\kappa = \lambda(\tilde{c}\rho)^{-1}$  – теплопроводность; время окончания счета  $t^*$  определяется стационаром  $T(t, 0) \approx T_e$ ,  $t > t^*$ ;  $\alpha = \sigma \varepsilon_i$ ,  $\varepsilon_i = 7 \cdot 10^{-5} (T + 64,3)$  – коэффициент поглощения. Вспомогательная задача численного моделирования нагрева: оперативно оценивать, насколько распределение  $T(t, r)$  отличается от равномерного нагрева  $T(t)$  при заданных  $T_e$ ,  $L$ ,  $H$  и теплофизических характеристиках материала. Например, при  $T_0 = 293 \text{ К}$ ,  $T_e = 773 \text{ К}$  и указанных  $L$ ,  $H$  предположение о равномерности нагрева алюминиевого образца справедливо: разность  $T(t) - T(t, 0)$  не превышает сотой доли градуса. И это без учета в распределенной модели поглощения тепла торцами. Максимальная температура достигается через 2,2 часа, причем в пределах часа нагрев практически линейный. В дальнейшем считаем прогрев образца равномерным.

В качестве завышенной оценки рассмотрим случай, когда торцы прогреваются столь же интенсивно, как и боковая поверхность:  $S = 2\pi LH + 2\pi L^2$ . На рис. 1 приведены графики температуры: верхний – для ДУ с учетом прогрева всей поверхности, нижний (два совпадающих графика) – для ДУ с учетом прогрева только боковой поверхности и для краевой задачи теплопроводности в бесконечном цилиндре.

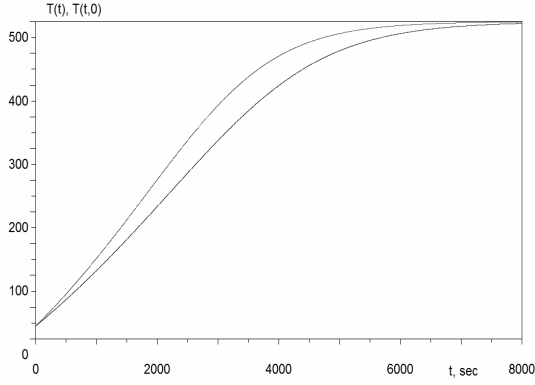


Рис. 1. Зависимость температуры образца от времени

Диффузионная модель с учетом дефектов.

Рассмотрим краевую задачу термодесорбции для цилиндра с учетом диффузии в объеме, захвата водорода дефектами, выхода из раствора на поверхность и десорбции:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(T) \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) - a_1 [1 - W] c(t, r, z) + a_2 w(t, r, z) + a_3 \gamma(t), \quad (1)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = a_1(T) [1 - W] c - a_2(T) w, \quad W \equiv w w_{\max}^{-1},$$

$$r \in (0, L), \quad z \in (0, H), \quad t \in (0, t_*), \quad (2)$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = -a_3 \gamma(t), \quad \gamma(t_{\text{crit}}) = \bar{\gamma} \Rightarrow \gamma(t) = \bar{\gamma} \exp\{-a_3(t - t_{\text{crit}})\}, \quad a_3 = 0, \quad T < T_{\text{crit}},$$

$$c(0, r, z) = \bar{c} = \text{const}, \quad w(0, r, z) = \bar{w} = \frac{a_1 \bar{c}}{a_2 + a_1 \bar{c} w_{\max}^{-1}}, \quad r \in [0, L], \quad z \in [0, H],$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=H/2} = 0, \quad D(t) \equiv D(T(t)),$$

$$b(t) \equiv b(T(t)), \quad g(t) \equiv g(T(t)),$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial t}(t, z) = -b(t) q_1^2(t, z) - D(t) \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r=L},$$

$$c(t, L, z) = g(t) q_1(t, z), \quad z \in [0, H], \quad (3)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t}(t, r) = -b(t) q_2^2(t, r) - D(t) \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=H},$$

$$c(t, r, H) = g(t) q_2(t, r), \quad r \in [0, L], \quad (4)$$

$$\frac{\partial q_3}{\partial t}(t, r) = -b(t) q_3^2(t, r) + D(t) \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=0},$$

$$c(t, r, 0) = g(t) q_3(t, r), \quad t \in [0, t_*],$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sigma S}{\bar{c} \rho V} 7 \cdot 10^{-5} (T(t) + 64.3) [T_e^4 - T^4],$$

$T(0) = T_0 = \text{const}$ . Здесь  $c(t, r, z)$  – концентрация атомарного водорода (Н) в металле;  $w(t, r, z)$  – концентрация Н, обратимо захваченного дефек-

тами физико-химической структуры материала (например, в микрополостях);  $w_{\max}$  – максимальная концентрация обратимого захвата;  $\gamma(t)$  – концентрация Н в ловушках, которые начинают высвобождать водород только по достижении некоторой критической температуры  $T_{\text{crit}}$  (характерно для включений гидридных фаз);  $a_i$  – коэффициенты поглощения и выделения Н ловушками ( $a_3 > 0$  при  $T \geq T_{\text{crit}}$ );  $q_1(t, z)$ ,  $q_2(t, r)$ ,  $q_3(t, r)$  – поверхностные концентрации (на боковой поверхности цилиндра и на торцах);  $\bar{c}$  – начальная (естественная) концентрация Н в твердой пробе;  $g$  – коэффициент соответствия концентраций атомов водорода в объеме и на поверхности (коэффициент быстрого растворения);  $D$ ,  $b$  – коэффициенты диффузии и десорбции. В рассматриваемом температурном диапазоне ( $T \in [300, 800]$ ) полагаем  $a_i > 0$  константами. Изменения для случая нестационарных  $a_i(t) \equiv a_i(T(t))$  не принципиальны. Для практических целей захват учтен в простейшей интегральной форме, уточнение геометрии дефектов и их распределения в образце существенно усложнило бы модель. Для упрощения выкладок учли по одной обобщенной ловушке обратимого захвата и распада. Их может быть несколько со своими индивидуальными  $a_i^{(j)}$  и  $T_{\text{crit}}^{(k)}$ . Считаем, что коэффициенты диффузии и десорбции зависят от температуры по закону Аррениуса:

$$D(T) = D_0 \exp\{-E_D / [RT]\},$$

$$b(T) = b_0 \exp\{-E_b / [RT]\},$$

$E_{D, b}$  – энергии активации. Сокращенно обозначаем  $D(t) = D(T(t))$ ,  $b(t) = b(T(t))$ . Отрезок времени  $[0, t_*]$  определяется дегазацией:  $J(t) \approx 0$ ,  $t \geq t_*$ . Условия  $c_r(t, +0, z) = 0$ ,  $c_z(t, r, H/2) = 0$  следуют из симметрии.

Более точная модель растворения на поверхности (для определенности боковой) имеет форму баланса потоков:

$$k^+(T) c(t, L, z) [1 - q_1(t, z) q_{\max}^{-1}] - k^-(T) q_1(t, z) \times [1 - c(t, L, z) c_{\max}^{-1}] = -D(T) c_r(t, L, z).$$

Но когда диффузия значительно медленнее растворения (температура не слишком низкая) и концентрации малы, получаем условие быстрой растворимости  $c \approx gq$ , где  $g = k^- / k^+$ . Если поверхность изотропна (в смысле  $E_{k^-} \approx E_{k^+}$ ), то

параметр  $g$  слабо зависит от  $T$ . В дальнейшем обозначение  $E_g$  используем условно: это не энергия активации, а разность  $E_{k^-} - E_{k^+}$ , которая может оказаться и отрицательной.

Что касается ловушек, активирующихся лишь с определенной критической температуры (типа гидридных фаз): учли лишь их емкость и скорость распада. Моделирование дегазирования – самостоятельная сложная задача, приводящая к нелинейным краевым задачам со свободными границами раздела фаз с условиями типа Стефана. Вариант с объемной десорбцией рассмотрен в [Zaika, Rodchenkova, 2008], с поверхностной – в [Zaika, Rodchenkova, 2009].

В силу симметрии начальных данных  $q_3 = q_2$ , и далее разностную аппроксимацию строим лишь для половины цилиндра ( $z \in [H/2, H]$ ) с соответствующими краевыми условиями ( $c_z|_{H/2} = 0$ ,  $\dot{q}_2 = \dots$ ). Для дефекта с обратимым захватом (микророль) константа  $\bar{w}$  определяется в силу (2)

$$(\partial/\partial t = 0): a_1(T_0)[1 - \bar{w}/w_{\max}] \bar{c} - a_2(T_0) \bar{w} = 0.$$

Для ловушки типа включения гидридной фазы значения  $\bar{\gamma} = \text{const}$ ,  $T_{\text{crit}}$ ,  $a_3$  задаются по информации о конкретном химическом составе гидрида. Наличие производных  $\dot{q}_i$  (накопления) соответствует представлениям о возможности миграции Н по поверхности до десорбции  $H_2$ .

Таким образом, модель нацелена на задачу анализа в целом динамики малых естественных концентраций водорода (без предварительного насыщения в лабораторных условиях). В прикладном контексте задачи основные процессы учтены минимальными математическими средствами. Дальнейшая детализация приводит к росту количества параметров. Обратная задача их оценки становится труднообозримой.

Уточнение постановки задачи. Цель работы состоит в разработке разностной схемы и вычислительного алгоритма для моделирования десорбционного потока водорода из цилиндрического образца:

$$J(t) = 4\pi b(t) \left( L \int_{H/2}^H q_1^2(t, z) dz + \int_0^L r q_2^2(t, r) dr \right).$$

Десорбируется  $H_2$ , но подсчет ведем в атомах ( $[J] = 1/c$ ). Критерием правильности вычислений выбран материальный баланс:

$$\begin{aligned} & \pi L^2 H (\bar{c} + \bar{w} + \bar{\gamma}) + \\ & + 4\pi \left( L \int_{H/2}^H q_1(0, z) dz + \int_0^L r q_2(0, r) dr \right) = \\ & = 4\pi \int_{H/2}^H dz \int_0^L r [c(t, r, z) + w(t, r, z) + \gamma(t)] dr + \\ & + 4\pi \left( L \int_{H/2}^H q_1(t, z) dz + \int_0^L r q_2(t, r) dr \right) + \int_0^t J(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

При монотонном нагреве удобно наряду с зависимостью от  $t$  рассматривать ТДС-спектр – график  $J = J(T)$ . Обычно он содержит несколько пиков. Считают, что первый пик соответствует поверхностному водороду. Но следует соблюдать осторожность: пока десорбируется поверхностный водород, идет подкачка Н из объема. Актуальна задача оценки соответствующей поправки. При моделировании время  $t_s$  окончания поверхностного водорода определяется из

$$\int_0^{t_s} J(\tau) d\tau \approx 4\pi \left( L \int_{H/2}^H q_1(0, z) dz + \int_0^L r q_2(0, r) dr \right).$$

Численное моделирование позволяет выделить на экстракционной кривой участок, соответствующий количеству начального поверхностного водорода, оценить значения энергий активации диффузии, десорбции, параметры обратимого захвата и распада гидридных фаз.

### Разностная аппроксимация краевой задачи

Следуя стандартной методике [Самарский, 1971], введем пространственную сетку

$$\Omega_h = \left\{ \begin{array}{l} (r_i, z_j): r_i = ih_r, \quad i = 0, 1, \dots, N_1 = [L/h_r]; \\ z_j = jh_z, \quad j = 0, 1, \dots, N_2 = [(H/2)/h_z] \end{array} \right\}$$

и сетку по времени

$$\omega_\tau = \{t_k = k\tau, \quad k = 0, 1, \dots, K = [t_s/\tau]\}.$$

Обозначим через  $c_{i,j}^k$  приближенные значения объемной концентрации  $c(t_k, r_i, z_j)$ . Аналогично  $w_{i,j}^k \approx w(t_k, r_i, z_j)$ ,  $\gamma^k \approx \gamma(t_k)$ ,  $a_s^k = a_s(t_k)$ ,  $D_k = D(t_k)$ , где  $(r_i, z_j) \in \Omega_h$ ,  $t_k \in \omega_\tau$ . Для уравнения (1) рассмотрим неявную разностную схему метода переменных направлений, называемую продольно-поперечной (схемой Писмена-Рэчфорда), а для уравнения (2) – схему с весами. Переход от слоя  $k$  к слою  $k+1$  осуществляется в два этапа. На первом этапе определяются промежуточные значения  $c_{i,j}^{k+1/2}$  из системы уравнений

$$\frac{c_{i,j}^{k+1/2} - c_{i,j}^k}{0,5\tau} = D_{k+1/2} \left( \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - 2c_{i,j}^{k+1/2} + c_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - c_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} \right) + D_k \frac{c_{i,j+1}^k - 2c_{i,j}^k + c_{i,j-1}^k}{h_z^2} - a_1^{k+1/2} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2} + a_2^{k+1/2} w_{i,j}^{k+1/2} + a_3 \gamma^{k+1/2}, \quad (5)$$

$$\frac{w_{i,j}^{k+1/2} - w_{i,j}^k}{0,5\tau} = (1 - \sigma) (a_1^k [1 - W_{i,j}^k] c_{i,j}^k - a_2^k w_{i,j}^k) + \sigma (a_1^{k+1/2} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2} - a_2^{k+1/2} w_{i,j}^{k+1/2}). \quad (6)$$

На втором этапе, пользуясь найденными  $c_{i,j}^{k+1/2}$ , находим  $c_{i,j}^{k+1}$  из системы

$$\frac{c_{i,j}^{k+1} - c_{i,j}^{k+1/2}}{0,5\tau} = D_{k+1/2} \times \left( \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - 2c_{i,j}^{k+1/2} + c_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - c_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} \right) + D_{k+1} \frac{c_{i,j+1}^{k+1} - 2c_{i,j}^{k+1} + c_{i,j-1}^{k+1}}{h_z^2} - a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1}] c_{i,j}^{k+1} + a_2^{k+1} w_{i,j}^{k+1} + a_3 \gamma^{k+1}, \quad (7)$$

$$\frac{w_{i,j}^{k+1} - w_{i,j}^{k+1/2}}{0,5\tau} = (1 - \sigma) \times (a_1^{k+1/2} [1 - W_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2} - a_2^{k+1/2} w_{i,j}^{k+1/2}) + \sigma (a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1}] c_{i,j}^{k+1} - a_2^{k+1} w_{i,j}^{k+1}). \quad (8)$$

Здесь, чтобы иметь возможность использовать алгоритм прогонки на  $s$ -м слое по времени ( $s = k + 1/2; k + 1$ ), неизвестную величину  $W_{i,j}^s$  заменяем ее аппроксимацией из линейного по  $\tilde{W}_{i,j}^s$  уравнения

$$\tilde{W}_{i,j}^s = W_{i,j}^{s-1/2} + \frac{\tau}{4} \{ a_1^{s-1/2} [1 - W_{i,j}^{s-1/2}] c_{i,j}^{s-1/2} w_{\max}^{-1} - a_2^{s-1/2} W_{i,j}^{s-1/2} + a_1^s [1 - \tilde{W}_{i,j}^s] c_{i,j}^{s-1/2} w_{\max}^{-1} - a_2^s \tilde{W}_{i,j}^s \}. \quad (9)$$

В стандартных обозначениях  $\dot{y} = f(t, y)$  – это симметричная схема  $y_s = y_{s-1/2} + \{f_{s-1/2} + f_s\} \tau / 4$  для нормированного на  $w_{\max}$  уравнения (2) с фиксированной по времени функцией  $c = c(t_{s-1/2}, r, z)$ . Итерационную процедуру уточнения  $\tilde{W}_{i,j}^s$  укажем позже. Для определенности полагаем  $\sigma = 1/2$ . Погрешность аппроксимации есть  $O(\tau^2 + h_r^2 + h_z^2)$  [Самарский, 1971].

Прогонка по радиусу  $r$ . Рассмотрим переход с  $k$ -го слоя на  $k + 1/2$ . Выразим  $w_{i,j}^{k+1/2}$  из уравнения (6) и подставим в (5). В обозначениях

$$A_i = 1 - h_r (2r_i)^{-1}, \quad B_i = 1 + h_r (2r_i)^{-1},$$

$$\kappa = 2h_r^2 \tau^{-1}, \quad G_{i,j}^{k+1/2} = 2 + \kappa D_{k+1/2}^{-1} [1 + \tilde{V}_{i,j}^{k+1/2}],$$

$$V_{i,j}^k = \frac{a_1^k [1 - W_{i,j}^k]}{a_2^{k+1/2} + 4\tau^{-1}}, \quad \tilde{V}_{i,j}^{k+1/2} = \frac{2a_1^{k+1/2} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1/2}]}{a_2^{k+1/2} + 4\tau^{-1}},$$

$$N_{i,j}^k = \frac{(4\tau^{-1} - a_2^k) w_{i,j}^k}{4\tau^{-1} + a_2^{k+1/2}},$$

$$F_{i,j}^k = \frac{D_k}{D_{k+1/2}} (h_r / h_z)^2 (c_{i,j+1}^k - 2c_{i,j}^k + c_{i,j-1}^k) + \kappa D_{k+1/2}^{-1} \times [1 + 0,5\tau a_2^{k+1/2} V_{i,j}^k] c_{i,j}^k + h_r^2 D_{k+1/2}^{-1} [a_2^{k+1/2} N_{i,j}^k + a_3 \gamma^{k+1/2}],$$

при каждом фиксированном  $j = 1, 2, \dots, N_2 - 1$  получаем при  $k \geq 0$

$$A_i c_{i-1,j}^{k+1/2} - G_{i,j}^{k+1/2} c_{i,j}^{k+1/2} + B_i c_{i+1,j}^{k+1/2} + F_{i,j}^k = 0. \quad (10)$$

Значения в начальный момент времени (на нулевом слое) известны:  $c_{i,j}^0 = \bar{c} = \text{const}$ . Следуя методу прогонки, ищем приближенные значения концентрации в узлах сетки на  $(k + 1/2)$ -м слое ( $k \geq 0$ ) по времени в виде

$$c_{i,j}^{k+1/2} = \alpha_{i+1,j}^{k+1/2} c_{i+1,j}^{k+1/2} + \beta_{i+1,j}^{k+1/2}, \quad i = 0, 1, \dots, N_1 - 1, \quad (11)$$

Прогоночные коэффициенты:  $i = 2, 3, \dots, N_1$ ,

$$\alpha_{i,j}^{k+1/2} = B_{i-1} / (G_{i-1,j}^{k+1/2} - A_{i-1} \alpha_{i-1,j}^{k+1/2}),$$

$$\beta_{i,j}^{k+1/2} = (A_{i-1} \beta_{i-1,j}^{k+1/2} + F_{i-1,j}^k) / (G_{i-1,j}^{k+1/2} - A_{i-1} \alpha_{i-1,j}^{k+1/2}).$$

При  $r \rightarrow +0$  имеем

$$c_r / r = (c_r(t, r, z) - c_r(t, 0, z)) / r \approx c_{rr}.$$

Начальные коэффициенты находим из аппроксимации уравнения

$$c_t = D(2c_{rr} + c_{zz}) - a_1 [1 - W] c + a_2 w + a_3 \gamma$$

на  $(k + 1/2)$ -м слое,  $i = 1$ , и условия  $c_r|_{r=0} = 0$ :

$$\alpha_{1,j}^{k+1/2} = 1 - \kappa (4D_{k+1/2})^{-1} [1 + \tilde{V}_{1,j}^{k+1/2}], \quad \beta_{1,j}^{k+1/2} = F_{1,j}^k / 4.$$

*Ближайшая цель* – найти значение  $c_{N_1,j}^{k+1/2}$ , необходимое для реализации прогонки. Запишем аппроксимацию граничного условия (3) ( $r = L$ ):  $k \geq 0$ ,  $(q_{1j}^{k+1/2} - q_{1j}^k) / (0,5\tau) =$

$$= 0,5 [-b_k (q_{1j}^k)^2 - D_k c_r(t_k, L, z_j) - b_{k+1/2} (q_{1j}^{k+1/2})^2 - D_{k+1/2} c_r(t_{k+1/2}, L, z_j)]. \quad (12)$$

В граничном узле с точностью до  $O(h_r^2)$  имеем:  $m = k, k + 1/2$ ,

$$2h_r c_r(t_m, L, z_j) \approx c_{N_1-2,j}^m - 4c_{N_1-1,j}^m + 3c_{N_1,j}^m. \quad (13)$$

Значения концентрации на  $k$ -м слое уже известны. Для  $(k + 1/2)$ -го слоя, подставляя  $c_{N_1-2,j}^{k+1/2}$  и  $c_{N_1-1,j}^{k+1/2}$  из соотношения (11), имеем

$$c_r(t_{k+1/2}, L, z_j) \approx \frac{1}{2h_r} \left[ (3 + \alpha_{N_1, j}^{k+1/2} (\alpha_{N_1-1, j}^{k+1/2} - 4)) c_{N_1, j}^{k+1/2} + \beta_{N_1-1, j}^{k+1/2} + (\alpha_{N_1-1, j}^{k+1/2} - 4) \beta_{N_1, j}^{k+1/2} \right].$$

Запишем приближение компактнее:

$$A \equiv 3 + \alpha_{N_1, j}^{k+1/2} (\alpha_{N_1-1, j}^{k+1/2} - 4),$$

$$B \equiv \beta_{N_1-1, j}^{k+1/2} + (\alpha_{N_1-1, j}^{k+1/2} - 4) \beta_{N_1, j}^{k+1/2},$$

$$2h_r c_r(t_{k+1/2}, L, z_j) \approx A c_{N_1, j}^{k+1/2} + B. \quad (14)$$

Соотношения (13), (14) подставляем в (12), обозначив  $c_{N_1, j}^{k+1/2} = y$ :

$$q_{1j}^m = g_m^{-1} c_{N_1, j}^m, \quad m = k, k+1/2,$$

$$\frac{b_{k+1/2}}{g_{k+1/2}^2} y^2 + \left[ \frac{4}{\tau g_{k+1/2}} + \frac{D_{k+1/2} A}{2h_r} \right] y + \Gamma = 0,$$

$$\Gamma \equiv \frac{b_k}{g_k^2} (c_{N_1, j}^k)^2 + \left( \frac{3D_k}{2h_r} - \frac{4}{\tau g_k} \right) c_{N_1, j}^k +$$

$$+ \frac{1}{2h_r} (D_{k+1/2} B + D_k (c_{N_1-2, j}^k - 4c_{N_1-1, j}^k)).$$

Корни квадратного уравнения по  $y$  разных знаков ( $\tau \ll 1$ ). По физическому смыслу берем  $y = c_{N_1, j}^{k+1/2} > 0$ . Погрешность аппроксимации граничного условия  $O(h_r^2 + \tau^2)$ , что согласуется со схемой в объеме.

Теперь найдем все значения  $c_{i, j}^{k+1/2}$  при  $j = 0$  и  $j = N_2$ ,  $i = 0, 1, \dots, N_1$ . Используя условие симметрии  $c_z|_{H/2} = 0$ , имеем  $c_{i, 0}^{k+1/2} = (4c_{i, 1}^{k+1/2} - c_{i, 2}^{k+1/2})/3$ . Значения  $c_{i, N_2}^{k+1/2} > 0$  ( $\tau, h$  малы) однозначно определяются из квадратного уравнения, аппроксимирующего граничное условие (4) при  $z = H$ :

$$\frac{b_{k+1/2}}{g_{k+1/2}^2} (c_{i, N_2}^{k+1/2})^2 + \left[ \frac{2}{\tau g_{k+1/2}} + \frac{3D_{k+1/2}}{2h_z} \right] c_{i, N_2}^{k+1/2} +$$

$$+ \frac{D_{k+1/2}}{2h_z} (c_{i, N_2-2}^{k+1/2} - 4c_{i, N_2-1}^{k+1/2}) - \frac{2}{\tau g_k} c_{i, N_2}^k = 0.$$

Зная все значения  $c_{i, j}^{k+1/2}$ , вычисляем концентрацию  $w$ :

$$w_{i, j}^{k+1/2} = (4\tau^{-1} w_{i, j}^k + a_1^k [1 - W_{i, j}^k] c_{i, j}^k - a_2^k w_{i, j}^k +$$

$$+ a_1^{k+1/2} [1 - \tilde{W}_{i, j}^{k+1/2}] c_{i, j}^{k+1/2}) (a_2^{k+1/2} + 4\tau^{-1})^{-1}.$$

Прогонка по переменной  $z$ . Поскольку в цилиндрических координатах возникает особенность при  $r \rightarrow +0$ , то переход с  $(k+1/2)$ -го слоя на  $(k+1)$ -й совершается в два этапа. Первый этап:  $i = 1$ ,  $r \rightarrow +0$  (аппроксимируем  $c_r/r \approx c_{rr}$ ), реализуется алгоритм прогонки для уравнения

$$c_t = D(2c_{rr} + c_{zz}) - a_1[1 - W]c + a_2w + a_3\gamma.$$

Второй этап:  $i = 2, \dots, N_1 - 1$ ,  $r > 0$ , прогонка для уравнения

$$c_t = D(c_{rr} + c_r/r + c_{zz}) - a_1[1 - W]c + a_2w + a_3\gamma.$$

Уравнение для  $w$  не меняется. Уравнение (7) для  $i = 1$  принимает вид

$$\frac{c_{1, j}^{k+1} - c_{1, j}^{k+1/2}}{0,5\tau} = 2D_{k+1/2} \frac{c_{2, j}^{k+1/2} - 2c_{1, j}^{k+1/2} + c_{0, j}^{k+1/2}}{h_r^2} +$$

$$+ D_{k+1} \frac{c_{1, j+1}^{k+1} - 2c_{1, j}^{k+1} + c_{1, j-1}^{k+1}}{h_z^2} -$$

$$- a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{1, j}^{k+1}] c_{1, j}^{k+1} + a_2^{k+1} w_{1, j}^{k+1} + a_3 \gamma^{k+1}.$$

Выразим  $w_{1, j}^{k+1}$  из (8) ( $i = 1$ ,  $\sigma = 1/2$ ) и подставим в (15). В обозначениях

$$\kappa = 2h_z^2 \tau^{-1}, \quad G_{1, j}^{k+1} = 2 + \kappa D_{k+1}^{-1} [1 + \tilde{V}_{1, j}^{k+1}],$$

$$V_{1, j}^{k+1/2} = \frac{a_1^{k+1/2} [1 - W_{1, j}^{k+1/2}]}{a_2^{k+1} + 4\tau^{-1}},$$

$$\tilde{V}_{1, j}^{k+1} = \frac{2a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{1, j}^{k+1}]}{a_2^{k+1} + 4\tau^{-1}},$$

$$N_{1, j}^{k+1/2} = \frac{(4\tau^{-1} - a_2^{k+1/2}) a_2^{k+1} w_{1, j}^{k+1/2}}{4\tau^{-1} + a_2^{k+1}},$$

$$F_{1, j}^{k+1/2} = \frac{2D_{k+1/2}}{D_{k+1}} (h_z/h_r)^2 (c_{2, j}^{k+1/2} - 2c_{1, j}^{k+1/2} + c_{0, j}^{k+1/2}) +$$

$$+ \kappa D_{k+1}^{-1} [1 + 0,5\tau a_2^{k+1} V_{1, j}^{k+1/2}] c_{1, j}^{k+1/2} +$$

$$+ h_z^2 D_{k+1}^{-1} [N_{1, j}^{k+1/2} + a_3 \gamma^{k+1}],$$

получаем

$$c_{1, j-1}^{k+1} - G_{1, j}^{k+1} c_{1, j}^{k+1} + c_{1, j+1}^{k+1} + F_{1, j}^{k+1/2} = 0, \quad k \geq 0. \quad (16)$$

Ищем приближение концентрации на  $(k+1)$ -м слое по времени в виде:  $k \geq 0$ ,

$$c_{1, j}^{k+1} = \alpha_{1, j+1}^{k+1} c_{1, j+1}^{k+1} + \beta_{1, j+1}^{k+1}, \quad j = 0, 1, \dots, N_2 - 1. \quad (17)$$

Прогоночные коэффициенты:  $j = 2, 3, \dots, N_2$ ,

$$\alpha_{1, j}^{k+1} = (G_{1, j-1}^{k+1} - \alpha_{1, j-1}^{k+1})^{-1},$$

$$\beta_{1, j}^{k+1} = (\beta_{1, j-1}^{k+1} + F_{1, j-1}^{k+1/2}) (G_{1, j-1}^{k+1} - \alpha_{1, j-1}^{k+1})^{-1}.$$

Начальные коэффициенты находим из (16) при  $j = 1$  и условия  $c_z|_{H/2} = 0$ :

$$\alpha_{1, 1}^{k+1} = 1 - \kappa (2D_{k+1})^{-1} [1 + \tilde{V}_{1, 1}^{k+1}],$$

$$\beta_{1, 1}^{k+1} = F_{1, 1}^{k+1/2} / 2.$$

Разностная аппроксимация уравнения (7) для  $i = 2, \dots, N_1 - 1$ :

$$\frac{c_{i,j}^{k+1} - c_{i,j}^{k+1/2}}{0,5\tau} = D_{k+1/2} \times \left( \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - 2c_{i,j}^{k+1/2} + c_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - c_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} \right) + (18)$$

$$+ D_{k+1} \frac{c_{i,j+1}^{k+1} - 2c_{i,j}^{k+1} + c_{i,j-1}^{k+1}}{h_z^2} - a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1}] c_{i,j}^{k+1} + a_2^{k+1} w_{i,j}^{k+1} + a_3 \gamma^{k+1}.$$

Выразим  $w_{i,j}^{k+1}$  из (8) ( $\sigma = 1/2$ ) и подставим в соотношение (18). В обозначениях

$$\kappa = 2h_z^2 \tau^{-1}, \quad G_{i,j}^{k+1} = 2 + \kappa D_{k+1}^{-1} [1 + \tilde{V}_{i,j}^{k+1}],$$

$$V_{i,j}^{k+1/2} = \frac{a_1^{k+1/2} [1 - W_{i,j}^{k+1/2}]}{a_2^{k+1} + 4\tau^{-1}},$$

$$\tilde{V}_{i,j}^{k+1} = \frac{2a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1}]}{a_2^{k+1} + 4\tau^{-1}},$$

$$N_{i,j}^{k+1/2} = \frac{(4\tau^{-1} - a_2^{k+1/2}) a_2^{k+1} w_{i,j}^{k+1/2}}{4\tau^{-1} + a_2^{k+1}},$$

$$F_{i,j}^{k+1/2} = \frac{D_{k+1/2}}{D_{k+1}} h_z^2 \times \left( \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - 2c_{i,j}^{k+1/2} + c_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i} \cdot \frac{c_{i+1,j}^{k+1/2} - c_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} \right) + \kappa D_{k+1}^{-1} [1 + 0,5\tau a_2^{k+1} V_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2} + h_z^2 D_{k+1}^{-1} [N_{i,j}^{k+1/2} + a_3 \gamma^{k+1}],$$

при каждом фиксированном  $i = 2, 3, \dots, N_1 - 1$

получаем

$$c_{i,j-1}^{k+1} - G_{i,j}^{k+1} c_{i,j}^{k+1} + c_{i,j+1}^{k+1} + F_{i,j}^{k+1/2} = 0, \quad k \geq 0. \quad (19)$$

Ищем концентрацию в узлах сетки на  $(k+1)$ -м слое по  $t$  в виде:  $k \geq 0$ ,

$$c_{i,j}^{k+1} = \alpha_{i,j+1}^{k+1} c_{i,j+1}^{k+1} + \beta_{i,j+1}^{k+1}, \quad j = 0, 1, \dots, N_2 - 1, \quad (20)$$

Прогночные коэффициенты:  $j = 2, 3, \dots, N_2$ ,

$$\alpha_{i,j}^{k+1} = (G_{i,j-1}^{k+1} - \alpha_{i,j-1}^{k+1})^{-1},$$

$$\beta_{i,j}^{k+1} = (\beta_{i,j-1}^{k+1} + F_{i,j-1}^{k+1/2}) (G_{i,j-1}^{k+1} - \alpha_{i,j-1}^{k+1})^{-1}.$$

Начальные коэффициенты находим из (19) при  $j = 1$  и условия  $c_z|_{H/2} = 0$ :

$$\alpha_{i,1}^{k+1} = 1 - \kappa (2D_{k+1})^{-1} [1 + \tilde{V}_{i,1}^{k+1}],$$

$$\beta_{i,1}^{k+1} = F_{i,1}^{k+1/2} / 2.$$

Ближайшая цель — значение  $c_{i,N_2}^{k+1}$ ,  $i = 1, \dots, N_1 - 1$ , необходимое для реализации прогонки. Запишем аппроксимацию граничного условия (4)

$$(z = H): k \geq 0, \quad (q_{2i}^{k+1} - q_{2i}^{k+1/2}) / (0,5\tau) =$$

$$= 0,5[-b_{k+1/2} (q_{2i}^{k+1/2})^2 - D_{k+1/2} c_z(t_{k+1/2}, r_i, H) - b_{k+1} (q_{2i}^{k+1})^2 - D_{k+1} c_z(t_{k+1}, r_i, H)]. \quad (21)$$

В граничном узле с точностью до  $O(h_z^2)$ :

$$2h_z c_z(t_m, r_i, H) \approx c_{i,N_2-2}^m - 4c_{i,N_2-1}^m + 3c_{i,N_2}^m,$$

$$m = k + 1/2, k + 1. \quad (22)$$

Значения концентрации на  $(k+1/2)$ -м слое уже известны. Для  $(k+1)$ -го слоя, подставляя значения  $c_{i,N_2-2}^{k+1}$  и  $c_{i,N_2-1}^{k+1}$  из соотношений (17) (при  $i = 1$ ) и (20) (при  $i = 2, \dots, N_1 - 1$ ), получаем аппроксимацию

$$c_z(t_{k+1}, r_i, H) \approx \frac{1}{2h_z} [(3 + \alpha_{i,N_2}^{k+1} (\alpha_{i,N_2-1}^{k+1} - 4)) c_{i,N_2}^{k+1} + \beta_{i,N_2-1}^{k+1} + (\alpha_{i,N_2-1}^{k+1} - 4) \beta_{i,N_2}^{k+1}].$$

Запишем приближение компактнее:

$$A \equiv 3 + \alpha_{i,N_2}^{k+1} (\alpha_{i,N_2-1}^{k+1} - 4),$$

$$B \equiv \beta_{i,N_2-1}^{k+1} + (\alpha_{i,N_2-1}^{k+1} - 4) \beta_{i,N_2}^{k+1},$$

$$2h_z c_z(t_{k+1}, r_i, H) \approx A c_{i,N_2}^{k+1} + B. \quad (23)$$

Соотношения (22), (23) подставляем в (21), обозначив  $c_{i,N_2}^{k+1} = y$ :

$$q_{2i}^m = g_m^{-1} c_{i,N_2}^m, \quad m = k + 1/2, k + 1,$$

$$\frac{b_{k+1}}{g_{k+1}^2} y^2 + \left[ \frac{4}{\tau g_{k+1}} + \frac{D_{k+1} A}{2h_z} \right] y + \Gamma = 0,$$

$$\Gamma \equiv \frac{b_{k+1/2}}{g_{k+1/2}^2} (c_{i,N_2}^{k+1/2})^2 + \left( \frac{3D_{k+1/2}}{2h_z} - \frac{4}{\tau g_{k+1/2}} \right) c_{i,N_2}^{k+1/2} +$$

$$+ \frac{1}{2h_z} (D_{k+1} B + D_{k+1/2} (c_{i,N_2-2}^{k+1/2} - 4c_{i,N_2-1}^{k+1/2})).$$

По физическому смыслу выбираем положительный корень квадратного уравнения по  $y$ . Корни разных знаков, по крайней мере при относительно малых  $\tau$  (обозначаем  $\tau \ll 1$ ). Погрешность аппроксимации граничного условия  $O(h_z^2 + \tau^2)$  согласуется со схемой в объеме.

Теперь найдем все значения  $c_{i,j}^{k+1}$  при  $i = 0$  и  $i = N_1$ ,  $j = 0, 1, \dots, N_2$ . Используя граничное условие на оси цилиндра ( $c_r|_{+0} = 0$ ), получаем  $c_{0,j}^{k+1} = (4c_{1,j}^{k+1} - c_{2,j}^{k+1}) / 3$ . Значения  $c_{N_1,j}^{k+1} > 0$  определяются из уравнения

$$\frac{b_{k+1}}{g_{k+1}^2} (c_{N_1,j}^{k+1})^2 + \left[ \frac{2}{\tau g_{k+1}} + \frac{3D_{k+1}}{2h_r} \right] c_{N_1,j}^{k+1} + \frac{D_{k+1}}{2h_r} (c_{N_1-2,j}^{k+1} - 4c_{N_1-1,j}^{k+1}) - \frac{2}{\tau g_{k+1/2}} c_{N_1,j}^{k+1/2} = 0,$$

аппроксимирующего условие (3) при  $r = L$ . По  $c_{i,j}^{k+1}$  вычисляем

$$w_{i,j}^{k+1} = \{4\tau^{-1} w_{i,j}^{k+1/2} + a_1^{k+1/2} [1 - W_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2} - a_2^{k+1/2} w_{i,j}^{k+1/2} + a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1}] c_{i,j}^{k+1}\} (a_2^{k+1} + 4\tau^{-1})^{-1}.$$

Коррекция  $\tilde{W}_{i,j}^s$  ( $s = k + 1/2; k + 1$ ) состоит в том, что можно положить  $\tilde{W}_{i,j}^s = w_{i,j}^s / w_{\max}$  и повторить вычисления по схеме метода переменных направлений до установления  $\tilde{W}_{i,j}^s \approx W_{i,j}^s$  (обычно две-три итерации).

**Классическая диффузионная задача.** Для упрощенных расчетов считают диффузию единственным лимитирующим фактором (игнорируются физико-химические процессы на поверхности), и рассматривают краевую задачу I рода с нулевыми граничными концентрациями:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(t) \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right),$$

$$r \in (0, L), \quad z \in (0, H), \quad t \in (0, t_*),$$

$$c_r(t, +0, z) = 0, \quad c(t, L, z) = 0,$$

$$c(t, r, 0) = c(t, r, H) = 0, \quad c(0, r, z) = \bar{c}.$$

В качестве приближения решения используется частичная сумма ряда

$$c(t, r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} \exp \left\{ -\lambda_{nm} \int_0^t D(\tau) d\tau \right\} \times J_0 \left( \frac{\mu_m^0}{L} r \right) \cdot \sin \left( \frac{n\pi}{H} z \right),$$

$$A_{nm} \equiv \frac{4(1 + (-1)^{n+1})\bar{c}}{\pi n \mu_m^0 J_1(\mu_m^0)}, \quad \lambda_{nm} \equiv \left( \frac{n\pi}{H} \right)^2 + \left( \frac{\mu_m^0}{L} \right)^2,$$

представляющего обобщенное решение (из-за несогласованности краевых условий). Здесь  $D(t) \equiv D(T(t))$ ,  $J_0$ ,  $J_1$  – функции Бесселя первого рода нулевого и первого порядков,  $\mu_m^0$  – последовательные нули функции  $J_0(\mu)$ . Поток  $N$  сквозь поверхность:

$$I(t) = \int_S Dc_n ds = \bar{c} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{8HD(t)[1 + (-1)^{n+1}]}{n\pi} \times \left[ \frac{1 + (-1)^{n+1}}{n} + (-1)^{n+1} 2n(\pi L [H\mu_m^0]^{-1})^2 \right] \cdot \exp\{\dots\}.$$

Часто ограничиваются первым слагаемым ( $n = m = 1$ ), считая остальные быстро затухающими. Но в рассматриваемой задаче асимптотика по времени не столь важна: самое интересное происходит до и в окрестности «верхушки» ТДС-пика. Сколько членов ряда необходимо

брать для хорошей аппроксимации графика ( $\pm 5\%$ )? Ряд сходится медленно. Например, при  $\bar{c} = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ ,  $D_0 = 2 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$ ,  $E_D = 6 \cdot 10^4 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$  ( $D \approx 2 \cdot 10^{-7}$ ,  $T = 773 \text{ K}$ ), нужно 144 члена ряда ( $n = 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15; 1 \leq m \leq 18$ ). При четных  $n$  сумма равна нулю.

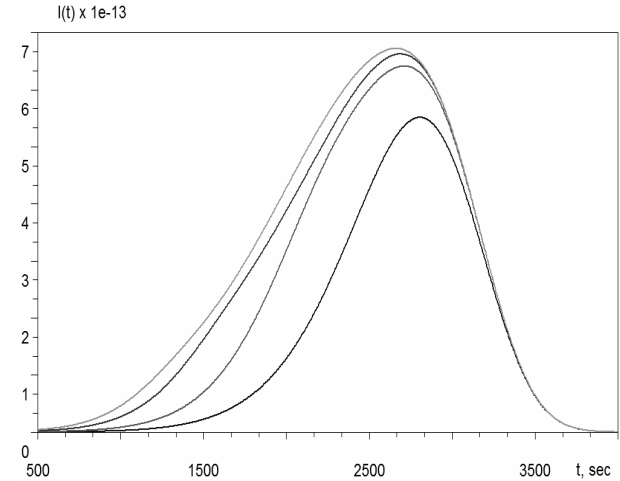


Рис. 2. Приближения диффузионного потока  $I(t)$

На рис. 2 приведены по убыванию максимума приближения  $I(t)$  частичными суммами с  $(n, m) \leq (N, M) = (15, 18), (5, 10), (3, 3), (1, 1)$ . Несколькими слагаемыми не обойтись, пик только один (разве что в конкретной ситуации необходимо учесть несколько сравнимых каналов диффузии с различными  $D^{(j)}$ ).

## Алгоритм и результаты моделирования

Изложим поэтапно алгоритм вычислений. Фиксируем значения  $L, H, D_0, E_D, b_0, E_b, g_0, E_g, \bar{c}, w_{\max}, \bar{\gamma}, T_0, T_e, T_{\text{crit}}, a_1, a_2, a_3, \sigma, \rho, \tilde{c}$ . Переход от  $k$ -го слоя к  $k+1$  осуществляется в два этапа. **I-й этап:** на  $(k+1/2)$ -м слое по времени ( $k \geq 0$ ) алгоритм вычислений следующий.

1. Вычисляем значения  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1/2}$  из уравнения (9) при  $s = k + 1/2$ .

2. В соответствии с соотношениями (10), (11) прямым ходом прогонки вычисляем наборы коэффициентов  $\alpha_{i,j}^{k+1/2}, \beta_{i,j}^{k+1/2}$ .

3. Значения концентрации в граничных узлах определяем, решая квадратные уравнения относительно  $y = c_{N_1,j}^{k+1/2} > 0$ .

4. Обратным ходом прогонки по формуле (11) находим приближенные значения концентрации во всех внутренних узлах.



5. Используя граничные условия, доопределяем значения  $c_{i,j}^{k+1/2}$  в граничных узлах при  $j = 0$  и  $j = N_2$ ,  $i = 0, 1, \dots, N_1$ .

6. Из второго уравнения разностной схемы в объеме вычисляем значения концентрации в дефектах обратимого захвата:

$$w_{i,j}^{k+1/2} = \{4\tau^{-1}w_{i,j}^k + a_1^k [1 - W_{i,j}^k] c_{i,j}^k - a_2^k w_{i,j}^k + a_1^{k+1/2} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2}\} (a_2^{k+1/2} + 4\tau^{-1})^{-1}.$$

7. Коррекция  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1/2}$ : можно положить  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1/2} = w_{i,j}^{k+1/2} / w_{\max}$  и повторить п.п. 2–6 до установления  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1/2} \approx W_{i,j}^{k+1/2}$  (2–3 итерации).

**II-й этап:** на  $(k+1)$ -м слое по времени ( $k \geq 0$ ) алгоритм следующий.

1. Вычисляем по слою значения  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1}$  из уравнения (9) при  $s = k+1$ .

2. В соответствии с соотношениями (16), (17), (19), (20) прямой прогонкой вычисляем коэффициенты  $\alpha_{1,j}^{k+1}$ ,  $\beta_{1,j}^{k+1}$ ,  $\alpha_{i,j}^{k+1}$ ,  $\beta_{i,j}^{k+1}$ .

3. Значения концентрации в граничных узлах определяем, решая квадратное уравнение относительно  $y = c_{i,N_2}^{k+1} > 0$ .

4. Обратным ходом прогонки по формулам (17), (20) находим приближенные значения концентрации во внутренних узлах.

5. Из граничных условий:  $c_{i,j}^{k+1}$  при  $i = 0$  и  $i = N_1$ ,  $j = 0, 1, \dots, N_2$ .

6. Из второго уравнения разностной схемы в объеме:

$$w_{i,j}^{k+1} = \{4\tau^{-1}w_{i,j}^{k+1/2} + a_1^{k+1/2} [1 - W_{i,j}^{k+1/2}] c_{i,j}^{k+1/2} - a_2^{k+1/2} w_{i,j}^{k+1/2} + a_1^{k+1} [1 - \tilde{W}_{i,j}^{k+1}] c_{i,j}^{k+1}\} (a_2^{k+1} + 4\tau^{-1})^{-1}.$$

7. Коррекция  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1}$ : можно положить  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1} = w_{i,j}^{k+1} / w_{\max}$  и повторить п.п. 2–6 до установления  $\tilde{W}_{i,j}^{k+1} \approx W_{i,j}^{k+1}$ .

### Результаты численного моделирования

На рис. 3–10 изображены графики десорбционного потока  $J(t)$ . Варьируемые коэффициенты приводятся в порядке следования максимумов  $J(t)$  слева направо или по их убыванию. Кружком отмечается окончание начального поверхностного водорода. Фиксируем  $\bar{\gamma} = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ ,  $w_{\max} = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ . Параметры по умолчанию, общие для всех графиков, берутся из таблицы.

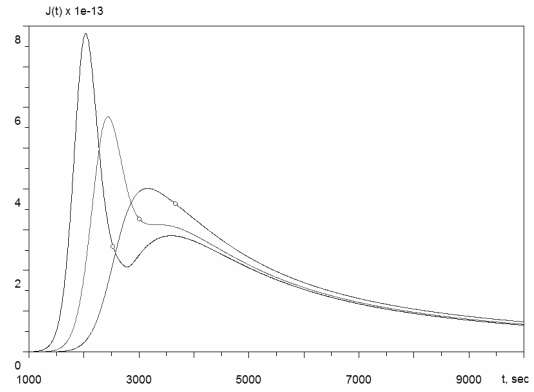


Рис. 3. Влияние параметра  $b_0$

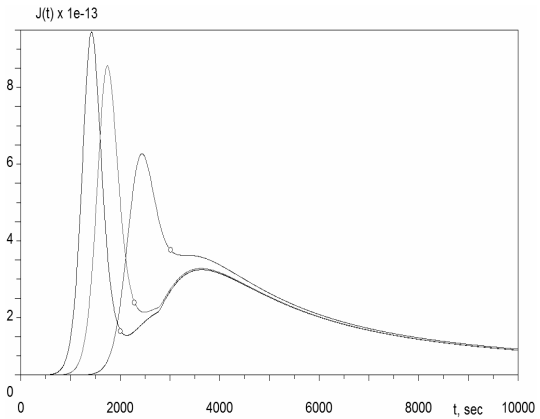


Рис. 4. Влияние параметра  $E_D$

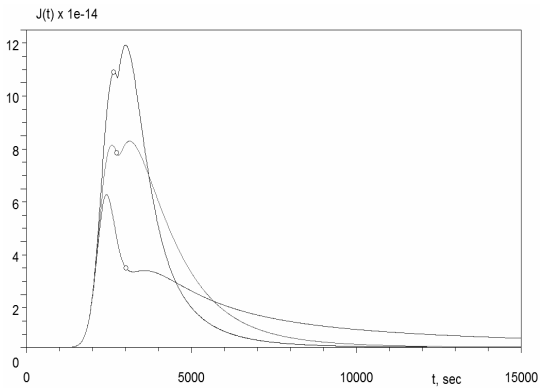


Рис. 5. Влияние параметра  $D_0$

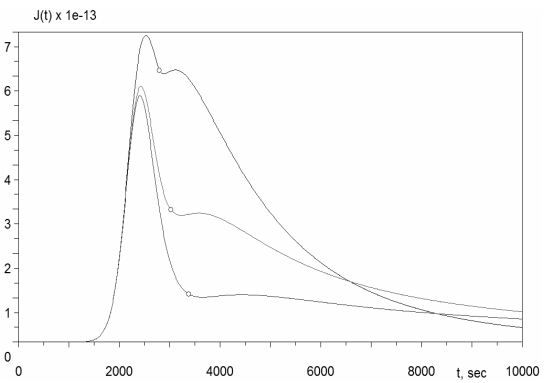


Рис. 6. Влияние параметра  $E_D$

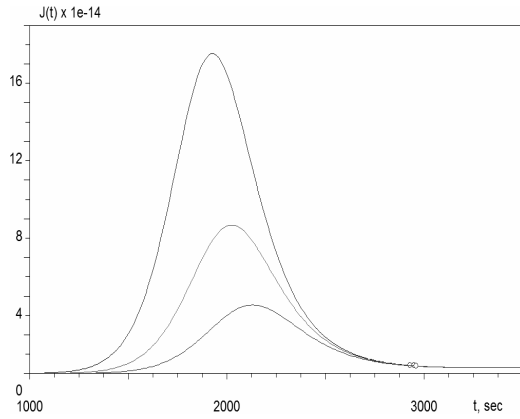


Рис. 7. Влияние параметра  $g_0$

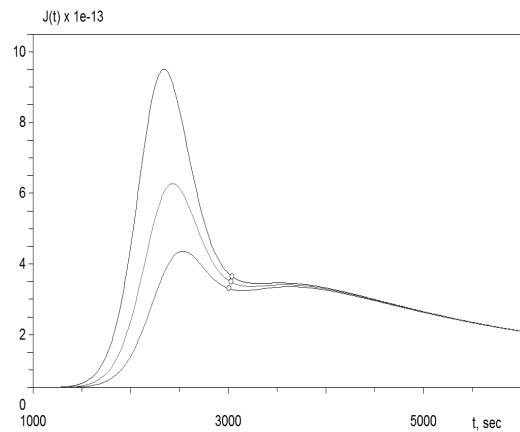


Рис. 8. Влияние параметра  $E_g$

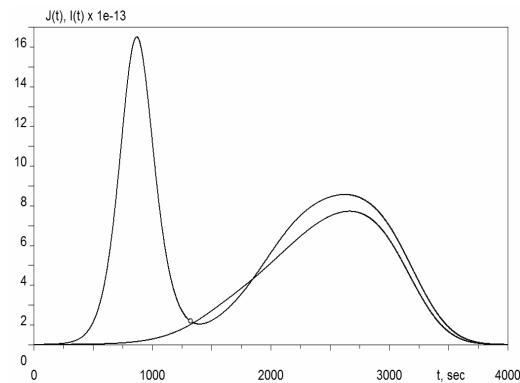


Рис. 9. Сравнение  $J(t)$  и  $I(t)$

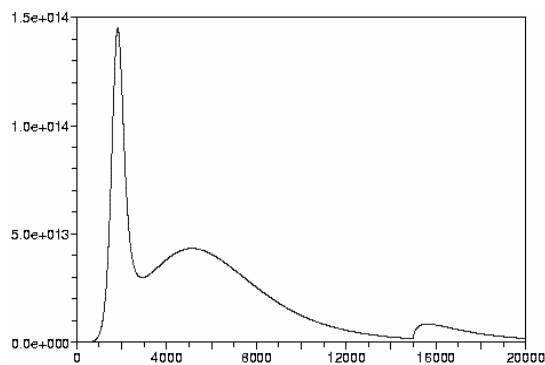


Рис. 10. Влияние дефектов двух типов

Параметры моделирования, общие для всех графиков

$b_0 = 10^{-13}$	$E_b = 12 \cdot 10^4$	$T_0 = 293$	$a_1 = 0,1$	$L = 4 \cdot 10^{-3}$
$d_0 = 10^{-6}$	$E_d = 5 \cdot 10^4$	$T_{crit} = 700$	$a_2 = 0,2$	$H = 2 \cdot 10^{-2}$
$g_0 = 10^3$	$E_g = 0$	$T_e = 773$	$a_3 = 10^{-3}$	$\bar{c} = 10^{23}$

Примечание.  $[g_0] = \text{м}^{-1}$ ,  $[b_0, D_0] = \text{м}^2 \text{с}^{-1}$ ,

$[E_b, E_d, E_g] = \text{Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$ ,  $[T_0, T_{crit}, T_e] = \text{К}$ ,

$[a_1, a_2, a_3] = \text{с}^{-1}$ ,  $[L, H] = \text{м}$ ,  $[\bar{c}] = \text{м}^{-3}$ .

На рис. 3 показано влияние коэффициента  $b_0$  на десорбционный поток. Изменения:  $b_0 = 10^{-12}; 10^{-13}; 10^{-14} \text{ м}^2 \text{с}^{-1}$ . Рис. 4 иллюстрирует влияние энергии активации  $E_b$ , изменения по убыванию максимума:  $E_b \cdot 10^{-4} = 9; 10; 12 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$ . Рис. 5:  $D_0 = 5 \cdot 10^{-5}; 10^{-5}; 10^{-6} \text{ м}^2 \text{с}^{-1}$ . На рис. 6 показано влияние  $E_d$ :  $E_d \cdot 10^{-4} = 4; 5; 6$ . На рис. 7 варьируется  $g_0 = 50; 100; 200 \text{ м}^{-1}$ . Рис. 8 отражает зависимость десорбции от значения  $E_g \cdot 10^{-3} = 1; 0; -1$ . На рис. 9 представлены графики двух потоков: диффузионного – для вырожденной задачи I рода, десорбционного – для краевой задачи с динамическими граничными условиями (левый график). Значения параметров:  $D_0 = 2 \cdot 10^{-3}$ ,  $E_d = 6 \cdot 10^4$ ,  $b_0 = 10^{-5}$ ,  $E_b = 12 \cdot 10^4$ ,  $g_0 = 10^3$ ,  $\bar{y} = 3 \cdot 10^{23}$ ,  $w_{max} = 10^{24}$ ,  $a_{1_0} = 0$ ,  $a_3 \equiv 0$ . На рис. 10 приведен график потока с учетом дефектов двух типов (обратимый захват и распад).

Работа выполнена при поддержке ОМН РАН, РФФИ (грант № 09-01-00439-а) и Фонда содействия отечественной науке.

## Литература

Габис И. Е., Компаниец Т. Н., Курдюмов А. А. Поверхностные процессы и проникновение водорода сквозь металлы // Взаимодействие водорода с металлами / Ред. А. П. Захаров. М.: Наука, 1987. С. 177–206.

Колачев Б. А. Водородная хрупкость металлов. М.: Металлургия, 1985. 217 с.

Кунин Л. Л., Головин А. И., Суровой Ю. И., Хохрин В. М. Проблемы дегазации металлов. М.: Наука, 1972. 324 с.

Полянский А. М., Полянский В. А., Попов-Дюмин Д. Б., Козлов Е. А. Новый измерительный комплекс для абсолютного определения содержания водорода в материалах водородной энергетики // Альтернативная энергетика и экология. 2006. Т. 38, № 6. С. 29–31.

Полянский А. М., Полянский В. А., Яковлев Ю. А. Методы определения энергий связи водорода в твердом теле, реализованные на базе анализатора водорода АВ-1 // Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами: сборник докл. III Междунар. конф. (Санкт-Петербург, 2–7 июля 2007 г.). Саратов: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2008. С. 346–353.

Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 553 с.

Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I. Modelling of diffusion TDS-spectrum peak of dehydriding with

size reduction and heat absorption effects // NATO Science for Peace and Security, Series C, Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems / Eds. B. Baranowski et al. Springer, 2008. P. 863–878.

Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I. Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: diffusion peak of TDS-spectrum of dehydriding // Applied Mathematical Modelling. Elsevier, 2009. Vol. 33, N 10. P. 3776–3791.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

##### **Родченкова Наталья Ивановна**

научный сотрудник, к. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: NIRodchenkova@yandex.ru  
тел.: (8142) 766312

##### **Заика Юрий Васильевич**

зав. лаб. моделирования природно-технических систем,  
д. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: zaika@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 766312

##### **Rodchenkova, Natalia**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: NIRodchenkova@yandex.ru  
tel.: (8142) 766312

##### **Zaika, Yury**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: zaika@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 766312

УДК 519.2

## ПОЛИНОМИАЛЬНЫЕ ИНВАРИАНТЫ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ С ЛАТЕНТНЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

**С. В. Стафеев**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

В статье рассматривается модель факторного анализа с зависимыми остатками. Стандартный подход к получению статистических выводов с помощью этой модели основан на параметрическом представлении и на методе максимального правдоподобия. К сожалению, такой подход не всегда применим. Например, данная ситуация возникает тогда, когда выборочная матрица ковариаций вырождена. Один из подходов для преодоления данных трудностей состоит в использовании полиномиальных инвариантов, представляющих из себя полиномы, которые зависят от элементов матрицы ковариаций наблюдаемых случайных величин. В статье разработан метод получения таких инвариантов для произвольного числа латентных переменных.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** факторный анализ, латентные переменные, полиномиальные инварианты.

### **S. V. Stafeev. POLYNOMIAL INVARIANTS FOR MODELS WITH LATENT VARIABLES**

Statistical inference in factor analysis models is usually based on parametric representation and on maximum likelihood estimates. However, such approach is not always applicable. For example, the case when a sample covariance matrix is singular the likelihood ratio test cannot be used. One of the approaches for overcoming these difficulties consists in using model invariants, that is, polynomial equality relations that the model imposes on the entries of the covariance matrix of the observed variables. In this paper a simple method for finding model invariants for any number of latent variables is developed.

**К е y w o r d s :** factor analysis, latent variables, polynomial invariants.

---

#### **Постановка задачи**

Рассмотрим следующую модель факторного анализа:

$$X_i = \sum_{j=1}^k a_{ij} H_j + Y_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

где  $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_n\}^t$  – вектор наблюдаемых случайных величин с матрицей ковариаций  $\Sigma = (\sigma_{ij})$ ;  $\mathbf{H} = \{H_1, \dots, H_k\}^t$  – множество независимых в совокупности нормально распределенных латентных (ненаблюдаемых) случайных

величин (факторов), причем  $MH_i = 0$ ,  $DH_i = 1$ ,  $i = 1, \dots, k$ ;  $A = (a_{ij})$  – матрица факторных нагрузок. Вектор остатков  $\mathbf{Y} = \{Y_1, \dots, Y_k\}^t$  имеет невырожденное нормальное распределение с нулевым вектором математических ожиданий и матрицей ковариаций  $\Theta = (\theta_{ij})$ . Векторы  $\mathbf{Y}$  и  $\mathbf{H}$  являются независимыми. Взаимосвязь компонент вектора  $\mathbf{Y}$  представляется ковариационной графовой моделью [Стафеев, 2005] со структурой  $G = (V, E)$ , где  $V = \{1, \dots, n\}$ , а  $E = \{(i, j) \mid i \neq j, \theta_{ij} \neq 0\}$ .

Стандартный подход к получению статистических выводов с помощью этой модели основан на параметрическом представлении модели и на методе максимального правдоподобия [Harman, 1976]. К сожалению, такой подход не всегда применим. Например, данная ситуация возникает тогда, когда выборочная матрица ковариаций вырождена. Заметим, что когда число наблюдений меньше числа переменных, это всегда так. Один из подходов для преодоления данных трудностей состоит в использовании полиномиальных инвариантов модели. Инвариант модели (1) представляет из себя полином, который зависит от элементов матрицы ковариаций наблюдаемых случайных величин. Заметим, что проблема нахождения инвариантов модели (1) связана с проблемой параметрической идентифицируемости модели (1) [Стафеев, 2006, 2009]. Основная проблема данного подхода состоит в том, что нахождение инвариантов для  $k > 2$  очень трудно с вычислительной точки зрения [Drton et al., 2007]. В статье разработан простой метод получения таких инвариантов для произвольного числа латентных переменных.

### Полиномиальные инварианты

Легко видеть, что матрица ковариаций наблюдаемых случайных величин  $\Sigma$  допускает следующее представление:  $\Sigma = AA^t + \Theta$ . (2)

Пусть  $P_G^k$  – множество всех положительно определенных матриц, допускающих разложение (2), и пусть  $f(\Sigma)$  – полином, зависящий от элементов  $\sigma_{ij}$  матрицы  $\Sigma$ . Полином  $f(\Sigma)$  называется полиномиальным инвариантом модели (1), если  $f(\Sigma) = 0$  для всех матриц  $\Sigma \in P_G^k$ . Легко видеть, что множество всех инвариантов модели (1) образует идеал  $I_{k,n}^G$  кольца многочленов  $\mathbf{R}[\sigma_{ij}, i < j, (i, j) \notin E]$ . Заметим,

что согласно известной теореме Гильберта, любой идеал имеет конечный базис.

Пусть  $M_{k,n} \subseteq \mathbf{R}[\sigma_{ij}, i < j]$  – идеал, который генерируется всеми  $(k+1) \times (k+1)$  минорами симметричной матрицы  $\Sigma$ . (Другими словами, базис идеала  $M_{k,n}$  состоит из всех  $(k+1) \times (k+1)$  миноров матрицы  $\Sigma$ .) В работе [Drton, Sullivan, 2007] показано, что

$$I_{k,n} = M_{k,n} \cap \mathbf{R}[\sigma_{ij}, i < j],$$

где  $I_{k,n}$  – идеал  $I_{k,n}^G$ , в котором граф  $G$  не содержит ребер. Аналогичным образом, можно показать:

$$I_{k,n}^G = I_{k,n} \cap \mathbf{R}[\sigma_{ij}, i < j, (i, j) \notin E] =$$

$$M_{k,n} \cap \mathbf{R}[\sigma_{ij}, i < j, (i, j) \notin E].$$

В работе [Loera et al., 1995] найден базис идеала  $I_{k,n}$ . Он состоит из полиномов вида  $\sigma_{ij}\sigma_{lm} - \sigma_{il}\sigma_{jm}$ ,  $i \neq j \neq l \neq m$ . (3)

Полиномы вида (3) называются тетрадами.

Заметим, что простейшими инвариантами, принадлежащими  $I_{k,n}$ , являются не содержащие диагональных элементов  $(k+1) \times (k+1)$  миноры матрицы  $\Sigma$ . Примером нетривиального инварианта для  $k = 2$  и  $n = 5$  является пентада [Harman, 1976], имеющая вид:

$$\begin{aligned} & \sigma_{12}\sigma_{23}\sigma_{34}\sigma_{45}\sigma_{51} - \sigma_{12}\sigma_{23}\sigma_{35}\sigma_{45}\sigma_{14} - \\ & \sigma_{12}\sigma_{24}\sigma_{35}\sigma_{34}\sigma_{15} + \sigma_{12}\sigma_{24}\sigma_{13}\sigma_{45}\sigma_{35} + \\ & \sigma_{12}\sigma_{24}\sigma_{13}\sigma_{45}\sigma_{35} - \sigma_{12}\sigma_{24}\sigma_{13}\sigma_{45}\sigma_{35} - \\ & \sigma_{13}\sigma_{24}\sigma_{35}\sigma_{14}\sigma_{25} + \sigma_{13}\sigma_{25}\sigma_{34}\sigma_{24}\sigma_{15} + \\ & \sigma_{14}\sigma_{23}\sigma_{13}\sigma_{45}\sigma_{25} - \sigma_{14}\sigma_{25}\sigma_{23}\sigma_{45}\sigma_{15} - \\ & \sigma_{15}\sigma_{23}\sigma_{13}\sigma_{24}\sigma_{45} + \sigma_{15}\sigma_{24}\sigma_{23}\sigma_{14}\sigma_{35}. \end{aligned}$$

Определим основной объект данной работы.

Пусть  $\bar{G} = (V, \bar{E})$  – дополнительный для  $G$  граф. Определим граф  $\mathbf{G} = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$ , где

$$\mathbf{V} = \{\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_k), 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq k\},$$

$$\mathbf{E} = \{(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \mid \mathbf{i} = (i_1, \dots, i_k), \mathbf{j} = (j_1, \dots, j_k),$$

$$(i_s, j_l) \in \bar{E}, s, l = 1, \dots, k\}.$$

Заметим, что граф  $\mathbf{G}$  был впервые определен в работе [Stafeev, 2007] в контексте проблемы параметрической идентифицируемости модели (1).

Обозначим через  $|\Sigma_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}|$  детерминант матрицы  $\Sigma_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} = (\sigma_{i_m, j_l})_{m, l=1}^k$ . Пусть  $C = (V_C, E_C)$ , где  $V_C = \{\alpha_i, i = 1, \dots, m\}$ , а

$E_C = \{(\alpha_i, \alpha_{i+1}), i = 1, \dots, m-1, (\alpha_1, \alpha_m)\}$ , – четный простой цикл. Определим следующий полином:

$$f_C(\Sigma) = \prod_{(i,j) \in E'_C} |\Sigma_{i,j}| - \prod_{(i,j) \in E''_C} |\Sigma_{i,j}|,$$

где  $E'_C = \{(\alpha_{2j+1}, \alpha_{2j+2}), j = 0, \dots, m/2 - 1\}$  и  $E''_C = E_C \setminus E'_C$ .

Пусть  $T = (V_T, E_T)$  – граф, состоящий из простого нечетного цикла с множеством ребер  $E_1 = \{(\alpha_1, \alpha_2), \dots, (\alpha_{m-1}, \alpha_m)\}$ , простой цепи с множеством ребер

$E_2 = \{(\alpha_{m_1}, \alpha_{m_1+1}), \dots, (\alpha_{m_2-1}, \alpha_{m_2})\}$  и простого нечетного цикла с множеством ребер

$E_3 = \{(\alpha_{m_2}, \alpha_{m_2+1}), \dots, (\alpha_{m-1}, \alpha_m), (\alpha_m, \alpha_{m_2})\}$ . Определим следующий полином:

$$f_T(\Sigma) = \prod_{(i,j) \in E'_T \cap (E_1 \cup E_3)} |\Sigma_{i,j}| - \prod_{(i,j) \in E'_T \cap E_2} |\Sigma_{i,j}|^2 -$$

$$\prod_{(i,j) \in E''_T \cap (E_1 \cup E_3)} |\Sigma_{i,j}| - \prod_{(i,j) \in E''_T \cap E_2} |\Sigma_{i,j}|^2,$$

где  $E'_T = \{(\alpha_{2j+1}, \alpha_{2j+2}), j = 0, \dots, [m/2] - 1\}$ ,

$E''_T = E_T \setminus E'_T$ .

Следующая теорема описывает большой класс полиномиальных инвариантов.

**Теорема 1.** Пусть  $C(\mathbf{G})$  – множество всех четных простых циклов графа  $\mathbf{G}$ , а  $T(\mathbf{G})$  – множество всех подграфов графа  $\mathbf{G}$ , состоящих из двух нечетных простых циклов, соединенных простой цепью. Тогда

$$\{f_C(\Sigma), f_T(\Sigma), C \in C(\mathbf{G}), T \in T(\mathbf{G})\} \subset I_{k,n}^G.$$

*Доказательство.* Рассмотрим случай  $k=1$ .

Модель (1) в этом случае имеет вид:

$$X_i = a_i H + Y_i,$$

где  $A = \{a_1, \dots, a_n\}^t$ . Используя независимость  $H$  и  $Y$ , получаем для  $(i, j) \notin E$

$$\sigma_{ij} = M(X_i X_j) = \tag{4}$$

$$M[(a_i H + Y_i)(a_j H + Y_j)] = a_i a_j.$$

Пусть  $C = (V_C, E_C)$  – четный простой цикл графа  $\mathbf{G}$ , причем  $V_C = \{\alpha_i, i = 1, \dots, m\}$ , а

$E_C = \{(\alpha_i, \alpha_{i+1}), i = 1, \dots, m-1, (\alpha_1, \alpha_m)\}$ . Получаем:

$$f_C(\Sigma) = \prod_{(i,j) \in E'_C} \sigma_{ij} - \prod_{(i,j) \in E''_C} \sigma_{ij} =$$

$$\prod_{i=1}^m a_{\alpha_i} - \prod_{j=1}^m a_{\alpha_j} = 0.$$

Пусть  $T = (V_T, E_T)$  – подграф графа  $\mathbf{G}$ , состоящий из простого нечетного цикла с множеством ребер  $E_1 = \{(\alpha_1, \alpha_2), \dots, (\alpha_{m_1-1}, \alpha_{m_1})\}$ , простой цепи с множеством ребер

$E_2 = \{(\alpha_{m_1}, \alpha_{m_1+1}), \dots, (\alpha_{m_2-1}, \alpha_{m_2})\}$  и простого нечетного цикла с множеством ребер  $E_3 = \{(\alpha_{m_2}, \alpha_{m_2+1}), \dots, (\alpha_{m-1}, \alpha_m), (\alpha_m, \alpha_{m_2})\}$ . Получаем

$$f_T(\Sigma) = \prod_{(i,j) \in E'_T \cap (E_1 \cup E_3)} \sigma_{ij} - \prod_{(i,j) \in E'_T \cap E_2} \sigma_{ij}^2 -$$

$$\prod_{(i,j) \in E''_T \cap (E_1 \cup E_3)} \sigma_{ij} - \prod_{(i,j) \in E''_T \cap E_2} \sigma_{ij}^2 =$$

$$\prod_{i=1}^{m_1-1} a_{\alpha_i} \prod_{j=m_1}^{m_2} (a_{\alpha_j})^2 \prod_{l=m_1+1}^m a_{\alpha_l} -$$

$$\prod_{i=1}^{m_1-1} a_{\alpha_i} \prod_{j=m_1}^{m_2} (a_{\alpha_j})^2 \prod_{l=m_1+1}^m a_{\alpha_l} = 0.$$

Таким образом, для  $k=1$  теорема доказана. Рассмотрим общий случай. Обозначим

$$\mathbf{X}_i = \{X_{i_1}, \dots, X_{i_k}\}^t, \quad \mathbf{Y}_i = \{Y_{i_1}, \dots, Y_{i_k}\}^t,$$

$$\mathbf{a}_i = \{a_{i_1}, \dots, a_{i_k}\}^t, \quad A_i = \{\mathbf{a}_{i_1}, \dots, \mathbf{a}_{i_k}\}^t.$$

Легко видеть, что

$$\mathbf{X}_i = A_i \mathbf{H} + \mathbf{Y}_i, \quad \mathbf{i} \in \mathbf{V}.$$

Для непересекающихся  $\mathbf{i}$  и  $\mathbf{j}$  получаем

$$\Sigma_{ij} = M[\mathbf{X}_i \mathbf{X}_j^t] =$$

$$M[(A_i \mathbf{H} + \mathbf{Y}_i)(A_j \mathbf{H} + \mathbf{Y}_j)^t] = A_i (A_j)^t.$$

Таким образом,  $\Sigma_{ij} = A_i (A_j)^t$  для непересекающихся  $\mathbf{i}$  и  $\mathbf{j}$ . Получаем, что

$$|\Sigma_{ij}| = |A_i| |A_j|^t = |A_i| |A_j|, \quad (\mathbf{i}, \mathbf{j}) \in \mathbf{E}. \tag{5}$$

Очевидно, что соотношение (5) аналогично соотношению (4). Таким образом, подставляя в полученных полиномиальных инвариантах для случая  $k=1$  вместо ковариаций  $\sigma_{ij}$  соответствующие миноры  $|\Sigma_{ij}|$ , получаем требуемый результат.

Пусть  $\mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_{k-1}\}$  и  $\mathbf{d} = \{d_1, \dots, d_{k-1}\}$ ,  $\mathbf{m}$  и  $\mathbf{d}$  не пересекаются,  $i_1 \neq i_2 \neq i_3$ ,  $\{i_1, i_2, i_3\} \notin \mathbf{m} \cup \mathbf{d}$ , и пусть граф  $\mathbf{G}$  содержит цикл с множеством ребер

$$\{(\langle i_1, \mathbf{m} \rangle, \langle i_2, \mathbf{d} \rangle), (\langle i_3, \mathbf{m} \rangle, \langle i_2, \mathbf{d} \rangle),$$

$$\langle i_3, \mathbf{m} \rangle, \langle i_1, \mathbf{d} \rangle), (\langle i_2, \mathbf{m} \rangle, \langle i_1, \mathbf{d} \rangle),$$

$$\langle i_2, \mathbf{m} \rangle, \langle i_3, \mathbf{d} \rangle), (\langle i_1, \mathbf{m} \rangle, \langle i_3, \mathbf{d} \rangle)\}.$$

Тогда, используя теорему 1, получаем следующий инвариант

$$|\Sigma_{\langle i_1 \mathbf{d} \rangle \langle i_2 \mathbf{m} \rangle} \parallel \Sigma_{\langle i_3 \mathbf{d} \rangle \langle i_1 \mathbf{m} \rangle} \parallel \Sigma_{\langle i_2 \mathbf{d} \rangle \langle i_3 \mathbf{m} \rangle} | -$$

$$|\Sigma_{\langle i_3 \mathbf{d} \rangle \langle i_2 \mathbf{m} \rangle} \parallel \Sigma_{\langle i_2 \mathbf{d} \rangle \langle i_1 \mathbf{m} \rangle} \parallel \Sigma_{\langle i_1 \mathbf{d} \rangle \langle i_3 \mathbf{m} \rangle} | = 0.$$

Например, в случае  $k=2$  и  $n=5$  этот инвариант имеет вид:

$$f_C^{2,5} = \begin{vmatrix} \sigma_{12} & \sigma_{32} \\ \sigma_{14} & \sigma_{34} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \sigma_{12} & \sigma_{52} \\ \sigma_{13} & \sigma_{53} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \sigma_{12} & \sigma_{42} \\ \sigma_{15} & \sigma_{45} \end{vmatrix} - \\ \begin{vmatrix} \sigma_{12} & \sigma_{52} \\ \sigma_{14} & \sigma_{54} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \sigma_{12} & \sigma_{42} \\ \sigma_{13} & \sigma_{43} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \sigma_{12} & \sigma_{32} \\ \sigma_{15} & \sigma_{35} \end{vmatrix}.$$

Инвариант  $f_C^{2,5}$  является произведением  $\sigma_{12}$  и пентады.

Пусть  $S$  – выборочная матрица ковариаций. Для проверки нулевой гипотезы  $H_f: f(\Sigma) = 0$  можно использовать статистику  $f(S)$  [Drton et al., 2008]. Обозначим через  $Var_{\Sigma}(f(S))$  дисперсию  $f(S)$ . Дисперсия  $Var_{\Sigma}(f(S))$  является полиномом, который зависит от элементов матрицы  $\Sigma$ . Заменяя матрицу  $\Sigma$  оценкой  $S$ , получаем оценку для дисперсии статистики  $Var_S(f(S))$ . В условиях нулевой гипотезы стандартизованная статистика

$$\frac{f(S)}{\sqrt{Var_S(f(S))}}$$

асимптотически имеет стандартное нормальное распределение.

#### Литература

Стафеев С. В. Факторный анализ с зависимыми остатками: проблема идентифицируемости и оценка параметров // Труды ИПМИ КарНЦ РАН. 2005. Вып. 6. С. 119–130.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

**Стафеев Сергей Вячеславович**  
научный сотрудник, к. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: stafeev@krc.karelia.ru  
тел.: (8142) 763370

Стафеев С. В. О параметрической идентифицируемости модели факторного анализа с зависимыми факторами и остатками // Труды ИПМИ КарНЦ РАН. 2006. Вып. 7. С. 63–80.

Стафеев С. В. О полиномиальных инвариантах для графовых моделей с латентными переменными // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2009. Т. 14. Вып. 6. С. 1058–1064.

Drton M., Massam H., Olkin I. Moments of minors of Wishart Matrices // Annals of Statistics. 2008. Vol. 36. P. 2261–2283.

Drton M., Sturmfels B., Sullivant S. Algebraic factor analysis: tetrads, pentads and beyond // Probability Theory and Related Fields. 2007. Vol. 138. P. 463–493.

Drton M., Sullivant S. Algebraic statistical models // Statistica Sinica. 2007. Vol. 17. P. 1273–1297.

Harman H. Modern Factor Analysis. University of Chicago Press, third edition, 1976. 450 p.

Loera J. A., Sturmfels B., Thomas R. R. Grobner bases and triangulations of the second hypersimplex // Combinatorica. 1995. Vol. 15. P. 409–424.

Stafeev S. V. On factor analysis models with correlated residuals // Extended Abstracts of Russian – Scandinavian Symposium «Probability theory and applied probability». Petrozavodsk, 2006. P. 59–61.

Stafeev S. V. On the parameter estimation of recursive «bow – free» models with latent variables // Proceedings of the Eighth International Minsk Conference Computer Data Analysis and Modeling: Complex Stochastic Data and Systems. Minsk, 2007. Vol. 1. P. 178–181.

#### Stafeev, Sergey

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: stafeev@krc.karelia.ru  
tel.: (8142) 763370

УДК 517.954, 517.929.7, 519.633.6

## СХОДИМОСТЬ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ МОРСКОГО ЛЬДА

**И. А. Чернов**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

В статье рассматривается локально-одномерная модель термодинамики морского льда, представляющая собой краевую задачу теплопроводности со свободной границей и нелинейными граничными условиями. Для этой задачи построена неявная разностная схема; доказана равномерная по отношению к шагам сетки ограниченность сеточного решения и его производных и вытекающая из этого сходимости сеточного решения к обобщенному решению задачи. Отдельной трудностью является граничное условие I рода на границе вода-лед: рассматривается последовательность задач с условиями III рода и соответствующий предельный переход.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** термодинамика морского льда, краевые задачи теплопроводности, задача Стефана, свободная граница, сходимости разностных схем.

### **I. A. Chernov. CONVERGENCE OF THE DIFFERENCE SCHEME FOR THE MODEL OF SEA ICE THERMAL DYNAMICS**

We consider the locally one-dimensional model of thermal dynamics of sea ice. This is a boundary-value problem of heat conduction with a free boundary and nonlinear boundary condition. For this problem we construct the lattice numerical method and prove that the lattice solution and its lattice derivatives are bounded uniformly with respect to the lattice steps. This implies the convergence of the lattice solution to the weak solution to the boundary-value problem. A difficulty is the Dirichlet boundary condition of the water-ice boundary: we consider a sequence of problems with Neumann conditions with consequent passing to limit.

**Key words:** thermal dynamics of sea ice, boundary-value problems of heat conduction, the Stefan problem, free boundary, convergence of lattice methods.

---

### **Введение**

Термодинамика морского льда (процессы таяния и намерзания льда) обычно описывается локально-одномерными моделями [Maykut, Untersteiner, 1971]. Это связано с крупномасштабностью процессов в океане (море), в ре-

зультате чего поля температур и потоков теплоты и массы можно с высокой точностью приближать кусочно-постоянными полями. Мы рассматриваем локально-одномерную модель термодинамики льда при ряде упрощений. Она представляет собой краевую задачу для уравне-



ния теплопроводности со свободной границей. Свободной границей является поверхность раздела вода-лед, на которой ставятся граничное условие I рода и условие сохранения количества вещества – условие типа Стефана. Потоки теплоты на границах вода-лед и воздух-лед задаются и являются достаточно произвольными нелинейными монотонными функциями температуры льда на указанных поверхностях. Таким образом, имеем параболическую краевую задачу со свободной границей, нелинейными граничными условиями III рода и Стефана и граничным условием I рода. Свободную границу «выпрямляем» заменой переменных. Условие I рода заменяем последовательностью условий III рода с малым параметром при производной. Строим разностную схему и доказываем ее сходимости к обобщенному решению задачи [Ладженская, 1973]. Предельный переход по малому параметру дает решение исходной задачи.

### Постановка задачи

Пусть ось  $z$  направлена вниз, за ноль принимаем верхнюю поверхность льда. Толщина льда –  $b(t)$ , температура –  $T(t, z)$ . Не учитываем солнечную радиацию и осадки, а также считаем температуру воздуха достаточно низкой, так что верхняя поверхность льда не меняется. Тогда распределение температуры льда описывается следующей краевой задачей со свободной границей [Maykut, Untersteiner, 1971]:

$$\partial_t T = a \partial_z^2 T, \quad z \in (0, b(t)), \quad t \in (0, \hat{t}), \quad (1)$$

$$a \partial_z T(t, 0) = -f_s(t, T(t, 0)), \quad (2)$$

$$T(t, b(t)) = \bar{T}, \quad (3)$$

$$\dot{b} = -f_b(t, T(t, b)) + a \partial_z T(t, b(t)), \quad b \geq \hat{b} > 0, \quad (4)$$

$$T(0, z) = T_0(z), \quad b(0) = b_0. \quad (5)$$

Здесь  $a$  – коэффициент теплопроводности. Температура льда не может быть выше точки плавления  $\bar{T}$ , которая зависит от солёности. Будем пока считать ее постоянной. На верхней поверхности задан тепловой поток  $f_s(t, T)$ . Считаем, что  $f_s(t, T)$  (непрерывно дифференцируемый с ограниченным градиентом) монотонно убывает по  $T$ ,  $f_s(t, \bar{T}) < 0$ ,  $f_s(t, -\infty) > 0$ . На границе вода-лед температура равна точке плавления – граничное условие I рода. Поток тепла (положительный или отрицательный)  $f_b(t, T)$  задается, его свойства аналогичны  $f_s(t, T)$ . Положительная разница между приходящим теплом и диффузионным оттоком от поверхности

вглубь льда идет на компенсацию скрытой теплоты таяния льда (удельную теплоту таяния единицы объема считаем единичной); аналогично отрицательная разница компенсирует тепловыделение при кристаллизации. Закон сохранения энергии приводит к условию типа Стефана (4). Таким образом, свободная граница может двигаться в обоих направлениях (утолщение либо вымывание льда), однако считаем, что при достижении минимально возможной толщины  $\hat{b}$  лед исчезает; во всяком случае, его эволюция описывается уже другими моделями. Также лед не может превышать некоторую предельную толщину  $\bar{b}$ . Итак, далее всюду  $b \in [\hat{b}, \bar{b}]$ .

С целью устранить свободные границы сделаем замену переменной по формулам  $U(t, x) = T(t, z)$ ,  $z = bx$ ,  $b \partial_z = \partial_x$ ,  $\partial_t T = \partial_t U - \partial_x U x b^{-1} \dot{b}$ . Получим задачу на  $[0, 1]$  с дополнительным слагаемым в правой части уравнения теплопроводности. Граничное условие первого рода осложняет исследование задачи, поэтому заменим «жесткие» условия I рода последовательностью условий III рода (8) с параметром  $\alpha_b$ ; кроме того, допустим зависимость коэффициента  $a$  от времени (требуя гладкости, ограниченности вместе с производной и отделенности от нуля):

$$b^2 \partial_t U = a(t) \partial_x^2 U + \partial_x U x b \dot{b}, \quad x \in (0, 1), \quad (6)$$

$$a(t) \partial_x U(t, 0) = -b f_s(t, U(t, 0)), \quad (7)$$

$$a(t) \partial_x U(t, 1) = -\alpha_b b (U(t, 1) - \bar{T}), \quad (8)$$

$$\dot{b} = -f_b(t, U(t, 1)) - \alpha_b (U(t, 1) - \bar{T}), \quad (9)$$

$$U(0, x) = T_0(b_0 x), \quad b(0) = b_0. \quad (10)$$

### Разностные аппроксимации

Введем в  $[0, 1] \times [0, \hat{t}]$  равномерную сетку  $\bar{D}_N$  с шагами  $h$  и  $\tau$ , индекс  $i$  меняется от 0 до  $I$ , индекс  $n$  – от 0 до  $N$ . Введем обозначения  $U_n^i = U(t_n, x_i)$  и аналогичные. Коэффициенты уравнения (6) и правую часть (9) аппроксимируем на предыдущем слое, остальные величины – на текущем. Исключая граничные узлы, получаем множество  $D_N$  узлов. Границу обозначим  $\partial \bar{D}_N$ . Введем обозначения для сеточных производных  $\partial_\tau U_n^i = (U_n^i - U_{n-1}^i) / \tau$ ,  $\partial_h U_n^i = (U_n^{i+1} - U_n^i) / h$ ,  $\partial_h^2 U_n^i = \partial_h \partial_h U_n^{i-1}$ . Представим выражение  $-(f_b(n\tau, U_{n-1}^i) + \alpha_b (U_{n-1}^i - \bar{T})) \dot{b}_n = B_n^+ + B_n^-$ , где  $B_n^+ \geq 0$ ,  $B_n^- \leq 0$ .

Заменяя производные сеточными аналогами, получим неявную схему

$$b_n^2 \partial_\tau U_n^i = a_n \partial_h^2 U_n^i + ih \partial_h U_n^i B_n^+ + ih \partial_h U_n^{i-1} B_n^- \quad (11)$$

$$a_n \partial_h U_n^0 = -b_n f_s(n\tau, U_n^0), \quad (12)$$

$$a_n \partial_h U_n^{I-1} = -\alpha_b b_n (U_n^I - \bar{T}), \quad (13)$$

$$\partial_\tau b_{n+1} = -f_b(n\tau, U_{n-1}^I) - \alpha_b (U_{n-1}^I - \bar{T}), \quad (14)$$

$$U_0^i = T_0(b_0 ih). \quad (15)$$

Эта разностная схема имеет первый порядок аппроксимации.

### Принцип максимума для сеточной задачи

Докажем аналог принципа максимума для параболических задач и ряд следствий. Экстремумы далее могут быть нестрогими.

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Пусть сеточная функция  $U_n^i$  определена в  $\bar{D}_N$  и удовлетворяет (11)–(15). Тогда она ограничена в  $\bar{D}_N$  равномерно по  $h$ ,  $\tau$  и  $\alpha_b$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть  $U_n^i$  достигает минимального значения в узле  $(n, i) \in D_N$ . Применим (11). Левая часть неположительна, все слагаемые правой части неотрицательны. Противоречие не возникает только если  $U_n^i = U_n^{i+1}$ . Применяя рассуждение к узлу  $(n, i+1)$  и далее, получаем, что если достаточно малый минимум достигается в объеме, то он достигается и на границе также. В узлах вида  $(n, I)$  применим граничное условие (13): при  $U_n^i < \bar{T}$  имеем  $U_n^{I-1} < U_n^I$ , что противоречит минимальности. Аналогично рассуждение для узлов  $(n, 0)$  (с применением (12)). Если же минимальное значение достигается при  $n=0$ , то оно ограничено, причем оценка зависит только от начальных условий. Доказательство для максимума совершенно аналогично.

Пусть  $U_n^i$  удовлетворяет (11)–(15) в  $\bar{D}_N$ . Обозначим через  $\bar{D}_N' \subset \bar{D}_N$  множество, на котором определена сеточная производная  $\partial_h U_n^i$ . Введем также  $D_N'$  аналогично  $D_N$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Пусть  $U_n^i$  удовлетворяет (11)–(15) в  $\bar{D}_N$  при достаточно малых  $h$  и  $\tau$ . Тогда  $\partial_h U_n^i$  ограничена в  $\bar{D}_N'$  равномерно по  $h$  и  $\tau$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Сначала убедимся, что значения  $\partial_h U_n^i$  на границе  $\bar{D}_N'$  равномерно ограничены. Для узлов вида  $(n, 0)$ ,  $(n, I-1)$  это сразу следует из граничных условий (12), (13) и утверждения (1). Для начальных узлов вида  $(0, i)$  в силу (15)  $\partial_h U_0^i = b_0 \partial_x T_0(b_0(x_i + \theta))$ , где  $0 \leq \theta \leq h$ , и потому ограничена. Произведем сеточное дифференцирование уравнения (11) по  $h$  с учетом  $\partial_h U_n^{i+1} = \partial_h U_n^i + \partial_h \partial_h U_n^i h$ :

$$b_n^2 \partial_\tau \partial_h U_n^i = a_n \partial_h^2 \partial_h U_n^i + (i+1)h B_n^+ \partial_h \partial_h U_n^i + ih B_n^- \partial_h \partial_h U_n^{i-1} + B_n^+ \partial_h U_n^i + B_n^- \partial_h U_n^i.$$

Введем следующую сеточную функцию рекуррентно:  $M_n = M_{n-1} (1 - \tau b_n^{-2} B_n^+)^{-1}$ ,  $M_0 = 1$ . Эта функция – сеточный аналог экспоненты:  $\partial_\tau M_n = B_n^+ b_n^{-2} M_n$ . Пусть  $V_n^i = \partial_h U_n^i / M_n$  и перепишем уравнение в виде

$$b_n^2 \frac{M_{n-1}}{M_n} \partial_\tau V_n^i = a_n \partial_h^2 V_n^i + (i+1)h B_n^+ \partial_h V_n^i + ih B_n^- \partial_h V_n^{i-1} + B_n^- V_n^i.$$

Так как  $B_n^+ b_n^{-2}$  ограничено, то при достаточно малом  $\tau$  (обеспечивающем положительность знаменателя) функция  $M_n \geq 1$ . Поэтому минимальное и максимальное значения функции  $V_n^i$  не достигаются в  $D_N'$ : в противном случае левая и правая части уравнения имеют разные знаки. Возможен только нестрогий экстремум, достигаемый и на границе. Однако значения  $\partial_h U_n^i$ , а следовательно, и  $V_n^i$ , равномерно ограничены на границе, так что  $V_n^i$  равномерно ограничена в  $\bar{D}_N$ . Отсюда следует и равномерная ограниченность функции  $\partial_h U_n^i = M_n V_n^i$ . В самом деле, при  $\tau \leq \tau_0$

$$M_n \leq (1 - \mu\tau)^{-i/\tau} \leq (1 - \mu\tau_0)^{-i/\tau_0},$$

где  $\mu = \max B^+$ . Здесь использована монотонность функции  $(1-x)^{-1/x}$  при  $x \in (0, 1)$ .

Пусть  $U_n^i$  удовлетворяет (11)–(15) в  $\bar{D}_N$ . Обозначим через  $\bar{D}_N^o \subset \bar{D}_N$  множество, на котором определена сеточная производная  $\partial_t U_n^i$ . Введем также  $D_N^o$  аналогично  $D_N$ .

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Пусть  $U_n^i$  удовлетворяет (11)–(15) в  $\bar{D}_N$  при достаточно малых  $h$  и  $\tau$ . Тогда  $\partial_t U_n^i$  ограничена в  $\bar{D}_N$  равномерно по  $h$  и  $\tau$ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Сеточное дифференцирование по  $\tau$  уравнения (11) приводит к соотношению, содержащему следующие слагаемые:

1. Слагаемое с производной  $\partial_t \partial_t U_n^i$  в левой части, положительное, если  $\partial_\tau U_n^i$  – максимальное значение;

2. Слагаемые с производными  $\partial_h^2 \partial_t U_n^i$ ,  $\partial_h \partial_t U_n^i$  и  $\partial_h \partial_t U_n^{i-1}$  в правой части, отрицательные, если  $\partial_\tau U_n^i$  – максимальное значение;

3. Слагаемые с производными  $\partial_\tau B_n^+$ ,  $\partial_\tau B_n^-$  в правой части и  $\partial_\tau b_n$  в левой, которое перенесем в правую часть;

4. Слагаемое  $\partial_\tau a_n \partial_h^2 U_n^i$  в правой части.

Коэффициенты при указанных величинах равномерно ограничены, что следует из доказанных выше утверждений. Слагаемое пункта 4 заменим, выразив  $\partial_h^2 U_n^i$  из (11); получим слагаемое  $\partial_t a \partial_\tau U_n^i / a_n$ , где производная от  $a$  – в средней точке, а также несколько ограниченных слагаемых. Сеточные производные коэффициентов из пункта 3 преобразуем следующим образом:

$$\partial_\tau B_n^+ = B_t^+ + B_b^+ \partial_\tau b_n + B_U^+ \partial \tau U_{n-1}^i,$$

аналогично  $\partial_\tau B_n^-$ . Здесь величины  $B_t^+$ ,  $B_b^+$ ,  $B_U^+$  ограничены независимо от шагов сетки; в случае непрерывности производных коэффициентов это – производные в средних точках. Поэтому первые два слагаемые ограничены независимо от шагов сетки.

Предположим, что  $\partial_\tau U_n^i$  – максимальное значение, и оценим слагаемые, содержащие сеточные производные функции  $U_n^i$  по  $\tau$ . Они в совокупности оцениваются величиной  $(\partial_t a / a_n + Y) \partial_\tau U_n^i$ , где  $Y$  определяется оценками коэффициентов при сеточных производных функции  $U_n^i$  по  $\tau$ . Без ограничения общности можно считать, что  $(\partial_t a / a_n + Y) < 0$  и отделена от нуля. В противном случае сделаем замену переменных  $\theta = Y^{-1} \exp(t - 2\hat{t})$ ,  $y = \exp(-2\hat{t})x / Y$ . Для простоты пусть в исходных переменных  $a = \text{const}$ . Оценка  $Y$  коэффициентов не изменится в новых переменных, а указанное неравенство будет выполнено. Тогда при достаточно большом положительном значении  $\partial_\tau U_n^i$  сумма слагаемых, содержащая сеточные производные функции  $U_n^i$  по  $\tau$ , будет отрицательной и дос-

точно большой по абсолютной величине. Таким образом, правая часть отрицательна, если  $\partial_\tau U_n^i$  – достаточно большое положительное максимальное значение. Левая часть – неотрицательна, что приводит к противоречию. Поэтому  $\partial_\tau U_n^i$  не может принимать в  $D_N^o$  слишком больших значений, т. е. ограничена сверху. Отметим, что оценка не зависит от шагов сетки, а только от коэффициентов уравнения и интервала времени. Рассуждение для минимума дословно такое же.

Осталось проверить граничные узлы. Для  $n=1$  рассмотрим (11) с учетом  $U_1^i = U_0^i + \partial_\tau U_1^i$ :

$$b_1^2 \partial_\tau U_1^i = a_1 \partial_h^2 U_0^i + ih \partial_h U_0^i B_1^+ + ih \partial_h U_0^{i-1} B_1^- + + \tau (a_1 \partial_h^2 \partial_\tau U_1^i + ih \partial_h \partial_\tau U_1^i B_1^+ + ih \partial_h \partial_\tau U_1^{i-1} B_1^-).$$

Если  $\partial_\tau U_1^i$  – максимальное (минимальное) значение, то выражение в скобках справа неположительно (неотрицательно). Применяя теорему о среднем к сеточным производным от начального распределения, получаем с учетом ограниченности начального распределения в  $C^2([0, b_0])$ , что  $\partial_\tau U_1^i$  ограничено независимо от шагов.

Для  $i=0$  продифференцируем на сетке условие (12):

$$\partial_h \partial_\tau U_n^0 = - \partial_\tau \left( \frac{b_n}{a_n} \right) f_s(n\tau, U_n^0) - \frac{b_{n-1}}{a_{n-1}} (\partial_t f_s + \partial_U f_s \partial_\tau U_n^0).$$

С учетом ограниченности частных производных (они в средних точках) и коэффициентов, а также монотонности  $f_s(t, U)$  по второму аргументу, получаем, что  $\partial_h \partial_\tau U_n^0 > 0$  при достаточно большом значении  $\partial_\tau U_n^0$ , что противоречит максимальнойности. Для минимума доказательство дословно повторяется. Случай  $i=I$  рассматривается аналогично (с помощью условия (13)).

В итоге получаем, что функция  $\partial_\tau U_n^i$  ограничена в  $\bar{D}_N^o$  равномерно относительно шагов сетки  $h$  и  $\tau$ .

Для решения системы (11)–(15) применим стандартный метод прогонки. На каждом слое времени вычисляется  $b_n$  из (14), затем прогнозные коэффициенты для линейных уравнений (11) и (13), и в (12) выражаем  $U_n^1$  через  $U_n^0$  с помощью найденных коэффициентов. Получа-

ется одно нелинейное уравнение для  $U_n^0$ . Найдём  $U_n^0$  и далее обратной прогонкой определяем последовательно  $U_n^i$ .

### Сходимость аппроксимаций и обобщенное решение

Итак, сеточные функции  $U_n^i$  равномерно ограничены независимо от шагов сетки вместе со своими сеточными производными  $\partial_h U_n^i$  и  $\partial_\tau U_n^i$ . Построим в  $\Pi = [0, \hat{t}] \times [0, 1]$  функцию  $\tilde{U}(t, x)$  сплайновой интерполяцией первого порядка сеточной функции  $U_n^i$ .

По построению  $\tilde{U}(t, x) \in H_1(\Pi)$  (соболевское пространство функций, обладающих первыми обобщенными производными из  $L_2(\Pi)$  [Ладыженская, 1973; Михайлов, 1976] при любых (достаточно малых) шагах  $h$  и  $\tau$ , причем семейство  $\tilde{U}(t, x)$  ограничено по норме  $H_1(\Pi)$ . Выберем последовательность шагов  $(h_k, \tau_k)$ , сходящуюся к нулю, и соответствующую последовательность  $\tilde{U}_k(t, x)$ . Она ограничена в гильбертовом пространстве  $H_1(\Pi)$ , поэтому можно выделить слабо сходящуюся подпоследовательность, за которой сохраним прежнее обозначение  $\tilde{U}_k(t, x)$ ; ее предел обозначим  $U(t, x) \in H_1(\Pi)$ . При этом обобщенные производные от  $\tilde{U}_k(t, x)$  сходятся к таковым от предела. Эта функция непрерывна, так как равномерно ограниченные непрерывные члены последовательности  $\tilde{U}_k(t, x)$ , обладая равномерно ограниченными кусочно-постоянными производными, равномерно непрерывны, что влечет равномерную сходимость (возможно, после перехода к подпоследовательности – теорема Арцела).

Функции  $\tilde{b}_k(t)$ , полученные сплайновой интерполяцией первого порядка сеточных функций  $b_n$ , равномерно ограничены и равномерно непрерывны, поскольку обладают равномерно ограниченными (в силу ограниченности правой части (14)) кусочно-постоянными производными. Переходя к подпоследовательности (теорема Арцела), получаем непрерывную функцию  $b(t)$ .

Назовем пару функций  $U(t, x) \in H_1(\Pi)$ ,  $b(t) \in C([0, \hat{t}])$  обобщенным решением [Лады-

женская, 1973; Михайлов, 1976] краевой задачи (6)–(10), если  $U(t, x)$  и  $b(t)$  удовлетворяют интегральному тождеству

$$\begin{aligned} & \int_0^1 V(0, x) T_0(b_0, x) dx + \int_{\Pi} U \partial_t V dx dt = \\ & = \int_{\Pi} \frac{a}{b^2} \partial_x U \partial_x V dx dt - \int_0^{\hat{t}} \frac{V(t, 0)}{b} f_s(t, U(t, 0)) dt - \\ & - \int_{\Pi} U \partial_x (xV) \frac{f_b(t, U(t, 1))b - a \partial_x U(t, 1)}{b^2} dx dt = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

при любой непрерывной  $V(t, x) \in H_1(\Pi)$ , такой, что  $V(\hat{t}, x) = 0$  и  $V(t, 1) = 0$ , и тождествам

$$b(t) = b_0 - \int_0^{\hat{t}} \left( f_b(t, U(t, 1)) - \frac{a}{b} \partial_x U(t, 1) \right) dt, \quad (17)$$

$$\int_0^{\hat{t}} \left( a(t) \partial_x U(t, 1) + \alpha_b b(U(t, 1) - \bar{T}) \right) w(t) dt = 0 \quad (18)$$

для любой непрерывно дифференцируемой функции  $w(t)$ .

Построенные функции  $U(t, x)$  и  $b(t)$  образуют обобщенное решение в смысле данного определения: на аппроксимациях тождества выполняются с погрешностью  $O(h, \tau)$ , равномерная сходимость аппроксимаций позволяет перейти к пределам  $\tilde{b}_k(t) \rightarrow b(t)$ ,  $\tilde{U}_k(t, x) \rightarrow U(t, x)$ , а слабая сходимость – к пределам

$$\partial_x \tilde{U}_k(t, 0) \rightarrow \partial_x U(t, 0), \quad \partial_x \tilde{U}_k(t, 1) \rightarrow \partial_x U(t, 1).$$

Поскольку в исходной задаче имелось краевое условие I рода (3), то следует перейти к пределу при  $\alpha_b \rightarrow +\infty$ . Интуитивно ясно, что это повлечет  $U(t, 0) = \bar{T}$ , покажем это.

Достаточно показать, что

$$\begin{aligned} & \int_0^{\hat{t}} a \partial_x U(t, 1) w(t) dt = \\ & = \int_0^{\hat{t}} \left( a \partial_x U(t, 0) + \int_0^1 a \partial_x^2 U(t, x) dx \right) w(t) dt = \\ & = \int_0^{\hat{t}} a \partial_x U(t, 0) w(t) dt + \int_0^{\hat{t}} \int_0^1 w(t) \partial_t U(t, x) dx dt = \\ & = \int_0^{\hat{t}} a \partial_x U(t, 0) w(t) dt - \int_0^{\hat{t}} \int_0^1 \partial_t w(t) U(t, x) dt dx + \\ & + \int_0^1 (w(\hat{t}) U(\hat{t}, x) - w(0) U(0, x)) dx \end{aligned}$$

ограничено; выкладку следует понимать на аппроксимациях с последующим переходом к пределу. Ограниченность левой части следует из

ограниченности всех слагаемых правой части:  $U(t, x)$  ограничено, а  $\partial_x U(t, 0)$  ограничено в силу ограниченности  $U(t, x)$  и (7). Тождество (18), таким образом, при  $\alpha_b \rightarrow +\infty$  дает  $U(t, 1) = \bar{T}$  в силу основной леммы вариационного исчисления.

Отметим, что построенная свободная граница  $b(t)$  является абсолютно непрерывной, поэтому обратная замена переменных является гладкой. Пару непрерывных функций  $T(t, z)$ ,  $b(t)$  назовем обобщенным решением исходной задачи, если  $T(t, b(t)) = \bar{T}$  и соответствующая пара  $U(t, x)$  и  $b(t)$  удовлетворяет тождествам (16) и (17) при любой непрерывной  $V(t, x) \in H_1(\Pi)$ , такой, что  $V(\hat{t}, x) = 0$  и  $V(t, 1) = 0$ . Полученная обратной заменой из построенной функции  $U(t, x)$  функция  $T(t, z)$  в паре с построенной функцией  $b(t)$  является обобщенным решением в смысле данного определения.

### Выводы

Таким образом, мы построили неявную разностную схему для краевой задачи III рода термодинамики морского льда и доказали ее сходи-

мость к обобщенному решению задачи. Тем самым доказано существование обобщенного решения этой краевой задачи со свободной границей, нелинейными граничными условиями III рода. Доказано также существование решения задачи с граничным условием I рода, представляющим особую сложность в силу своей «жесткости». Поскольку порядки величин тепловых потоков известны, предложенная схема может применяться для решения задачи при достаточно большом параметре  $\alpha_b$  (таком, чтобы отличия температуры на границе вода-лед от точки замерзания были малы сравнительно с точностью модели).

### Литература

*Maykut G. A., Untersteiner N.* Some Results from a Time-Dependent Thermodynamic Model of Sea Ice // Journal of Geophysical Research. 1971. Vol. 76, N 6. P. 1550–1575.

*Ладыженская О. А.* Краевые задачи математической физики. М.: Наука, 1973. 408 с.

*Михайлов В. П.* Дифференциальные уравнения в частных производных. М.: Наука, 1976. 391 с.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

#### Чернов Илья Александрович

старший научный сотрудник, к. ф.-м. н.  
Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН  
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910  
эл. почта: IACHernov@yandex.ru  
тел.: (8142) 766312

#### Chernov, Ilya

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science  
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia  
e-mail: IACHernov@yandex.ru  
tel.: (8142) 766312

УДК 512.2

## О НОВОМ МНОГОМЕРНОМ СТАТИСТИЧЕСКОМ КРИТЕРИИ ОДНОРОДНОСТИ ДВУХ ВЫБОРОК

**С. П. Чистяков**

*Институт прикладных математических исследований  
Карельского научного центра РАН*

В статье предложен многомерный статистический критерий однородности (являются ли две выборки выборками из одного и того же многомерного распределения). Критерий основан на понятиях многомерной квантильной функции, множеств минимального объема и одноклассовом методе опорных векторов. Статистика критерия фактически представляет собой статистику критерия о равенстве параметра биномиального распределения определенному значению. Проведено экспериментальное сравнение критерия с некоторыми другими статистическими критериями однородности, такими как критерий Хотеллинга, многомерный ранговый критерий и ядерный критерий Крамера. Для проведения экспериментов использовался пакет **R** – свободно распространяемое программное обеспечение для статистических вычислений и графики, доступное на многих платформах.

**К л ю ч е в ы е с л о в а :** многомерные критерии однородности, многомерная квантильная функция, множества минимального объема, одноклассовый метод опорных векторов.

### **S. P. Chistiakov. ON A NEW MULTIVARIATE STATISTICAL HOMOGENEITY TEST**

In this paper a multivariate homogeneity test (of whether two sets of observations arise from the same distribution) is proposed. The test is based on the concepts of multidimensional quantile function, minimum volume sets, and one-class support vector machines. The test statistic is as a matter of fact, the test statistic for binomial proportions. We conducted experimental comparison of our test with some statistical tests such as Hotelling test, multivariate rank test, and kernel Cramer test. For the experiments we used package **R** – open source environment for statistical computing and graphics which is freely available for most computing platforms.

**К e y w o r d s :** multivariate homogeneity tests, multidimensional quantile function, minimal volume sets, one-class support vector machines.

## Введение

В статье предложен многомерный статистический критерий однородности двух выборок, т. е. критерий проверки нулевой гипотезы о том, что выборки являются выборками из одного распределения. Критерий основан на понятиях многомерной квантильной функции (обобщении понятия квантиля распределения на многомерный случай), множеств минимального объема и одноклассовом методе опорных векторов. Ключевую роль в построении критерия играет одноклассовый метод опорных векторов. Именно, предположим, что имеется случайная выборка из распределения  $P$  на некотором множестве  $X$  и мы хотим построить по данной выборке некоторое «достаточно простое» множество  $C$ , такое, что вероятность его дополнения была бы близка к некоторому заранее фиксированному числу  $\nu$  между 0 и 1. Для решения этой задачи в работе [Scholkopf et al., 1999] был разработан метод, в оригинальной транскрипции носящий название novelty detection, а в отечественной литературе носящий несколько названий: одноклассовая классификация, обнаружение новизны (или нетипичности).

Метод основан на построении функции  $f$ , положительной на множестве  $C$  и отрицательной на его дополнении. Такая функция ищется в классе функций, допускающих представление в виде ядерного разложения по некоторому подмножеству векторов наблюдаемой выборки (называемых опорными векторами). Метод основан на построении гиперплоскости в так называемом (гильбертовом) «спрямляющем» пространстве высокой (возможно бесконечной) размерности, отделяющей выборку от нуля, и алгоритмически сводится к задаче квадратичного (выпуклого) программирования.

Несмотря на сравнительно недавнее появление, метод получил широкое распространение для решения задач обнаружения аномальных наблюдений, особенно для задач обнаружения аномального поведения сложных систем. Учитывая, что задача проверки на аномальность (т. е. на принадлежность данному распределению) является фактически задачей проверки гипотез, в которой вторая выборка состоит из одного наблюдения, естественно предположить, что данный метод может быть использован и для построения многомерных критериев однородности, в которых аномалией уже является целая выборка. Действительно (как показано в статье), использование одноклассового метода

опорных векторов позволяет свести задачу проверки однородности двух многомерных выборок к задаче проверки гипотезы о том, равно ли значение параметра биномиального распределения (вероятность успеха) заданному числу, для которой соответствующий критерий хорошо известен.

Одноклассовый метод опорных векторов реализован в пакете **kernlab** [Karatzoglou et al., 2004], который является открытым пакетом, реализующим ядерные методы машинного обучения в среде **R** – свободно распространяемом программном обеспечении для статистических вычислений и графики, доступном на многих платформах (Linux, Windows, Macintosh). Данный пакет и был использован в проведенных нами экспериментах по сравнению предлагаемого критерия с несколькими другими критериями однородности, такими, как критерий Хотеллинга [Anderson, 2003] (многомерное обобщение критерия Стьюдента), многомерный ранговый критерий [Puri, Sen, 1971] и ядерный критерий Крамера [Baringhaus, Franz, 2004]. Отметим, что данные критерии также реализованы в среде **R** (пакеты **ICSNP** и **cramer**, которые также были нами использованы) и являются, по-видимому, единственными из многомерных критериев однородности реализованными в **R**).

Статья организована следующим образом. В первом разделе приводятся определения основных используемых понятий (многомерные квантильные функции, множества минимального объема) и дано описание предложенного критерия. Второй раздел посвящен экспериментальным результатам. В заключении кратко обсуждаются возможности применения критерия и направления дальнейших исследований.

## Построение критерия

Введем понятия многомерной квантильной функции и множества минимального объема [Einmal et al., 1992]. Пусть  $P$  – некоторое распределение на множестве  $X$  и  $C$  – некоторый класс измеримых подмножеств  $X$ . Далее, пусть  $\lambda(C)$  – некоторая функция, определенная на множествах  $C \in \mathcal{C}$ . Многомерная квантильная функция по отношению к  $(P, \lambda, \mathcal{C})$  определяется как

$$U(\alpha) = \inf\{\lambda(C) : P(C) \geq \alpha, C \in \mathcal{C}\}.$$

Из определения следует, что многомерная квантильная функция фактически измеряет, насколько большое множество необходимо для того, чтобы оно содержало не менее заданной доли рассматриваемого распределения. Обозна-

чим  $C_p(\alpha) \in \mathcal{C}$  (не обязательно единственное) множество, на котором достигается инфимум (если он достижим). Если  $X \subseteq \mathbf{R}^d$  и  $\lambda$  – мера Лебега, то множество  $C_p(\alpha)$  является множеством минимального объема, содержащим не менее доли  $\alpha$  вероятностного распределения  $P$ . Был разработан ряд методов для построения оценок таких множеств по имеющейся выборке из распределения  $P$ . Так в работе [Nolan, 1991] в качестве  $\mathcal{C}$  рассматривался класс эллипсоидов, а в [Tsybakov, 1997] для оценивания  $C_p(\alpha)$  были использованы кусочно-полиномиальные приближения. Множество минимального объема впервые было предложено использовать для построения многомерных критериев, по-видимому, в [Polonik, 1999].

В работе [Scholkopf et al., 1999] был разработан метод обнаружения новизны, позволяющий строить оценки множеств минимального объема. Метод основан на обобщении метода опорных векторов на случай обучающих выборок, содержащих примеры только одного класса. В результате применения метода по случайной выборке  $D_p = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  из распределения  $P$  могут быть построены множества  $C_p^*(\alpha, n)$  такие, что  $P\{C_p^*(\alpha, n)\} \rightarrow P\{C_p^*(\alpha)\}$  при  $n \rightarrow \infty$ . Множество  $C_p^*(\alpha, n)$  определяются условием  $C_p^*(\alpha, n) = \{x \in X \mid f(x) > 0\}$ , где

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(x, x_i), \quad x \in X$$

и  $k(x, x')$  неотрицательно определенная функция, носящая название ядерной функции или ядра. Вектора  $x_i$ , для которых  $\alpha_i \neq 0$ , называются опорными векторами.

Перейдем теперь непосредственно к построению критерия. Пусть  $Q$  – некоторое другое распределение на  $X$  и  $D_Q = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}$  – случайная выборка из распределения  $Q$ . Мы хотим проверить нулевую гипотезу  $H_0: P = Q$ . Обозначим  $S_1 = \#\{x_i \in D_p \mid x_i \in C_Q^*(1/2, m)\}$  – количество элементов выборки  $D_p$ , принадлежащих множеству  $C_Q^*(1/2, m)$  и, аналогично,  $S_2 = \#\{y_i \in D_Q \mid y_i \in C_p^*(1/2, n)\}$  – количество элементов выборки  $D_Q$ , принадлежащих множеству  $C_p^*(1/2, n)$ .

Предположим теперь, что нулевая гипотеза  $H_0: P = Q$  истинна. Тогда нетрудно видеть,

что в случае достаточно больших объемов выборок  $n$  и  $m$  будет справедливо  $P\{C_Q^*(1/2, m)\} \approx Q\{C_p^*(1/2, n)\} \approx 1/2$ .

Следовательно, случайная величина  $S_1$  будет распределена по биномиальному закону с параметрами  $n$  и  $p_1 \approx 1/2$ , а случайная величина  $S_2$  будет распределена по биномиальному закону с параметрами  $m$  и  $p_2 \approx 1/2$ . Поэтому случайная величина  $S = S_1 + S_2$  будет распределена также по биномиальному закону с параметрами  $n + m$  и  $p \approx 1/2$  и для проверки нашей нулевой гипотезы  $H_0: P = Q$  можно использовать критерий для проверки нулевой гипотезы о равенстве параметра биномиального распределения  $p$  значению  $1/2$ . Тестовая статистика хорошо известна [Agresti, 1996]. Именно

$$z = \frac{S - \frac{n+m}{2}}{s},$$

где стандартная ошибка

$$s = \sqrt{\frac{p(1-p)}{n+m}} \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{n+m}}.$$

Хорошо известно, что (в условиях истинности нулевой гипотезы) для больших  $n + m$  статистика  $z$  распределена приближенно по стандартному нормальному закону  $N(0, 1)$ . Нетрудно видеть, что если нулевая гипотеза неверна, то статистика  $S$  будет распределена по биномиальному закону с параметрами  $n + m$  и  $p < 1/2$ . Поэтому критическую область критерия целесообразно определить как  $z < t_\alpha$ , где  $t_\alpha$  – квантиль уровня  $\alpha$  стандартного нормального закона.

### Экспериментальные результаты

Для сравнения предложенного нами критерия с другими многомерными критериями однородности проведен ряд имитационных экспериментов. Использовались критерий Хотеллинга [Anderson, 2003], многомерный ранговый критерий (обобщение рангового критерия Вилкоксона на многомерный случай) [Puri, Sen, 1971] и ядерный критерий Крамера [Baringhaus, Franz, 2004].

Для оценки множеств минимального объема  $C_p^*(\alpha, n)$  и  $C_Q^*(\alpha, m)$ , что, конечно, является центральной задачей при построении предложенного критерия, использовалась функция



ksvm пакета **kernlab** [Karatzoglou et al., 2004]. Данная функция допускает использование различных ядер. Нами использовалось ядро гауссовской радиальной базисной функции (Gaussian radial basis function). Одним из важных параметров такого ядра является его ширина. Для того чтобы избежать субъективности при выборе этого параметра и сделать проведенные нами эксперименты воспроизводимыми, использовалась функция автоматической оценки ширины ядра `sigest`, алгоритм которой основан на работе [Caputo et al., 2002] (также входящая в пакет **kernlab**).

Во всех экспериментах рассматривался случай многомерных гауссовских распределений  $P$  и  $Q$  на  $X \subseteq \mathbf{R}^d$ . Эксперименты проводились на вычислительном кластере Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН.

Методика проведения экспериментов заключалась в следующем. Задавались модели генерации распределений  $P$  и  $Q$ , зависящие от некоторого параметра, и исследовалась мощность упомянутых выше критериев в зависимости от этого параметра. Для каждого значения параметра проводилось 500 имитационных экспериментов. Оценка мощности при каждом значении параметра определялась отношением числа отклонений нулевой гипотезы к числу экспериментов. Исследовалось несколько уровней по объемам выборок (рассматривался только случай  $n = m$ ) и размерности  $d$ . Уровень значимости критериев во всех экспериментах выбирался равным 0,05. По этой схеме было проведено три группы экспериментов (за исключением первой).

Первая группа экспериментов проводилась для исследования скорости сходимости  $P\{C_p^*(1/2, n)\}$  при  $n \rightarrow \infty$  к значению  $1/2$  при различных значениях  $d$ . При этом нас интересовала не скорость сходимости сама по себе, а выявление условий, гарантирующих заданный уровень значимости критерия. Результаты экспериментов показали, что условие  $n/d > 50$  достаточно для этого.

Вторая группа экспериментов проводилась для исследования мощности критериев против альтернатив сдвига распределений. В этом случае моделировались выборки из распределений  $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$  и  $N(\gamma \mathbf{1}, \mathbf{I})$  (где  $\mathbf{1}$  – единичный вектор размерности  $d$ , а  $\mathbf{I}$  – единичная диагональная матрица) с различными значениями  $\gamma$ , и осуще-

ствлялась оценка мощности в зависимости от евклидова расстояния между средними двух распределений. Результаты показали, что предложенный тест реагирует на данный класс альтернатив, однако, мощность, близкая к единице, достигается при больших евклидовых расстояниях между средними, чем у остальных критериев.

Третья группа экспериментов проводилась для исследования поведения мощности в зависимости от дисперсии компонент распределений. Конкретно рассматривалась следующая модель генерации данных. Моделировались выборки  $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$  и  $N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$  для различных значений  $\sigma^2$ . Как и следовало ожидать, критерий Хотеллинга и ранговый критерий имеют в этом (и в рассматриваемом ниже) случае мощность, близкую к нулевой, поскольку они основаны на статистиках, реагирующих только на альтернативы сдвига распределений. Критерий Крамера имеет несколько большую мощность чем предложенный нами критерий, однако близкая к единице мощность предложенного критерия достигается и в этом случае (при увеличении  $\sigma^2$ ).

В четвертой группе экспериментов модель генерации данных имела следующий вид. Пусть  $d = 2r$ . Моделировались выборки  $N(\mathbf{0}, \Sigma_1)$  и  $N(\mathbf{0}, \Sigma_2)$ , где  $\Sigma_1$  – диагональная матрица с элементами

$$\sigma_{11} = \sigma^2, \dots, \sigma_{rr} = \sigma^2, \sigma_{r+1r+1} = 1/\sigma^2, \dots, \sigma_{dd} = 1/\sigma^2,$$

а  $\Sigma_2$  – диагональная матрица с элементами

$$\sigma_{11} = 1/\sigma^2, \dots, \sigma_{rr} = 1/\sigma^2, \sigma_{r+1r+1} = \sigma^2, \dots, \sigma_{dd} = \sigma^2.$$

В этом случае определители ковариационных матриц  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$ , определяющих степень разброса выборок относительно общего нулевого среднего, совпадают, и разница между распределениями состоит только в ориентации эллипсоидов рассеяния. Как показали эксперименты, в этом случае предложенный критерий имеет более высокую мощность, чем критерий Крамера.

## Заключение

По мнению автора, результаты экспериментов позволяют считать, что предложенный критерий может найти применение в статистической практике (по крайней мере в тех случаях, когда альтернативная гипотеза состоит в неравенстве ковариационных матриц распределений), однако, для полного исследования его свойств и определения классов альтернатив, для

которых критерий «хорошо работает», требуются дополнительные исследования. Исследование свойств данного критерия предполагается продолжить в следующих направлениях:

1. Рассмотрение случаев негауссовских многомерных распределений;

2. Рассмотрение случаев наличия дискретных компонент в распределениях.

Необходимо также, конечно, расширить список критериев для сравнения.

Автор выражает признательность начальнику Центра коллективного пользования КарНЦ РАН И. А. Фалько за оперативную установку программной среды **R** и ряда пакетов на вычислительный кластер и полезные консультации.

### Литература

*Anderson T. W.* An introduction to multivariate analysis. New Jersey: Wiley, 2003. 453 p.

*Baringhaus L., Franz C.* On a new multivariate two-sample test // Journal of Multivariate Analysis. 2004. Vol. 88. P. 190–206.

*Caputo B., Sim K., Furesjo F., Smola A.* Appearance-based object recognition using SVMs: which kernel should I use? // Proceedings of NIPS workshop on Statistical methods for computational experiments in visual processing and computer vision. Whistler, 2002. P. 111–119.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

#### **Чистяков Сергей Павлович**

младший научный сотрудник, к. т. н.

Институт прикладных математических исследований  
КарНЦ РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск, Республика Карелия,  
Россия, 185910

эл. почта: [chistiakov@krc.karelia.ru](mailto:chistiakov@krc.karelia.ru)

тел.: (8142) 763370

*Einmal J. H. J., Mason D. M.* Generalized quantile processes // Annals of Statistics. 1992. Vol. 20(2). P. 1062–1078.

*Agresti A.* An Introduction to Categorical Data Analysis. New York: Wiley, 1996. 290 p.

*Karatzoglou A., Smola A., Hornik K., Zeileis A.* kernlab – An S4 Package for Kernel Methods in R // Journal of Statistical Software. 2004. Vol. 11 (9). P. 1–20.

URL: <http://www.jstatsoft.org/v11/i09/> (дата обращения 18.05.2010).

*Nolan D.* The excess mass ellipsoids // Journal of Multivariate Analysis. 1991. Vol. 39. P. 348–371.

*Polonik W.* Concentration and goodness-of-fit in higher dimensions: Asymptotically distribution-free methods // The Annals of Statistics. 1999. Vol. 27. P. 1210–1229.

*Puri M. L., Sen P. K.* Nonparametric Methods in Multivariate Analysis. New York: Wiley, 1971. 342 p.

R Development Core Team. R: A language and environment for statistical computing // R Foundation for Statistical Computing: Vienna, Austria, ISBN 3-900051-07-0, URL: <http://www.R-project.org> (дата обращения 18.05.2010).

*Scholkopf B., Platt J., Shawe-Taylor J. et al.* Estimating the support of a high-dimensional distribution // TR MSR 99-87. 1999. Microsoft Research: Redmond.

*Tsybakov A. B.* On nonparametric estimation of density level sets // Annals of Statistics. 1997. Vol. 25(3). P. 948–969.

#### **Chistiakov, Sergey**

Institute of Applied Mathematical Research, Karelian Research  
Centre, Russian Academy of Science

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia

e-mail: [chistiakov@krc.karelia.ru](mailto:chistiakov@krc.karelia.ru)

tel.: (8142) 763370

## ХРОНИКА

### **XI ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ RCDL'2009 «ЭЛЕКТРОННЫЕ БИБЛИОТЕКИ: ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНОЛОГИИ, ЭЛЕКТРОННЫЕ КОЛЛЕКЦИИ» (ПЕТРОЗАВОДСК, 17–21 сентября 2009 г.)**

С 17 по 21 сентября в Петрозаводске в Карельском научном центре РАН состоялась очередная ежегодная XI конференция серии Всероссийских научных конференций «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» – RCDL'2009 <http://rcdl2009.krc.karelia.ru/>. Традиционно, как и в последние годы, совместно с RCDL проводился Всероссийский научный семинар по оценке методов текстового поиска – РОМИП. В 2009 г. конференции RCDL'2009 сопутствовало также проведение «Третьей Российской летней школы по информационному поиску RuSSIR'2009», во время которой ведущие российские и зарубежные ученые прочитали в Петрозаводском государственном университете обзорные лекции по актуальным проблемам развития методов поиска цифровых данных для решения фундаментальных и прикладных задач.

Организаторы конференции: Российская академия наук, Российский Фонд Фундаментальных Исследований, Карельский научный центр РАН, Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН, Петрозаводский государственный университет, Институт проблем информатики РАН, Московская секция ACM SIGMOD.

Председатель Руководящего комитета конференции RCDL: Л. А. Калиниченко (Москва).

Координация ECDL/RCDL: Andreas Rauber (Вена), Леонид Андреевич Калиниченко.

Председатель Организационного комитета RCDL'2009: Мазалов Владимир Викторович –

директор Института прикладных математических исследований (ИПМИ) Карельского научного центра (КарНЦ) РАН.

Сопредседатели Программного комитета RCDL'2009: Вдовицын Владимир Трофимович – Карельский научный центр РАН; Когаловский Михаил Рувимович – Институт проблем рынка РАН.

В состав Программного комитета RCDL'2009 вошли ведущие ученые из России (РАН, СО РАН, МГУ и др.), а также Австрии, США, Швеции и Украины.

Электронные библиотеки – область исследований и разработок, направленных на развитие теории и практики обработки, распространения, хранения, поиска и анализа цифровых данных различной природы. Электронные библиотеки, являющиеся хранилищами знаний, можно рассматривать как сложные информационные системы, при создании и использовании которых требуется решение многих научных, технологических, методологических, экономических, правовых и других вопросов. Развитие технологий электронных библиотек становится все более существенным для совершенствования стандартов здравоохранения, образования, науки, экономики, равно как и качества жизни вообще. Проекты формирования в цифровой форме информации, накопленной человечеством о Земле, Вселенной, Науке, Литературе, Искусстве, Окружающей среде, Человеке, являются примерами областей интенсивного развития глобальных репозиториях представления знаний.

Проблематика электронных библиотек довольно обширна. В агрегированном виде она состоит из четырех составляющих: методология разработки электронных библиотек, цифровое сохранение информационных ресурсов и создание контента, сервисы электронных библиотек и их технологическая инфраструктура. В документах конференций RCDL эта проблематика представлена более детально в виде следующего перечня направлений исследований и разработок:

- Методы и модели представления информации.
- Метаданные, онтологии и средства представления знаний.
- Перспективные инфраструктуры электронных библиотек, электронные библиотеки в средах грид и облачного компьютеринга.
- Виртуальные среды для научных исследований.
- Социальные сети и электронные библиотеки.
- Инструментальные средства создания электронных библиотек и цифровых коллекций.
- Методы и технологии работы с текстовой, мультимедийной и слабоструктурированной информацией.
- Методы сохранения информации и цифровые архивы.
- Интероперабельность и интеграция информации.
- Наукометрические измерения в электронных библиотеках.
- Информационная безопасность.
- Пользовательские интерфейсы, человеческий фактор.
- Электронные библиотеки в науке, образовании, культуре, медицине, экономике.
- Стандарты технологий электронных библиотек.

Программный комитет конференции RCDL'2009 отобрал на основе рецензирования поступивших 68 расширенных тезисов для включения в программу конференции 32 полных, 19 кратких и 3 стендовых доклада. Около 40 % из них было представлено грантодержателями РФФИ. Кроме того, в программу конференции было включено два приглашенных доклада и тьюториал. Представленные в них исследования и разработки проводятся отечественными исследователями в целом ряде актуальных

направлений. Главные из них связаны с развитием эффективных методов разработки методов и технологий для обеспечения новых функциональных возможностей систем электронных библиотек, создания комфортных для пользователей средств доступа к коллекциям информационных ресурсов ЭБ, надежного сохранения научного, образовательного и культурного наследия для ныне живущих и будущих поколений.

Отечественные исследования в области электронных библиотек относятся в значительной их части к перспективным направлениям научных исследований связанной с ними проблематики, проводимых международным научным сообществом и охватывающих как проблемы методологии создания электронных библиотек и цифрового сохранения, так и создания инструментария для разработки, сервисов и контента таких систем. По нашему мнению, исследования отечественных ученых в рассмотренных областях соответствуют мировому уровню научных достижений в рассматриваемой области.

В рамках конференции RCDL'2009 впервые в цикле был организован семинар молодых ученых «Диссертационные исследования по тематике информационных технологий, связанных с электронными библиотеками». Цель семинара – предоставить диссертантам возможность обсудить с более опытными коллегами текущие результаты и идеи их исследований; их слабые и сильные стороны, а также направления дальнейшего развития проводимых исследований, установить контакты для научного сотрудничества, развить навыки выступлений на научных конференциях. Руководящий комитет конференций RCDL считает, что такой семинар может служить важным средством активизации исследований молодых ученых в области технологий электронных библиотек и повышению их качества.

Труды всех состоявшихся конференций RCDL предоставлены для открытого доступа на сайте конференции <http://www.rcdl.ru>.

**Решение конференции.** Признано целесообразным найти возможности для публикации лучших докладов будущих конференций RCDL в журналах из списка ВАК. Необходимо продолжить на следующих конференциях практику организации диссертационного семинара. С целью расширения представительности Программного комитета и повышения качества

рецензирования заявляемых докладов рекомендовано расширить состав Программного комитета следующей конференции – RCDL'2010, включив в его состав дополнительно М. Агеева (МГУ, Москва), С. И. Паринова (ЦЭМИ РАН, Москва), А. З. Фазлиева (Институт физики атмосферы РАН, Томск), Д. В. Ландэ (Информационный центр «ЭЛВИСТИ», Киев), Г. В. Лезина (Санкт-Петербургский экономико-математический институт РАН, Санкт-Петербург), С. Д. Кузнецова (Институт системного программиро-

вания РАН, Москва), В. Д. Соловьева (Казанский государственный университет, Казань). Решено также принять предложение представителей Казанского научного центра РАН, Казанского государственного университета и НИИ математики и механики имени Н. Г. Чеботарева и провести двенадцатую конференцию RCDL'2010 в октябре 2010 г. в г. Казани.

*В. Т. Вдовицын, Л. А. Калиниченко,  
М. Р. Когаловский, С. Д. Кузнецов, В. В. Мазалов*



## МЕЖДУНАРОДНОЕ РАБОЧЕЕ СОВЕЩАНИЕ «СЕТЕВЫЕ ИГРЫ И МЕНЕДЖМЕНТ» (ПЕТРОЗАВОДСК, 28–30 июня 2009 г.)

28–30 июня 2009 г. Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН проводил выездное международное рабочее совещание «Сетевые игры и менеджмент» («Networking games and management») в отеле «Калевала».

Международное рабочее совещание «Сетевые игры и менеджмент» (Workshop «Networking games and management») посвящено узкой современной и чрезвычайно актуальной тематике, связанной с применением теоретико-игровых методов в информационных сетях и задачами распределения вычислительных, информационных ресурсов в виртуальной среде. Это новое направление в математике и информатике, и в России оно представлено исследованиями, проводящимися в МГУ, СПбГУ, ИПУ РАН, ИММ Уро РАН, ИПМИ КарНЦ РАН, ЮФУ и др. До этого совещания по данной тематике проводились в 1997 г. в Нью-Йорке (Колумбийский университет, «Сетевые игры и цены» – «Networking games and pricing») и в 2002 г. в Петрозаводске (ИПМИ КарНЦ РАН, «Сетевые игры и распределение ресурсов» – «Networking games and resource allocation»).

В рабочем совещании 2009 г. приняло участие 28 специалистов, из них – 6 иностранных из Финляндии, Японии и Польши. Работа совещания была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований и Отделением математических наук РАН.

Программный комитет состоял как из российских, так и зарубежных профессоров. В него вошли: В. В. Мазалов (ИПМИ КарНЦ РАН), А. Гуртов (Институт информационных технологий г. Хельсинки), Т. Матсухиза (Национальный технологический колледж провинции Ибараки), Б. Монин (Университет г. Падерборна), Л. А. Петросян (СПбГУ), П. Спиракис (Университет г. Патрас), К. Шайовски (Технологический университет г. Вроцлава), А. А. Васин (МГУ), Д. Янг (Баптистский университет г. Гонконга), Н. А. Зенкевич

(СПбГУ), А. Б. Жижченко (Математический институт им. Стеклова РАН).

Работа совещания проводилась по следующим секциям: сетевые игры и управление, задачи оптимальной маршрутизации, аукционы, переговорные задачи, игры с обучением и адаптивные игры.

Тематика докладов данного рабочего совещания была посвящена обсуждению новых результатов в области сетевых игр, в частности, таких направлений, как переговоры в сетях, оптимальная маршрутизация, распределение ресурсов, многоагентные системы, возможности обучения агентов, системы поддержки принятия решений в телекоммуникационных сетях.

Все представленные на совещании доклады вызвали большой интерес у участников совещания. Особо следует отметить пленарные доклады: проф. Л. А. Петросян (СПбГУ) «Динамические игры на сетях», в котором обсуждались новые сетевые подходы к построению и анализу моделей динамических кооперативных игр; проф. Д. А. Новикова (ИПУ РАН) «Сетевые игры и игры на сетях» представившего формализованную классификацию сетевых игр.

В представленных на совещании докладах были обсуждены различные аспекты теоретико-игрового моделирования в информационных сетях и приложения. Среди важных направлений – теоретико-игровые задачи оптимальной маршрутизации и распределения полосы пропускания в компьютерных сетях с различной топологией, задачи управления в социальных сетях, защита информации. Особенно большое внимание было сконцентрировано на докладах, связанных с экономическими вопросами функционирования сетей и организацией сервиса в виртуальной среде, среди которых организация электронных торгов, аукционов, конкурсов и конференций. Доклады студентов и аспирантов были посвящены важным вопросам управления ресурсами с помощью методов динамических игр, защите

информации в компьютерных сетях и вероятностным моделям анализа функционирования сетей с большим числом узлов.

В рамках рабочего совещания также было проведено обсуждение вопросов, связанных с выпуском научного журнала «Математическая теория игр и ее приложения» (<http://mathem.krc.karelia.ru/section.php?plang=r&id=620>), и принято решение об информационном содержании первых двух выпусков.

Расширенные тезисы представленных докладов выставлены на сайте совещания <http://mathem.krc.karelia.ru/event.php?id=107>. Избранные доклады опубликованы в журнале «Математическая теория игр и ее приложения» (<http://mgta.krc.karelia.ru>), а также в сборнике «Управление большими системами» (<http://ubs.mtas.ru>).

*Ю. В. Чуйко*

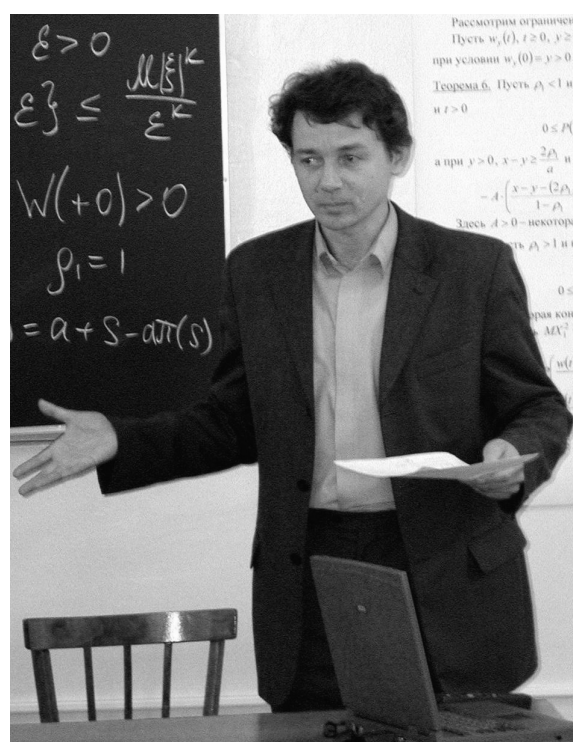


## ЮБИЛЕИ И ДАТЫ

### ЮРИЙ ВАСИЛЬЕВИЧ ЗАЙКА (к 50-летию со дня рождения)

Юрий Заика родился 27 июня 1960 г. в с. Ярово Сорокского района Молдавской ССР, где родители нашли временное пристанище после окончания Херсонского сельскохозяйственного и Сумского педагогического институтов, предпочтя аспирантской карьере в разных концах Украины совместное преодоление житейских проблем. Через несколько лет семья переехала в г. Могилёв-Подольский Винницкой области, где Юрий и закончил среднюю школу с золотой медалью. «Очкариком» не числился – активно занимался волейболом: член детской и юношеской сборной города, признавался лучшим защитником и универсальным игроком на первенствах области, первый взрослый разряд. В 1977 г. после путешествия «Киев-Москва-Ленинград» выбор пал на Ленинград, захотелось поступить в Кораблестроительный институт и вырваться с берегов Днестра на океанские просторы. Но поезд пришел рано, и до открытия метро морской офицер, узнав, что нравится математика, уговорил отнести документы в университет. Так Юрий Заика стал студентом факультета прикладной математики – процессов управления ЛГУ. Студенческие годы пролетели: учеба (сначала у Смольного в здании бывшего института благородных девиц, потом в Петергофе), белые ночи, сражения с «вузами-противниками» на первенстве Ленинграда по волейболу... Далее уже лишь сухие вехи биографии.

Заика Юрий Васильевич в 1982 г. окончил Ленинградский госуниверситет с красным дипломом (кафедра механики управляемого движения). Затем – аспирантура под руководством профессора Н. Е. Кирина, заслуженного деятеля науки РФ, профессионала и Учителя, известного



специалиста в области вычислительных методов теории оптимального управления. После защиты кандидатской диссертации в 1985 г. («Сопряженные задачи теории наблюдаемости динамических систем», 01.01.09 – математическая кибернетика) Ю. В. Заика работал в Московском авиационном институте (филиал Восход, Байконур). Отмечен грамотой командования космодрома Байконур за успешную научную работу. С 1991 г. – доцент, затем профессор математического факультета Петрозаводского госуниверситета. Окончил докторантуру СПбГУ (под рук. чл.-корр. РАН В. И. Зубова, одного из признан-



ных лидеров в области механики, теории устойчивости и управления). Докторскую диссертацию защитил в 1998 г. в Институте информатики и автоматизации РАН («Интегральные операторы наблюдения и идентификации динамических систем», 05.13.16). Аттестат профессора по кафедре математического моделирования систем управления получил в 2002 г. С 1999 г. Ю. В. Заика работает заведующим лабораторией моделирования природно-технических систем Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН. Традиционно тематика научных исследований лаборатории связана с моделированием и оптимизацией структуры и параметров энергетических, транспортных систем, а также с задачами вычислительного материаловедения.

Научные интересы Ю. В. Заики: интегральные операторы наблюдения нелинейных динамических систем; оценивание функционалов на решениях систем с запаздыванием в условиях неопределенности; краевые задачи взаимодействия водорода с конструкционными материалами с нелинейными динамическими граничными условиями и подвижными границами раздела фаз; методы решения экстремальных задач в химической термодинамике. В последние 15 лет научные исследования сконцентрированы именно на последних из упомянутых задачах, которые имеют большое теоретическое и практическое значение. Интерес к водороду вызван в основном перспективами экологически чистой энергетики и технологическими проблемами безопасности хранения и транспортировки углеводородного сырья. Это особенно актуально для Северного региона Российской Федерации, в том числе и для Республики Карелия. Возникают, в частности, проблемы защиты конструкционных материалов от водородной коррозии. Вычислительное материаловедение позволяет существенно сократить время и материальные затраты на экспериментальные исследования, в особенности это касается экстремальных условий эксплуатации материалов в водородосодержащей среде. Помимо прямых задач моделирования возникает потребность в устойчивых вычислительных алгоритмах решения обратных задач параметрической идентификации моделей по экспериментальным данным. Это позволяет прогнозировать эксплуатационные свойства новых материалов в условиях все возрастающих требований экологической безопасности.

Ю. В. Заика является автором более 100 научных работ, ряд из которых опубликован в веду-

щих российских и зарубежных журналах: Дифференциальные уравнения, Известия РАН (Теория и системы управления), Математический сборник, Математические заметки, Математическое моделирование, Журнал вычислительной математики и математической физики, Журнал технической физики, Фундаментальная и прикладная математика, Заводская лаборатория, Journal of Alloys and Compounds, NATO Science Series (II. Math., Phys. and Chem.), Обзорение прикладной и промышленной математики, Материаловедение, International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences, Applied Mathematical Modelling и др. Результаты докладывались на многочисленных российских и международных конференциях.

Ю. В. Заика ведет большую педагогическую работу. Под его руководством защищаются дипломные работы, магистерские и кандидатские диссертации. Студенты имеют возможность работать в лаборатории, выполняя научные исследования по различным темам, выступать с докладами на представительных научных форумах (среди достижений – лучшие доклады в секции «математическое моделирование» международных конференций «Ломоносов» в МГУ, пленарный доклад на форуме «Всемирный день физики в МГУ», 2005–2007). Работы учеников отмечены также грантами Конкурсного центра фундаментального естествознания при СПбГУ (дипломный и кандидатский проекты), грантами Федеральной целевой программы «Интеграция», Российского фонда фундаментальных исследований («Мобильность молодых ученых»), Фонда содействия отечественной науке («Лучшие аспиранты» и «Кандидаты наук» РАН), премией по поддержке талантливой молодежи Министерства образования и науки Российской Федерации (приоритетный национальный проект «Образование»). Трое учеников успешно защитили кандидатские диссертации, двое продолжают учебу в аспирантуре. Ю. В. Заика – член диссертационного совета в ПетрГУ, в 2006–2007 гг. – председатель Государственной аттестационной комиссии на физико-техническом факультете ПетрГУ, с 2008 г. – на математическом факультете.

Ю. В. Заика являлся членом Оргкомитета I, II и III Всероссийской школы молодых ученых «Математические методы в экологии» (Петрозаводск, 2001, 2003, 2008). В 2005–2006 гг. на базе ИПМИ КарНЦ РАН (Ю. В. Заика – сопредседатель Оргкомитета) организованы и проведены совместно с Росатомом, Российским федераль-

ным ядерным центром—ВНИИЭФ (г. Саров), СПбГУ и ПетрГУ Международные школы молодых ученых «Взаимодействие водорода с конструкционными материалами: эксперимент и математическое моделирование». Лекторы – ведущие специалисты из России, США (Аргоннская и Сандийские национальные лаборатории), Норвегии. Ю. В. Заика – член международного Программного комитета школы молодых ученых «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами», член Американского математического общества, референт журнала «Mathematical Review».

В 2005 г. Ю. В. Заика награжден Почетной грамотой КарНЦ РАН за значительный вклад в развитие фундаментальных и прикладных научных исследований. В 2006–2007 гг. отмечен грантом Фонда содействия отечественной науке в номинации «Доктора наук РАН».

В 2010 г. Ю. В. Заике присвоено почетное звание «Заслуженный деятель науки Республики Карелия».

В настоящее время Ю. В. Заика руководит проектом в рамках программы Отделения математических наук РАН «Вычислительные и информационные технологии решения больших задач» (Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН), исследования поддержки Российским фондом фундаментальных исследований.

Коллектив Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН поздравляет юбиляра и желает ему дальнейших творческих успехов.

*Зам. директора ИПМИ КарНЦ РАН  
по научной работе к. т. н., с. н. с. А. Д. Сорокин*

#### СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ Ю. В. ЗАИКИ

**1992.** Дискретная стабилизация динамических систем с неполной обратной связью // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 1. Вып. 3. С. 24–31.

Стабилизация динамических систем с неполной обратной связью // Динамика неоднородных систем. М.: ВНИИ системных исследований. Вып. 14. С. 37–47.

**1993.** Нули голоморфных функций и интегральные операторы наблюдения динамических систем // Математический сборник. Т. 184. № 12. С. 65–86.

Задача наблюдения динамических систем // Методы оценивания и управления в динамических системах. Изд-во СПбГУ. С. 85–143, 254–276.

**1995.** Оценки функционалов на решениях возмущаемых систем с запаздыванием по неполной обратной связи // Известия АН. Теория и системы управления. № 1. С. 99–108.

**1996.** Разрешимость уравнений модели переноса газа сквозь мембраны с динамическими граничными условиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. № 12. С. 108–120.

Оценки функционалов на решениях возмущаемых систем с запаздыванием // Вопросы механики и процессов управления. Вып. 17. Изд-во СПбГУ. С. 67–78.

Определение параметров водородопроницаемости металлов методом сопряжен. уравнений // Заводская лаборатория (диагностика материалов). № 1. С. 18–26. (Совместно с И. Е. Габисом).

**1998.** Идентификация модели водородопроницаемости металлов // Журнал технической физики. Т. 68. № 11. С. 38–42.

**1999.** Устойчивые дискретные программы наблюдений в аналитических динамических системах // Математические заметки. Т. 65. № 6. С. 194–201.

**2000.** Параметрическая идентификация модели переноса водорода сквозь двухслойные мембраны // Журнал технической физики. Т. 70. Вып. 5. С. 32–39.

Идентификация модели переноса газа сквозь слоистые мембраны // Обозрение прикладной и промышленной математики. Т. 7. Вып. 1. С. 60–74.

**2001.** Оценка параметров водородопроницаемости металлов методом концентрационных импульсов // Заводская лаборатория. № 5. С. 23–32.

Параметрическая регуляризация модели водородопроницаемости с динамическими граничными условиями // Математическое моделирование. Т. 13. № 11. С. 69–87.

Интегральные операторы наблюдения нелинейных динамических систем // Фундаментальная и прикладная математика. Т. 7. № 3. С. 735–760.

Управление и алгоритмы наблюдения и идентификации // Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 164 с.

**2002.** Определение параметров переноса водорода сквозь мембраны методом концентрационных импульсов // Известия вузов. Физика. № 1. С. 81–87.

**2003.** Nonlinear dynamical boundary-value problem of hydrogen thermal desorption // International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences. N 23. P. 1447–1464. (With I. A. Chernov).

Моделирование динамики взаимодействия водорода с конструкционными материалами // Обозрение прикладной и промышленной математики. Т. 10. Вып. 1. С. 11–24. (Совместно с И. А. Черновым).

Integral observability operators of nonlinear dynamical systems // International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences. N 55. P. 3519–3538.

Interval estimates of functionals in time-delay systems with uncertainty // International Journal of

Mathematics and Mathematical Sciences. N 56. P. 3573–3590.

**2004.** Identification of a hydrogen transfer model with dynamical boundary conditions // *International Journal of Mathematics and Mathematical Sciences*. N 24. P. 195–216.

Modelling of TDS-spectra of dehydrating // *Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials*. NATO Science Series II: Math., Phys. and Chem. Vol. 172. Kluwer Academic Publishers, Netherlands. P. 415–426. (With I. A. Chernov).

**2005.** Studying hydrogen permeability by method of concentration pulses // *Journal of Alloys and Compounds*. V. 404–406. P. 279–283. (With V. Popov, I. Gabis, N. Sidorov).

Modeling high-temperature TDS-Spectra peaks of metal-hydrogen systems // *Journal of Alloys and Compounds*. V. 404–406. P. 332–334. (With I. Chernov, I. Gabis).

**2006.** Моделирование высокотемпературного пика ТДС-спектра дегидрирования // *Математическое моделирование*. Т. 18, № 4. С. 100–112. (Совместно с Н. И. Родченковой).

Исследование водородопроницаемости методом концентрационных импульсов // *Материаловедение*. № 6. С. 2–9. (Совместно с В. В. Поповым, И. Е. Габисом).

**2007.** TDS-spectra of hydride powder decomposition: modelling with size reduction effect // *NATO Security through Science, Series A, Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials*, Springer. P. 619–631. (With N. I. Rodchenkova).

**2008.** Диффузионный пик ТДС-спектра дегидрирования: краевая задача с подвижными

границами // *Математическое моделирование*. Т. 20, № 11. С. 67–79. (Совместно с Н. И. Родченковой).

Modelling of diffusion TDS-spectrum peak of dehydrating with size reduction and heat absorption effects // *NATO Science for Peace and Security Series (C), Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems*, Springer. P. 863–878. (With N. I. Rodchenkova).

Algorithms of parameters estimation of hydrogen permeability model // *NATO Science for Peace and Security Series (C), Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems*, Springer. P. 403–414. (With E. P. Bormatova).

**2009.** Разностная схема для краевой задачи ТДС-дегазации с динамическими граничными условиями // *Ученые записки ПетрГУ. Серия Естественные и технические науки*. № 7 (101). С. 65–70. (Совместно с Е. К. Костиковой).

Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: diffusion peak of TDS-spectrum of dehydrating // *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier. V. 33, N 10. P. 3776–3791. (With N. I. Rodchenkova).

**2010.** Параметрическая идентификация модели водородопроницаемости по временам запаздывания // *Журнал технической физики*. Т. 80. Вып. 3. С. 31–39. (Совместно с Е. П. Борматовой).

Parametric identification of hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations // *Int. Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, in press. (With E. P. Bormatova).

Numerical modelling of hydrogen desorption from cylindrical surface // *Int. Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, in press. (With N. I. Rodchenkova).

## ГЕОРГИЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ БОРИСОВ (к 75-летию со дня рождения)

Борисов Георгий Александрович родился 9 апреля 1935 г. в г. Петрозаводске. Военное детство прошло в Пудожском районе Карелии. После окончания железнодорожной средней школы № 9 г. Петрозаводска он поступил в Ленинградский политехнический институт им. Н. И. Калинина, который окончил в 1958 г. по специальности «Электрические станции, сети и системы». В студенческие годы был заядлым путешественником, объехав с друзьями на мотоциклах и «автостопом» полстраны. Настоящий инженер. Его общий трудовой стаж и стаж работы по специальности составляет почти полвека, а стаж работы в академии наук – почти 40 лет.

После окончания института Г. А. Борисов, молодой специалист, работал на инженерных должностях в Карелэнерго. С 1960 по 1963 гг. учился в аспирантуре Карельского филиала АН СССР. Прошел путь от младшего научного сотрудника до заведующего Отделом автоматики, начальника вычислительного центра Карельского НИИ лесной промышленности. С 1968 по 1971 гг. работал в должности заведующего отделением систем управления КАРНИИЛПа. Начав работу в КФ АН СССР в должности заведующего лабораторией математических методов и вычислительной техники, он в 1975 г. создал Отдел математических методов автоматизации научных исследований и проектирования, которым руководил 16 лет. Затем работал в должностях заведующего лабораторией и ведущего научного сотрудника. Имеет ученую степень кандидата технических наук (1966), ученое звание старшего научного сотрудника (1976). Общее количество научных трудов в области автоматизации проектирования линейных сооружений и энергетики свыше 150, в том числе 3 монографии, более 100 статей.



Г. А. Борисову принадлежит ведущая роль в постановке научно-технических проблем по применению математических методов и ЭВМ в области лесотранспортного и лесомелиоративного проектирования в Карелии и далеко за ее пределами. Коллективом математиков-программистов (настоящих энтузиастов своего дела, а иначе и быть не могло в комсомольские 1960–1970-е), костяк которого составили выпускники математического факультета Петрозаводского университета, под его руководством были созданы основы теории оптимального проектирования сетей и дорог лесотранспорта и объектов лесомелиорации, разработаны оригинальные методы и технологии автоматизированного проектирова-

ния с помощью ЭВМ. Разработанные системы автоматизированного проектирования (СЕТИ, САПАД, КАНАЛ) были отмечены медалями ВДНХ и рекомендованы Минлеспромом СССР для внедрения в проектных организациях страны и использовались на стадии технико-экономического обоснования проектов сетей и автомобильных дорог лесозаготовительных предприятий. Есть чем гордиться.

В последние десятилетия Г. А. Борисов активно занимается изучением проблем топливно-энергетического комплекса, исследованиями ресурсов местных источников энергии. Принимал участие в разработке энергетической программы Республики Карелия, в различных разделах ТАСИС-проекта ERUS 9701, в проекте центра стратегических разработок «Северо-Запад», в разработке Концепции социально-экономического развития Республики Карелия, проекта республиканской целевой программы «Энергосбережение», проводит экологические экспертизы проектов реконструкции крупных котельных республиканского подчинения.

Г. А. Борисов активно занимается педагогической деятельностью в Петрозаводском государственном университете и Институте управления, экономики и права при Правительстве Республики Карелия. Им разработаны и читаются курсы лекций по проблемам энергетики, ежегодно под его руководством защищаются десятки курсовых и дипломных работ.

За успехи в научной и научно-организационной деятельности Г. А. Борисов награжден Почетными грамотами Президиума Верховного Совета КАССР и Совета Министров КАССР, Почетными грамотами РАН, ему присвоено звание «Заслуженный работник народного хозяйства РК».

С годами груз регалий все тяжелее, всего не перечислишь... Главное – наш юбиляр полон сил и энергии в соответствии с «электрической» специальностью и благодаря своему настойчивому жизнерадостному характеру. Заядлый рыбак и автомобилист, прекрасный рассказчик реальных историй и небылиц (включая собственные «байки»). Да и работа кипит!

Коллектив Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН поздравляет юбиляра, желает ему здоровья и дальнейших творческих успехов.

*Зав. лаб. моделирования природно-технических систем, д. ф.-м. н., профессор  
Ю. В. Заика*

## СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ Г. А. БОРИСОВА

**1993.** On the Role of Renewable Energy Sources in Fuel-Energy Balance of Karelia // Proc. of I Int. Seminar «Perspectives of Renewable Energy Resources Utilization in Karelian Fuel-Energy Balance». Joensuu, Finland.

**1994.** Энергетическая стратегия Северного экономического района // Энергетика Мурманской области в переходный период. КарНЦ РАН, ИФТПЭС, Апатиты. (Совместно с Б. Г. Баранником, В. Р. Елохиным и др.).

Comparative Characteristics of Bioenergy Resources in Karelia and the Vladimir Region (as a typical region of Russia) and Possible Ways of their Utilization // Biofuels for sustainable development. Proceedings of the Second International Seminar / Eds.: P. Pelkonen, G. Sidorenko, A. Villa. University of Joensuu, Research Notes. N 33. P. 62–79. (Совместно с G. Sidorenko).

**1995.** The Energy Strategy of Karelia // Biofuels for sustainable development. Proceedings of the Second International Seminar / Eds.: P. Pelkonen, G. Sidorenko, A. Villa. University of Joensuu, Research Notes. N 33. P. 79–88. (Совместно с G. Sidorenko).

Оценки возобновляемых энергетических ресурсов Карелии // Гидротехническое строительство. № 5. (Совместно с Г. И. Сидоренко, Ю. Т. Лазаревой).

**1997.** Strategy for the Development of Karelia Energetics and the Role of Renewable Power Sources // Proc. of III Int. Seminar «Perspectives of Renewable Energy Resources Utilization (Regional Aspects)» / Eds.: P. Pelkonen, G. Sidorenko, A. Villa. University of Joensuu, Research Notes. N 36. P. 50–65. (Совместно с G. Sidorenko).

**1999.** Энергетика Карелии. Современное состояние, ресурсы и перспективы развития. СПб.: Наука. 303 с. (Совместно с Г. И. Сидоренко).

Методика оценки валового и технического энергетических потенциалов лесной биомассы в Карелии // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ. Вып. 1. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 139–152. (Совместно с Г. И. Сидоренко, Т. П. Тихомировой).

**2000.** Karelia's energy policy and rational fuel energy balance // Proc. of IV Int. Seminar. «Green energetics: from the modern technologies to the new philosophy» / Eds.: P. Pelkonen, G. Sidorenko, T. Tahvanainen. University of Joensuu. Research Notes. N 103. P. 29–42. (Совместно с G. Sidorenko).

Green energetics: From the modern technology to a new philosophy // Proc. of IV Int. Seminar. «Green energetics: from the modern technologies to the new philosophy» / Eds.: P. Pelkonen, G. Sidorenko, T. Tahvanainen. University of Joensuu, Research Notes. N 103. P. 1–15. (Совместно с А. Titov, P. Pelkonen, T. Tahvanainen, G. Sidorenko, A. Asikainen).

Wood Fuel: resources and utilization in Karelia // Proc. of IV Int. Seminar. «Green energetics: from the modern technologies to the new philosophy» / Eds.:

P. Pelkonen, G. Sidorenko, T. Tahvanainen. University of Joensuu, Research Notes. N 103. P. 75–88. (Совместно с Е. Буков, S. Andreeva, T. Tihomirova).

Анализ методов моделирования топливно-энергетического хозяйства региона // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ. Вып. 2. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 104–115. (Совместно с Т. П. Тихомировой).

**2001.** О концепции развития нетрадиционной энергетики в Республике Карелия // Нетрадиционные и возобновляемые источники энергии. СПб.: Изд. СПбГТУ. С. 18–19. (Совместно с Г. И. Сидоренко, Т. П. Тихомировой).

Методы поиска наивыгоднейшего варианта сети лесовозных дорог // Лесной журнал. Известия высших учебных заведений. № 3. С. 63–70. (Совместно с В. Д. Кукиным, В. И. Кузиной).

Оптимальное трассирование лесных дорог // Лесной журнал. Известия высших учебных заведений. № 2. 2001. С. 40–45. (Совместно с Г. И. Сидоренко, В. Н. Земляченко).

**2002.** Ресурсы и эффективность использования возобновляемых источников энергии в России. СПб.: Наука. 314 с. (Совместно с Ю. Д. Арбузовым, П. П. Безруких, В. И. Виссарионовым, В. М. Евдокимовым, Н. К. Малининым, Н. В. Огородовым, В. Н. Пузаковым, А. А. Шпаком, Г. И. Сидоренко).

Сборник по статистике пространственного развития. Том. II. Проблемы энергетики Северо-Запада России / Под руководством Ю. А. Перелыгина. СПб.: Издательский Дом «Corvus», 112 с. (Совместно с Ю. А. Перелыгиным, В. А. Алейником, В. В. Арабкиным, О. З. Рохинсоном, С. А. Плетневым, Ю. В. Савельевым).

Использование и оценка ресурсов древесного топлива в России // Известия РАН, Энергетика. № 6. С. 24–35. (Совместно с П. П. Безруких, Г. И. Сидоренко).

Оценка антропогенных выбросов CO<sub>2</sub> в Карелии // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ. Вып. 3. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 229–236. (Совместно с Т. П. Тихомировой).

**2003.** Математическая модель для оптимизации заготовки и транспортировки торфа // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ КарНЦ РАН. Вып. 4. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 13–20. (Совместно с Т. П. Тихомировой).

**2004.** Use of Peat Resources in Russia for Energy Needs // Bioenergy Development In Finland, Russia and

Sweden. October 2004. Forest Sector Task Force. Barents Euro-Arctic Council / Working Group on Economic Cooperation. Publisher-University of Joensuu, Faculty of Forestry. Edited by Oy FEG - Forest and Environment Group Ltd. Cover Design - Kuvaste Oy. / Ed.: P. Pelkonen, T. Hartikainen, G. Sidorenko. P. 57–67. (Совместно с Pavel Bezrukikh, Juri Vasilev, Viktor Elistratov, Gennadi Sidorenko).

Анализ эффективности энергетического хозяйства (на примере Карелии) // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ. Вып. 5. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 161–172.

Информационная поддержка исследования проблем топливно-энергетического хозяйства Республики Карелия // Материалы VI Международной конференции «Новые информационные технологии в целлюлозно-бумажной промышленности и энергетике». Петрозаводск. С. 68–70. (Совместно с С. С. Марченко, Т. П. Тихомировой).

**2005.** Исследование и прогноз энергообеспечения Костомукшского промышленного района // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ. Вып. 6. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 35–50. (Совместно с Т. П. Тихомировой).

Топливо-энергетическое хозяйство Карелии и энергосбережение. Сборник КРИУЭП при Правительстве РК. Петрозаводск. С. 84–94. (Совместно с И. К. Савиным).

**2006.** Анализ эффективности энергетического хозяйства (на примере Карелии) // Труды КарНЦ РАН. Вып. 9. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 3–8.

О применении потоковой задачи Штейнера к оптимизации электросетей // Материалы VII Международной научно-технической конференции «Новые информационные технологии в целлюлозно-бумажной промышленности и энергетике». Петрозаводск. С. 45–46. (Совместно с В. Д. Кукиным).

**2007.** Об оптимизации электрических сетей с использованием эволюционного композитного алгоритма // Методы математич. моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ КарНЦ РАН. Вып. 8. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 71–75. (Совместно с В. Д. Кукиным).

**2009.** Об оптимизации параметров лесотранспортных сетей в современных условиях // Лесной журнал. № 1. С. 60–65. (Совместно с В. Д. Кукиным).

Структурный анализ потерь энергии в электрическом хозяйстве Карелии // Ученые записки ПетрГУ. Сер. Естественные и технические науки. № 9 (103). С. 93–97. (Совместно с Т. П. Тихомировой).

## ВИКТОР АЛЕКСЕЕВИЧ ЛЕБЕДЕВ (к 75-летию со дня рождения)



Виктор Алексеевич родился 18 декабря 1935 г. в г. Ивантеевка Московской области. В далеком 1960 г. он был принят на работу в Карельский филиал АН СССР (ныне Карельский научный центр РАН) молодым специалистом после окончания электромеханического факультета Ленинградского Политехнического института. С этого времени прошло 50 лет. Виктор Алексеевич прошел путь от лаборанта до заведующего лабораторией, работал в должности ведущего научного сотрудника. После расформирования филиала в 1964 до 1975 г. работал в Карельском НИИ лесной промышленности, а в 1975 г. прошел по конкурсу на должность старшего научного сотрудника Отдела математических методов КФ АН СССР, позднее преобразованного в Институт прикладных математических исследований, где и продолжает плодотворно трудиться в настоящее время в лаборатории математической кибернетики.

В. А. Лебедев – один из первых исследователей в Карелии в области автоматизации программирования и использования ЭВМ. В период работы в КарНИИЛПе участвовал в разработке

устройств по автоматизации распределения нагрузок в энергосистеме, являлся руководителем группы по запуску в эксплуатацию и обслуживанию ЭВМ «Минск-1», принимал участие в работах по использованию ЭВМ для исследования удаленных производственных процессов, был участником разработки одной из первых в СССР систем автоматизации программирования «Субалгол», переданной для эксплуатации ряду университетов и научных институтов СССР. С 1965 г. заинтересовался проблемами обработки экономической информации. В 1966 г. был назначен руководителем темы по исследованию и разработке системы автоматизации планирования, учета и нормирования для лесной промышленности. Одновременно проводил серию исследований по теории обработки данных. Результатом этих исследований 1966–1969 гг. явились более 10 печатных работ и кандидатская диссертация на тему «Некоторые вопросы повышения эффективности автоматизированных систем обработки данных». Практическим результатом стали системы автоматизации расчетов по техпромфинплану и заработной плате для леспромпхозов, последняя из которых успешно использовалась в леспромпхозах Кареллеспрома. В апреле 1971 г. диссертация была успешно защищена и В. А. Лебедеву присвоена степень кандидата экономических наук. В 1973 г. ему присвоено звание старшего научного сотрудника по специальности «Применение математических методов и вычислительной техники в экономических исследованиях и управлении народным хозяйством и его отраслями». В период с 1971 по 1975 г. В. А. Лебедев возглавляет исследования и разработки по созданию автоматизированной системы управления (АСУ) объединением Кареллеспром с разработкой типовых проектных решений для других объединений Минлеспрома СССР, уделяет большое внимание вопросам внедрения АСУ в лесозаготовительных объединениях страны.

Типовые проектные решения и АСУ были внедрены в 11 лесозаготовительных объединениях Советского Союза.

В 1975 г. Виктор Алексеевич прошел по конкурсу на должность старшего научного сотрудника Отдела математических методов КФ АН СССР. С 1977 г. работает в Отделе в должности заведующего лабораторией автоматизированных информационных систем (АИС). Он углубленно занимается проблемами создания и использования в научных исследованиях систем баз данных, распределенных в локальных сетях. Под руководством В. А. Лебедева вновь организованная лаборатория АИС стала продуктивным коллективом. В короткий срок была разработана система математического обеспечения АИС для ЭВМ «Минск-32», одна из первых в стране систем реляционного типа, отличающаяся высокой степенью автоматизации процессов.

В 1982 г. решением Президиума КФ АН СССР Виктор Алексеевич назначен научным руководителем комплексной проблемы по автоматизации научных исследований в филиале.

Полученные теоретические и практические результаты в области создания автоматизированных информационных систем позволили В. А. Лебедеву начиная с 1989 г. войти в программу биосферных и экологических исследований АН СССР и руководить комплексной региональной темой «Исследование, разработка теоретических основ и создание автоматизированной информационной системы «Рациональное природопользование и охрана природы КАССР». В 1989 г. он становится заведующим лабораторией геоэкоинформатики. Им были проведены теоретические и экспериментальные исследования моделей и технологий создания и эксплуатации прикладных систем с базами данных, а в последующем – систем с базами знаний. Эти исследования позволили получить практические технологии создания систем баз данных, на основе которых в Карельском научном центре под его руководством и при его участии создано более десяти крупных информационных систем, в частности: по гидрохимии поверхностных вод, по биоразнообразию экосистем Восточной Финноскандии, по гидрологии осушения болот, информационная система научной библиотеки и др.

С декабря 1998 г. он становится ведущим научным сотрудником лаборатории математической кибернетики.

Под его руководством и при непосредственном участии проводятся исследования и разработки по созданию интегрированной распределенной системы баз данных и знаний по экологии для КарНЦ РАН с применением в ее составе элементов искусственного интеллекта. В результате этих исследований, в частности, создано программное обеспечение геоинформационно-справочных систем: для ПК (2000 г.), для ПК на СД в режиме подкачки (2001 г.). На основе этих разработок в Комитете по природным ресурсам были внедрены такие геоинформационные системы как «Гидрография озер Карелии» (2000 г.), «Гидрография рек и озер Карелии» (2001 г.), «Гидротехнические сооружения Карелии» (2002 г.), «Гидрография водосборов р. Шуи, р. Суны и Заонежья» (2002 г.). В 2003 г. в сети Института водных проблем Севера внедрена коллекция «Реки, озера и гидротехнические сооружения Карелии» на базе разработанного в лаборатории программного обеспечения, отличающегося рядом оригинальных решений.

В последние годы научные интересы В. А. Лебедева направлены на исследования в области построения и применения предметных онтологий для систематизации и структуризации электронной научной информации (в частности, для построения эффективных систем поиска данных в информационных системах).

Отрадно отметить, что Виктор Алексеевич продолжает активно трудиться, сохраняя бодрость духа, неутолимое желание познавать новое. В настоящее время он является участником проектов «Информационно-аналитическая система поддержки и сопровождения научных исследований природных ресурсов (на примере Республики Карелия)» и «Исследование технологических проблем создания и использования электронных коллекций научных информационных ресурсов».

По результатам исследований В. А. Лебедева опубликовано более 130 научных работ, из них две монографии.

Виктор Алексеевич – очень трудолюбивый, инициативный, широко эрудированный, дружелюбный человек. А еще мы знаем, что он любит природу, свою дачу, увлекается музыкой, чтением книг, автомобилист и страстный грибник.

С юбилеем Вас, уважаемый Виктор Алексеевич! Крепкого здоровья и долголетия, творческой активности во всех сферах Вашей деятельности!

*В. В. Мазалов*



## СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ

В. А. ЛЕБЕДЕВА

1964. Организация связи диспетчерского пункта энергосистемы с вычислительным центром // Журн. Электричество. № 10. (Совместно с Н. Г. Зайцевым).

1965. Сопряжение вычислительной машины «Минск-1» с телеграфным каналом связи // Известия АН СССР. Техническая кибернетика. № 5. (Совместно с Н. Г. Зайцевым, А. Б. Тяhti).

1966. Система автоматизации программирования для ЦВМ // Карельское книжное издательство. (Совместно с В. В. Аксеновым, Н. Г. Зайцевым, И. М. Поповым, Н. А. Табаковым).

1969. Выборочный режим работы накопителя на магнитной ленте // Труды семинара «Информационно-измерительные системы». Киев ИК АН УССР. (Совместно с Р. А. Дружининым).

1970. Механизация учета труда и заработной платы на базе ЭВМ // Лесная промышленность. № 12. (Совместно с А. Д. Сорокиным).

1972. Режимы выборочного обмена при обращении к НМЛ для ЭВМ «Минск-22» // Сборник изд. Статистика. (Совместно с Р. А. Дружининым).

Обеспечение надежности системы учета труда и заработной платы на ЭВМ // Применение математических методов и вычислительной техники в лесной и деревообрабатывающей промышленности. (Совместно с Р. А. Патемой).

1974. Структура АСУ объединением лесозаготовительной промышленности // Сб. Механизация и автоматизация управления. Петрозаводск: Изд. Карелия.

Типовые проектные решения в АСУ объединений лесозаготовительной промышленности // Сб. Автоматизация обработки данных при исследованиях сложных объектов. Петрозаводск: КФ АН СССР.

Метод обоснования комплекса технических средств АСУ объединений // Сб. Механизация и автоматизация управления. Петрозаводск: Изд. Карелия. (Совместно с В. И. Лайтинен, А. Б. Тяhti).

1978. Справочная система для АСУ объединений // Управляющие системы и машины. (Совместно с Н. А. Табаковым).

1979. Принципы построения автоматизированной информационной системы для научных исследований // Сб. Механизация и автоматизация управления. Петрозаводск: Изд. Карелия.

1982. Язык программирования обработки табличных баз данных ПРОТ // Препринт. Петрозаводск: КФ АН СССР.

Комплексная программа работ по автоматизации научных исследований в КФ АН СССР в 1981–1985 гг. и на период до 1990 г. // Препринт. Петрозаводск: КФ АН СССР. (Совместно с А. Д. Сорокиным, Г. А. Борисовым).

1984. АСНИ регионального научного центра. Петрозаводск: КФ АН СССР. (Научное редактирование).

Математическое обеспечение автоматизированных информационных систем для применения в научных исследованиях // Сб. АСНИ регионального

научного центра. Петрозаводск: КФ АН СССР. (Совместно с А. А. Пекки, Л. П. Пекки, Н. А. Табаковым, В. В. Зобковой, О. Ф. Шкиперовой).

АСНИ Карельского филиала АН СССР. Петрозаводск: КФ АН СССР. (Совместно с А. Д. Сорокиным, Г. А. Борисовым).

Реляционная система программирования // Петрозаводск: КФ АН СССР.

1988. Реляционная система программирования обработки данных. Петрозаводск: Карельский филиал АН СССР.

Об исследовании топонимии Севера Европейской части СССР // Советское финно-угроведение. XXIV. № 3. (Совместно с Г. М. Кертом).

1989. Концепция геоэкоинформационного центра Карельской АССР. Петрозаводск: КФ АН СССР.

1990. Реляционная система обработки данных // Фундаментальные науки – народному хозяйству. Сб. АН СССР. М.: Наука. (Совместно с А. С. Дубенским, О. Ф. Шкиперовой и др.).

Комплексная программа работ по автоматизации научных исследований в Карельском научном центре АН СССР в 1991–1995 гг. // Препринт. Петрозаводск: КНЦ АН СССР. 40 с. (Совместно с А. Д. Сорокиным, Г. А. Борисовым, Ю. Л. Павловым, В. Т. Вдовицыным).

1991. Информационные технологии в экологических и природоохранных исследованиях // Сборник оперативно-информационных материалов. Петрозаводск. (Научное редактирование).

1994. О ложности апорий Зенона // Сборник трудов Отдела математики и анализа данных КНЦ РАН. Вып. 1. Петрозаводск.

1995. Система баз данных по экологии в научном центре // НТИ-95. М. С. 123–129. (Совместно с А. Д. Сорокиным).

Система баз данных в научном центре // Конференция с международным участием НТИ-95. Информационные продукты, процессы и технологии. М. Препринт. Петрозаводск. (Совместно с А. Д. Сорокиным).

1996. Информационно-программное обеспечение СБД-Экология // 50 лет Карельскому научному центру РАН. Юбилейная научная конференция. Петрозаводск. С. 245–246. (Совместно с В. В. Аксеновым, В. Г. Старковой, Н. А. Табаковым).

1998. Attempt of a complex description of the region's coverage by studies and ecological problems in a database system // The basic trends and prospects of scientific cooperation between Norway and Karelia. Petrozavodsk.

1999. О структуре коллекций знаний по экологии региона // Труды I Всероссийской конференции по электронным библиотекам. СПб. (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

2000. Система доступа к коллекции знаний по экологии региона // Труды II Всероссийской конференции по электронным библиотекам, Протвино (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

**2001.** Коллекция знаний об Онежском и Ладожском озерах // Труды III Всероссийской конференции по электронным библиотекам. Петрозаводск. (Совместно с Н. Н. Филатовым).

**2002.** Создание электронного справочника «Онежское озеро» // Сб. трудов Междунар. конф. «Вычислительные технологии и математические модели в науке, технике и образовании». Алма-Ата. (Совместно с Н. Н. Филатовым).

Публикация в Интернет коллекций типа справочников // Сб. трудов IV Всерос. конф. по электронным библиотекам. Т. 2. Дубна. С. 235–241. (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

**2003.** Опыт разработки геоинформационных и информационно-справочных систем водных объектов гидротехнических сооружений ArcReview // Современные геоинформационные технологии. Юбилейный выпуск. СПб. (Совместно с Н. Н. Филатовым, А. В. Литвиненко, В. В. Кекконен, С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

Разработка геоинформационной системы гидротехнических сооружений и каталога озер и рек Карелии // Гидроэкологические проблемы Карелии и использование водных ресурсов. Петрозаводск. (Совместно с Н. Н. Филатовым, А. В. Литвиненко, В. В. Кекконен, С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

**2004.** Технология администрирования геоинформационными коллекциями // Методы математического моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ. Вып. 5. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 105–112. (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

Геоинформационные коллекции о природных ресурсах региона в Интернете // Материалы Международной научно-практической конф. «Рациональное природопользование: ресурсо- и энергосберегающие технологии и их метрологическое обеспечение». М. С. 428–433. (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

Представление онтологии научной коллекции «Водные ресурсы региона» // Труды шестой Всерос.

науч. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции». Пущино. С. 86–92. (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

**2005.** Применение онтологии для ведения и доступа к данным коллекции «Природные ресурсы региона» // Труды VII Всерос. науч. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции». Ярославль. (Совместно с С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

**2006.** Разработка и развитие технологии публикации и поиска документов в электронных коллекциях // Труды восьмой Всерос. науч. конф. (RCDL'2006). Ярославль: Ярославский гос. университет. С. 162–167. (Совместно с В. Т. Вдовицыным, Н. Б. Луговой, А. Д. Сорокиным, В. Г. Старковой).

**2007.** Развитие сервисов электронной библиотеки научных информационных ресурсов // Научный сервис в сети Интернет: многоядерный мир. 15 лет РФФИ. Труды Всерос. науч. конф. М.: Изд-во МГУ. С. 305–311. (Совместно с В. Т. Вдовицыным, Н. Б. Луговой, С. В. Брагиным, В. Г. Старковой).

О создании информационного портала «Природные ресурсы Карелии» // Методы математич. моделирования и информационные технологии. Труды ИПМИ КарНЦ РАН. Вып. 8. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 85–107.

**2008.** Онтологии для тематического поиска данных в коллекциях электронной библиотеки // Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции: Труды десятой Всерос. науч. конф. RCDL'2008. Дубна: ОИЯИ. С. 63–69. (Совместно с В. Т. Вдовицыным).

**2009.** Роли онтологий в электронной библиотеке КарНЦ РАН // Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции: Труды XI Всерос. науч. конф. RCDL'2009. Петрозаводск: КарНЦ РАН. С. 370–375.

## ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

(требования к работам, представляемым к публикации  
в «Трудах Карельского научного центра Российской академии наук»)

«Труды Карельского научного центра Российской академии наук» (далее – Труды КарНЦ РАН) публикуют результаты завершённых оригинальных исследований в различных областях современной науки: теоретические и обзорные статьи, сообщения, материалы о научных мероприятиях (симпозиумах, конференциях и др.), персоналии (юбилеи и даты, потери науки), статьи по истории науки. Представляемые работы должны содержать новые, ранее не публиковавшиеся данные.

Статьи проходят обязательное рецензирование. Решение о публикации принимается редакционной коллегией серии или тематического выпуска Трудов КарНЦ РАН после рецензирования, с учетом научной значимости и актуальности представленных материалов. Редколлегия серий и отдельных выпусков Трудов КарНЦ РАН оставляет за собой право возвращать без регистрации рукописи, не отвечающие настоящим правилам.

При получении редакцией рукопись регистрируется (в случае выполнения авторами основных правил ее оформления) и направляется на отзыв рецензентам. Отзыв состоит из ответов на типовые вопросы «Анкеты» и может содержать дополнительные расширенные комментарии. Кроме того, рецензент может вносить замечания и правки в текст рукописи. Авторам высылаются электронная версия «Анкеты» и комментарии рецензентов. Доработанный экземпляр автор должен вернуть в редакцию вместе с первоначальным экземпляром и ответом на все вопросы рецензента не позднее, чем через месяц после получения рецензии. Перед сдачей в печать авторам высылаются распечатанная версия статьи, которая вычитывается, подписывается авторами и возвращается в редакцию.

Почтовый адрес редакции: 185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11, КарНЦ РАН, редакция Трудов КарНЦ РАН. Телефон: (8142) 780109.

Содержание номеров Трудов КарНЦ РАН и другая полезная информация, включая настоящие Правила, доступна на сайте <http://transactions.krc.karelia.ru>.

### ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ РУКОПИСИ

Статьи публикуются на русском или английском языках. Рукописи должны быть тщательно выверены и отредактированы авторами.

Статьи должны быть подписаны всеми авторами.

Объем рукописи (включая таблицы, список литературы, подписи к рисункам, рисунки) не должен превышать: для обзорных статей – 30 страниц, для оригинальных – 25, для сообщений – 15, для хроники и рецензий – 5–6. Объем рисунков не должен превышать 1/4 объема статьи. Рукописи большего объема (в исключительных случаях) принимаются при достаточном обосновании по согласованию с ответственным редактором.

Рукописи присылаются в электронном виде, а также в двух экземплярах, напечатанных на одной стороне листа формата А4 в одну колонку через 1,5 интервала (12 пунктов шрифта типа Times New Roman). Размер полей: сверху, снизу – 2,5 см, справа, слева – 2,5 см. Все страницы, включая список литературы и подписи к рисункам, должны иметь сплошную нумерацию в нижнем правом углу. Страницы с рисунками не нумеруются.

### ОБЩИЙ ПОРЯДОК РАСПОЛОЖЕНИЯ ЧАСТЕЙ СТАТЬИ

Элементы статьи должны располагаться в следующем порядке: *УДК* курсивом на первой странице, в левом верхнем углу; заглавие статьи на русском языке заглавными буквами полужирным шрифтом; инициалы, фамилии всех авторов на русском языке полужирным шрифтом; полное название организации – место работы каждого автора в именительном падеже на русском языке курсивом (если авторов несколько и работают они в разных учреждениях, то следует отметить арабскими цифрами соответствие фамилий авторов учреждениям, в которых они работают; если все авторы статьи работают в одном учреждении, можно не указывать место работы каждого автора отдельно); аннотация на русском языке; ключевые слова на русском языке; инициалы, фамилии всех авторов на английском языке полужирным шрифтом; название статьи на английском языке заглавными буквами полужирным шрифтом; аннотация на английском языке; ключевые слова на английском языке; текст статьи (статьи экспериментального характера, как правило, должны иметь разделы: ВВЕДЕНИЕ. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ. ВЫВОДЫ. ЛИТЕРАТУРА); благодарности; литература (с новой страницы); таблицы (на отдельном листе); рисунки (на отдельном листе); подписи к рисункам (на отдельном листе).

На отдельном листе дополнительные сведения об авторах: фамилия, имя, отчество всех авторов полностью на русском и английском языках; полный почтовый адрес каждой организации (страна, город) на русском и английском языках; должности авторов; адрес электронной почты для каждого автора; телефон для контактов с авторами статьи (можно один на всех авторов).

ЗАГЛАВИЕ СТАТЬИ должно точно отражать содержание статьи\*<sup>1</sup> и содержать не более 8–10 значащих слов.

АННОТАЦИЯ должна быть лишена вводных фраз, содержать только главную информацию статьи, не превышать объем – 15 строк.

Отдельной строкой приводится перечень КЛЮЧЕВЫХ СЛОВ. Ключевые слова или словосочетания отделяются друг от друга запятой, в конце фразы ставится точка.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ должны содержать сведения об объекте исследования с обязательным указанием латинских названий и сводок, по которым они приводятся, авторов классификаций и пр. Транскрипция географических названий должна соответствовать атласу последнего года издания. Единицы физических величин приводятся по Международной системе СИ. Желательна статистическая обработка всех количественных данных. Необходимо возможно точнее обозначать местонахождения (в идеале – с точным указанием географических координат).

ИЗЛОЖЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ должно заключаться не в пересказе содержания таблиц и графиков, а в выявлении следующих из них закономерностей. Автор должен сравнить полученную им информацию с имеющейся в литературе и показать, в чем заключается ее новизна. Для фаунистических и флористических работ следует указывать место хранения коллекционных образцов. Если в статье приводятся сведения о новых для исследованной территории таксонах, то желательно и процитировать этикетку. Следует ссылаться на табличный и иллюстративный материал так: на рисунки, фотографии и таблицы в тексте (рис. 1, рис. 2, табл. 1, табл. 2 и т. д.), фотографии, помещаемые на вкладышах (рис. I, рис. II). Обсуждение завершается формулировкой основного вывода, которая должна содержать конкретный ответ на вопрос, поставленный во Введении. Ссылки на литературу в тексте даются фамилиями, например: Карху, 1990 (один автор); Раменская, Андреева, 1982 (два автора); Крутов и др., 2008 (три автора или более), и заключаются в квадратные скобки. При перечислении нескольких источников работы располагаются в хронологическом порядке, например: [Иванов, Топоров, 1965; Успенский, 1982; Egwin et al., 1989; Рыбаков, 1994; Longman, 2001].

ТАБЛИЦЫ нумеруются в порядке упоминания их в тексте, каждая таблица имеет свой заголовок. На полях рукописи (слева) карандашом указываются места расположения таблиц при первом упоминании их в тексте. Диаграммы и графики не должны дублировать таблицы. Материал таблиц должен быть понятен без дополнительного обращения к тексту. Все сокращения, использованные в таблице, должны быть пояснены в Примечании, расположенном под ней. При повторении цифр в столбцах нужно их повторять, при повторении слов – в столбцах ставить кавычки. Таблицы могут быть книжной или альбомной ориентации (при соблюдении вышеуказанных параметров страницы).

РИСУНКИ представляются отдельными файлами с расширением TIFF (\*.TIF), или JPG (не встраивать в Word). Графические материалы должны быть снабжены распечатками с указанием желательного размера рисунка в книге, пожеланий и требований к конкретным иллюстрациям. На каждый рисунок должна быть как минимум одна ссылка в тексте. Иллюстрации объектов, исследованных с помощью фотосъемки, микроскопа (оптического, электронного трансмиссионного и сканирующего), должны сопровождаться масштабными линейками, причем в подрисовочных подписях надо указать длину линейки. Приводить данные о кратности увеличения необязательно, поскольку при публикации рисунков размеры изменятся. Крупномасштабные карты желательно приводить с координатной сеткой, обозначениями населенных пунктов и/или названиями физикогеографических объектов и разной фактурой для воды и суши. В углу карты желательна врезка с мелкомасштабной картой, где был бы указан участок, увеличенный в крупном масштабе в виде основной карты.

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ должны содержать достаточно полную информацию, для того чтобы приводимые данные могли быть понятны без обращения к тексту (если эта информация уже не дана в другой иллюстрации). Аббревиации расширяются в подрисовочных подписях.

ЛАТИНСКИЕ НАЗВАНИЯ. В расширенных латинских названиях таксонов не ставится запятая между фамилией авторов и годом, чтобы была понятна разница между полным названием таксона и ссылкой на публикацию в списке литературы. Названия таксонов рода и вида печатаются курсивом. Вписывать латинские названия в текст от руки недопустимо. Для флористических, фаунистических и таксономических работ при первом упоминании в тексте и таблицах приводится русское название вида (если такое название имеется) и полностью – латинское, с автором и, желательно, с годом, например: водяной ослик (*Asellus*

---

\* Названия видов приводятся на латинском языке КУРСИВОМ, в скобках указываются высшие таксоны (семейства), к которым относятся объекты исследования.

*aquaticus* (L. 1758). В дальнейшем можно употреблять только русское название или сокращенное латинское без фамилии автора и года опубликования, например, для брюхоногого моллюска *Margarites groenlandicus* (Gmelin 1790) – *M. groenlandicus* или для подвида *M. g. umbilicalis*.

**СОКРАЩЕНИЯ.** Разрешаются лишь общепринятые сокращения — названия мер, физических, химических и математических величин и терминов и т. п. Все сокращения должны быть расшифрованы, за исключением небольшого числа общеупотребительных.

**БЛАГОДАРНОСТИ.** В этой рубрике выражается признательность частным лицам, сотрудникам учреждений и фондам, оказавшим содействие в проведении исследований и подготовке статьи, а также указываются источники финансирования работы.

**ЛИТЕРАТУРА.** Пристатейные ссылки и/или списки пристатейной литературы следует оформлять по ГОСТ Р 7.0.52008. Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления ([http://www.bookchamber.ru/GOST\\_P\\_7.0.5.2008](http://www.bookchamber.ru/GOST_P_7.0.5.2008)). Список работ представляется в алфавитном порядке. Все ссылки даются на языке оригинала (названия на японском, китайском и других языках, использующих нелатинский шрифт, пишутся в русской транскрипции). Сначала приводится список работ на русском языке и на языках с близким алфавитом (украинский, болгарский и др.), а затем – работы на языках с латинским алфавитом. В списке литературы между инициалами ставится пробел.

#### ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ 1-Й СТРАНИЦЫ

**УДК 631.53.027.32: 635.63**

### **ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМОВ ПРЕДПОСЕВНОГО ЗАКАЛИВАНИЯ СЕМЯН НА ХОЛОДОУСТОЙЧИВОСТЬ РАСТЕНИЙ ОГУРЦА**

**Е. Г. Шерудило<sup>1</sup>, М. И. Сысоева<sup>1</sup>, Г. Н. Алексейчук<sup>2</sup>, Е. Ф. Марковская<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Институт биологии Карельского научного центра РАН

<sup>2</sup> Институт экспериментальной ботаники НАН Республики Беларусь им. В. Ф. Купревича

Аннотация на русском языке

Ключевые слова: *Cucumis sativus* L., кратковременное снижение температуры, устойчивость.

### **E. G. Sherudilo, M. I. Sysoeva, G. N. Alekseichuk, E. F. Markovskaya. EFFECTS OF DIFFERENT REGIMES OF SEED HARDENING ON COLD RESISTANCE IN CUCUMBER PLANTS**

Аннотация на английском языке

Key words: *Cucumis sativus* L., temperature drop, resistance.

#### ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ ТАБЛИЦЫ

Таблица 2

#### **Частота встречаемости видов нематод в исследованных биотопах**

Биотоп (площадка)	Колво видов	Встречаемость видов нематод				
		100 %	80 %	60 %	40 %	20 %
1Н	26	8	4	1	5	8
2Н	13	2	1	1	0	9
3Н	34	13	6	3	6	6
4Н	28	10	5	2	2	9
5Н	37	4	10	4	7	12

*Примечание.* Здесь и в табл. 3–4: Биотоп 1Н – территория, заливаемая в сильные приливы; 2Н – постоянно заливаемый луг; 3Н – редко заливаемый луг; 4Н – незаливаемая территория; 5Н – периодически заливаемый луг.

#### ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ ПОДПИСИ К РИСУНКУ

*Рис. 1.* Северный точильщик (*Hadrobregmus confuses* Kraaz.)

## ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ СПИСКА ЛИТЕРАТУРЫ

### Ссылки на книги

*Вольф Г. Н.* Дисперсия оптического вращения и круговой дихроизм в органической химии / ред. Г. Снатцке. М.: Мир, 1970. С. 348–350.

*Илиел Э.* Стереохимия соединений углерода / пер. с англ. М.: Мир, 1965. 210 с.

*Несис К. Н.* Океанические головоногие моллюски: распространение, жизненные формы, эволюция. М.: Наука, 1985. 285 с.

*Knorre D. G., Laric O. L.* Theory and practice in affinity techniques / Eds. P. V. Sundaram, F. L. Eckstein. N. Y., San Francisco: Acad. Press, 1978. P. 169–188.

### Ссылки на статьи

*Викторов Г. А.* Межвидовая конкуренция и сосуществование экологических гомологов у паразитических перепончатокрылых // Журн. общ. биол. 1970. Т. 31, № 2. С. 247–255.

*Grove D. J., Loisides L., Nott J.* Satiation amount, frequency of feeding and emptying rate in *Salmo gairdneri* // J. Fish. Biol. 1978. Vol. 12, N 4. P. 507–516.

### Ссылки на материалы конференций

*Марьинских Д. М.* Разработка ландшафтного плана как необходимое условие устойчивого развития города (на примере Тюмени) // Экология ландшафта и планирование землепользования: тезисы докл. Всерос. конф. (Иркутск, 11–12 сент. 2000 г.). Новосибирск, 2000. С. 125–128.

### Ссылки на авторефераты диссертаций

*Шефтель Б. И.* Экологические аспекты пространственно-временных межвидовых взаимоотношений землероек Средней Сибири: автореф. дис. ... канд. биол. наук. М., 1985. 23 с.

### Ссылки на диссертации

*Шефтель Б. И.* Экологические аспекты пространственно-временных межвидовых взаимоотношений землероек Средней Сибири: дис. ... канд. биол. наук. М., 1985. С. 21–46.

### Ссылки на патенты

Патент РФ № 2000130511/28, 04.12.2000.

*Еськов Д. Н., Серегин А. Г.* Оптико-электронный аппарат // Патент России № 2122745. 1998. Бюл. № 33.

### Ссылки на архивные материалы

*Гребенщиков Я. П.* К небольшому курсу по библиографии: материалы и заметки, 26 февр. – 10 марта 1924 г. // ОР РНБ. Ф. 41. Ед. хр. 45. Л. 1–10.

### Ссылки на Интернет-ресурсы

*Паринов С. И., Ляпунов В. М., Пузырев Р. Л.* Система Соционет как платформа для разработки научных информационных ресурсов и онлайн-сервисов // Электрон. б-ки. 2003. Т. 6, вып. 1. URL: <http://www.elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2003/part1/PLP/> (дата обращения: 25.11.2006).

### Ссылки на электронные ресурсы на CDROM

Государственная Дума, 19992003 [Электронный ресурс]: электронная энциклопедия/Аппарат Гос. Думы Федер. Собрания Рос. Федерации. М., 2004. 1 CDROM.

## CONTENTS

Introduction .....	3
G. A. Borisov, T. P. Tikhomirova. CHARACTERISTICS AND PROPERTIES OF ENERGY AND POWER LOSSES AT STEP TRANSITIONS IN THE ENERGY FACILITIES OF THE REGION .....	4
V. T. Vdovitsyn, V. A. Lebedev. ONTOLOGICAL MODELING OF KARELIAN RESEARCH CENTRE'S DIGITAL LIBRARY CONTENT .....	11
R. S. Goricheva, E. V. Morozov. REGENERATIVE SIMULATION OF LOSS PROBABILITY IN QUEUEING SYSTEMS WITH FINITE BUFFER .....	20
Yu. V. Zaika, E. P. Bormatova. PARAMETRIC IDENTIFICATION OF HYDROGEN PERMEABILITY MODEL WITH DYNAMICAL BOUNDARY CONDITIONS .....	30
Yu. V. Zaika, E. K. Kostikova. ESTIMATION OF HYDROGEN DIFFUSION AND DESORPTION PARAMETERS IN THE BOUNDARY-VALUE PROBLEM OF TDS-DEGASSING .....	45
O. V. Lukashenko, E. V. Morozov, M. Pagano. APPLICATIONS OF GAUSSIAN PROCESSES IN NETWORK TRAFFIC MODELING .....	51
Yu. L. Pavlov, E. N. Dertishnikova. ON LIMIT DISTRIBUTION OF MAXIMUM VERTEX DEGREE IN RANDOM GRAPH OF INTERNET TYPE .....	59
Yu. L. Pavlov, I. A. Cheplyukova. ON ASYMPTOTICS OF $\chi^2$ - TYPE STATISTICS IN CONDITIONAL RANDOM INTERNET GRAPHS .....	66
N. I. Rodchenkova, Yu. V. Zaika. NUMERICAL MODELING OF HYDROGEN DESORPTION FROM CYLINDRICAL SURFACE .....	72
S. V. Stafeev. POLYNOMIAL INVARIANTS FOR MODELS WITH LATENT VARIABLES .....	83
I. A. Chernov. CONVERGENCE OF THE DIFFERENCE SCHEME FOR THE MODEL OF SEA ICE THERMAL DYNAMICS .....	87
S. P. Chistiakov. ON A NEW MULTIVARIATE STATISTICAL HOMOGENEITY TEST .....	93
CHRONICLE	
V. T. Vdovitsyn, L. A. Kalinichenko, M. R. Kogalovsky, S. D. Kuznetsov, V. V. Mazalov	
XI All-Russian Research Conference RCDL'2009 «Digital Libraries: Advanced Methods and Technologies, Digital Collections» (Petrozavodsk, September 17–21, 2009) .....	98
Yu. V. Chuyko. International Workshop «Networking games and management» (Petrozavodsk, June 28–30, 2009)	101
DATES AND ANNIVERSARIES	
A. D. Sorokin. Yury Zaika (on the 50 <sup>th</sup> anniversary) .....	103
Yu. V. Zaika. Georgy Borisov (on the 75 <sup>th</sup> anniversary) .....	107
V. V. Mazalov. Viktor Lebedev (on the 75 <sup>th</sup> anniversary) .....	110
INSTRUCTIONS FOR AUTHORS .....	114

Научное издание

**Труды Карельского научного центра  
Российской академии наук**

№ 3, 2010

Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ. Вып. 1.

*Печатается по решению  
Президиума Карельского научного центра РАН*

Редактор М. А. Радостина  
Оригинал-макет Т. Н. Люрина

Подписано в печать 14.09.2010. Формат 60x84<sup>1</sup>/<sub>8</sub>.  
Гарнитура Times. Печать офсетная. Уч. изд. л. 10,8. Усл. печ. л. 13,6  
Тираж 500 экз. Изд. № 129. Заказ 895

Карельский научный центр РАН  
Редакционно-издательский отдел  
185003, г. Петрозаводск, пр. А. Невского, 50