

Для решения уравнения $f(x)=0$ с нелинейным гладким оператором f может быть предложен метод Ньютона с другой регуляровкой шага, где шаговая длина определялась одним из следующих способов:

$$1) \beta_{n+1} = \min\left(1, \frac{\gamma_n \|f(x_n)\|^2}{\|f(x_{n+1})\|(\|f(x_n)\| + \|f(x_{n+1})\|)}\beta_n\right); \quad \gamma_0 \leq \beta_0^2$$

$$\gamma_{n+1} = \min\left(1, \frac{\gamma_n \|f(x_n)\|}{\|f(x_n)\| + \|f(x_{n+1})\|}\right),$$

$$2) \beta_{n+1} = \min\left(1, \frac{\gamma_n \|f(x_n)\|}{\|f(x_{n+1})\|}\beta_n\right), \quad \gamma_{n+1} = \frac{\gamma_n \|f(x_n)\|}{\|f(x_{n+1})\|},$$

$$3) \beta_{n+1} = \min\left(1, \frac{\gamma_n \|f(x_n)\|}{\|f(x_{n+1})\|}\beta_n\right), \quad \gamma_{n+1} = \min\left(1, \frac{\gamma_n \|f(x_n)\|}{\|f(x_{n+1})\|}\right)$$

В качестве тестовых задач были рассмотрены задачи *Розенброка* и *Пауэлла* [1]. В результате просчётов наиболее эффективными оказались процессы, где регуляровка шага осуществлялась по формулам 2) и 3).

Литература. 1. Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. – М.: Мир, 1988. 2. Мадорский В.М. о некоторых подходах к построению нелокальных итерационных процессов // Труды международной научной конференции «Статистический и прикладной анализ временных рядов». – Брест: БрГУ, 1997.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ГЛОБАЛЬНОГО АНАЛИЗА СПЕКТРОВ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ С РАЗРЕШЕНИЕМ ПО ВРЕМЕНИ

Коваленко О.А., БГУ, Минск

Флуоресцентная спектроскопия – мощный метод изучения динамики фотофизических процессов, определения параметров сложных биомолекулярных систем, химических и биологических объектов [1]. При использовании методов спектроскопии важным этапом является интерпретация экспериментальных данных. Глобальный анализ – это совместный анализ нескольких связанных наборов данных [2].

Целью данной работы является разработка метода глобального анализа флуоресцентных спектров с временным разрешением с использованием мате-

матического моделирования. Предлагается использовать имитационную модель, основанную на методе Монте-Карло. Такой подход помогает при исследовании сложных систем (например, системы, в которых возможны процессы переноса и миграции энергии). На базе имитационного моделирования, методов оптимизации и статистических критериев предложен подход глобального анализа данных для проведения исследования в донорно-акцепторной системе.

Двигаясь от простого к сложному, для исследования выбрана донорно-акцепторная модель, в рамках которой возможен резонансный перенос энергии от молекул донора к молекулам акцептора [3]. Основные параметры модели: τ_D и τ_A – время жизни нижнего синглетного возбужденного состояния соответственно донора и акцептора, k_{ET} – константа переноса энергии. Идея глобального анализа применительно к предложенной системе рассмотрена на рис. 1. С помощью единой имитационной модели генерируются две характеристики: затухания флуоресценции донора и затухание флуоресценции акцептора. Сгенерированные теоретические данные сравниваются с соответствующими экспериментальными данными. Результат сравнения – величина статистического критерия χ^2 .

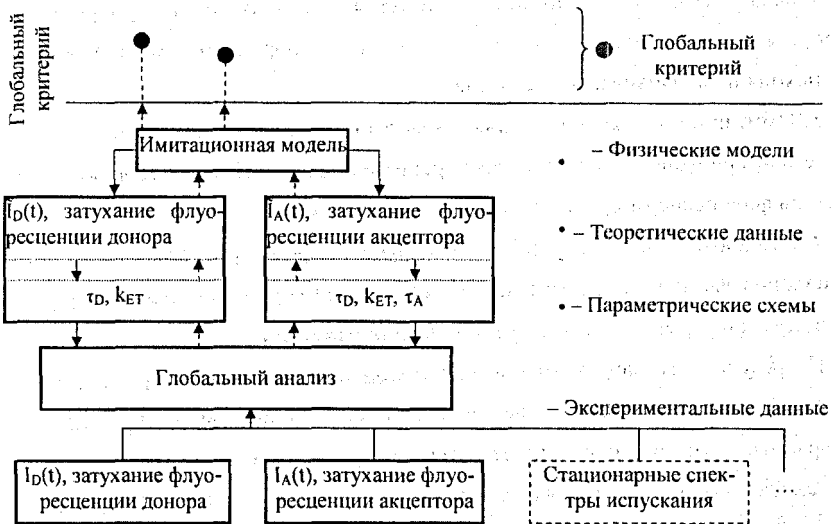


Рис 1. Схема метода глобального подхода анализа данных.

Результаты анализа отдельных наборов данных объединяются в единый глобальный критерий. В данной схеме глобального подхода для подгона параметров системы используется метод оптимизации Нелдера-Мида [4]. На основе полученной величины глобального критерия определяется направление поиска оптимальных параметров.

В качестве экспериментальных наборов данных в работе использованы синтетические данные, на основе параметров существующей молекулярной системы по переносу энергии, раствора пиронина и оксонина в этаноле [5].

В работе исследовано три стратегии вычисления глобального критерия χ^2 для процедуры оптимизации параметров системы, которые основаны на различных комбинациях частных значений статистического критерия. Полученные оптимистичные результаты определения параметров системы методом глобального анализа данных позволяют сделать следующие выводы:

1. Критерий χ^2 может быть успешно использован для анализа соответствия теоретических данных экспериментальным данным.

2. Метод оптимизации Нелдера-Мида может быть успешно использован для поиска оптимальных параметров системы, когда имеются априорная информация о значениях, которые могут принимать параметры модели (например, исходя из их физического смысла).

3. Имитационное моделирование может быть успешно использовано в качестве альтернативы аналитическому решению для получения теоретических спектров флуоресценции с разрешением по времени.

4. Разработанный метод глобального анализа эффективен при анализе многих наборов данных, когда отдельные данные зависят от нескольких параметров системы и связаны некоторыми общими параметрами.

По результатам работы можно предположить, что глобальный подход может быть использован для исследования более сложных моделей, таких как мембранные протенины и фотонные антенны на базе органических красителей в кристаллах циолитов, а так же улучшен включением в анализ стационарных спектров.

Литература. 1. J.R. Lakowisz, Principles of Fluorescence Spectroscopy, 2nd ed., Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 1999. 2. J.M. Becheem and A.M. Amelot, Global Analysis of Fluorescence Intensity and Anisotropy Decay Data. 3. M.M. Yatskou and G. Calzaferri, Monte Carlo Simulation of Radiationless Energy Migration and Energy Transfer: Simulation-based Fluorescence Decay Fitting, Champery, Switzerland. 4. J.A. Nelder and R. Mead, A simplex method for function minimization, Computer Journal, 1965, 7, 308-313. 5. G. Calzaferri, M. M. Yatskou, M. Meyer, S. Huber, M. Pfenniger, Electronic Excitation Energy Migration in a Photonic Dye-Zeolite Antenna, ChemPhysChem, 2003, 4, 567-587.

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОМЕРНОГО ОПЕРАТОРНОГО МЕТОДА К ИССЛЕДОВАНИЮ СТРУКТУРЫ АСИНХРОННОГО ДВИГАТЕЛЯ

Козлов А.В., ГИТУ, г. Гомель

В работах [1] получено уравнение движения ротора двухфазного асинхронного электродвигателя (АД) в следующем виде:

$$J \cdot \frac{d\omega}{dt} = \frac{1}{R} \left[u_{\beta} \cdot \int u_{\alpha} \cdot dt - u_{\alpha} \cdot \int u_{\beta} \cdot dt - \omega \cdot \left(\int u_{\beta} \cdot dt \right)^2 \right], \quad (1)$$

где u_{α}, u_{β} – напряжения на обмотках управления и возбуждения; ω – скорость вращения двигателя; J – момент инерции двигателя; R – приведенное сопротивление обмотки ротора;

По уравнению (1) построим структурную схему двухфазного АД во временной области при амплитудной модуляции напряжения $u_{\alpha} = m \cdot u_{y} = \Omega \cdot t \cdot U_{ym} \cdot \cos(\omega_0 \cdot t)$ (рис.1), где напряжение возбуждения $u_{\beta} = U_{em} \cdot \sin(\omega_0 \cdot t)$, а через $K = \frac{1}{R \cdot J}$ – обозначен коэффициент передачи электродвигателя.

Из структурной схемы (рис.1) видно, что входной сигнал u_{α} получается в результате многочисленных операций перемножения. Поэтому для анализа u_{α} целесообразно применить многомерный операторный метод [2]. Для получения скорости вращения двигателя сигнал u_{α} должен пройти через активное многомерное звено, находящееся в обратной связи. В прямом канале присутствует интеграл, что делает применение многомерного операторного метода невозможным. Поэтому дальнейший расчет