

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕНДЕНЦИЙ ПОВЕДЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ СИСТЕМ УНИКАЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ

А. Б. ЛОГОВ, Р. Ю. ЗАМАРАЕВ, А. А. ЛОГОВ

Институт угля и углехимии СО РАН, Кемерово, Россия

e-mail: {a.logov,r.zamaraev}@kems.ru, logoff@rambler.ru

We present a further development of the entropy analysis method for the complex multifactor systems of unique objects. The concept of classes of behavior of an elements of the system in a phase space is introduced. The principles of the construction of behavior models along with trends revealing are presented. Some features of behavior modeling applied to the analysis of Mendeleev periodic system of chemical elements are demonstrated

Отображение характеристик элементов систем уникальных объектов на аналогах фазовых плоскостей [1] путем энтропийного преобразования выборочных данных приводит к разделению элементов системы по видам состояния. Таким образом, в процедуры кластеризации и/или ранжирования могут быть внесены заключения о структурной неоднородности системы, что дает наиболее важные для практики результаты. Дополнительно в пределах области определения каждого вида состояния элементы можно отличать по тенденциям поведения (изменения состояния) при условии неизменности системы в целом.

Здесь обсуждается основная и простейшая модель — тенденция в поведении элемента линейно зависит от начальных координат $U_{1,0}$ и $U_{2,0}$ на плоскости состояний и обусловлена величиной отклонения от эллиптической границы между видами состояния [2].

Поведение на границе в параметрической форме $(U_1(t), U_2(t))$ в точности может быть описано следующей системой:

$$\begin{aligned} AB(1+r^2) \frac{dU_1(t)}{dt} + (A^2 - B^2)r U_1(t) &= (A^2 + B^2r^2) U_2(t), \\ AB(1+r^2) \frac{dU_2(t)}{dt} - (A^2 - B^2)r U_2(t) &= -(A^2r^2 + B^2) U_1(t), \end{aligned} \quad (1)$$

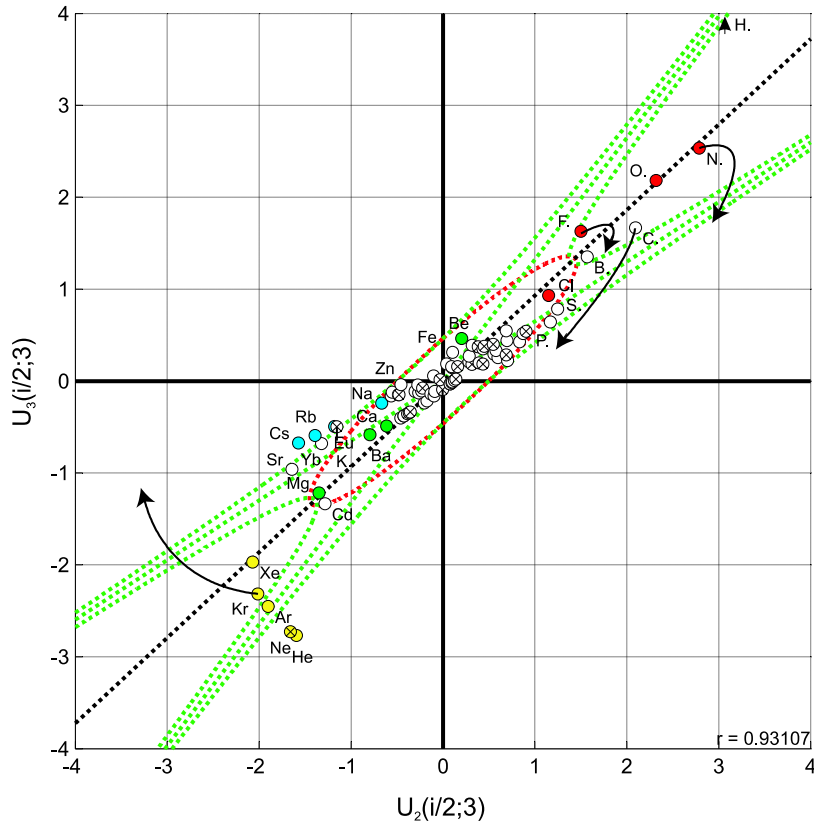
где $A(m, r)$ и $B(m, r)$ — полуоси граничного эллипса, изображающего гармоническое решение в системе мощностью m с коэффициентом корреляции $r = M[U_1 \cdot U_2]$.

В произвольной точке окрестности эллипса можно оценить параметр отклонения

$$\frac{U_{1,0}}{U_{1,el}(t_0)} \equiv \frac{U_{2,0}}{U_{2,el}(t_0)} = e^{\zeta t_0}, \quad (2)$$

с учетом которого модель поведения представляется в виде

$$\begin{aligned} AB(1+r^2) \frac{U_2(t)}{dt} + [(A^2 - B^2)r - AB\zeta(1+r^2)] U_2(t) &= (A^2 + B^2r) U_2(t), \\ AB(1+r^2) \frac{U_3(t)}{dt} - [(A^2 - B^2)r + AB\zeta(1+r^2)] U_3(t) &= -(A^2r + B^2) U_3(t). \end{aligned} \quad (3)$$



При тестировании метода на примере анализа периодической системы химических элементов [2] нетривиальный результат выделения видов состояния был получен для комбинации фундаментальных характеристик: $R(2)$ — величина энергии связи, $R(3)$ — длина связи в двухатомной молекуле (полный перечень из 56 рассмотренных характеристик приведен в [2]).

Для построения фазового портрета системы на рисунке была введена комбинация, которую можно назвать моделью потенциала связи:

$$F(i/2; 3) = \frac{\sigma[\ln(R(3))]}{\sigma[\ln(R(2))]} \cdot \frac{K(i, 2)}{K(i, 3)}, \quad (4)$$

где

$$K(i/j) = R(i/j) \prod_{i=1}^m R(i/j)^{\frac{-1}{m}};$$

$$\sigma^2[\ln(R(j))] = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m \ln^2(K(i/j)).$$

Тогда отображение комбинации выборочных значений на ось абсцисс запишется в виде

$$U_2(i/2; 3) = \ln(F(i/2; 3))^{\frac{1}{\sigma[\ln(F(2;3))]}}, \quad (5)$$

где

$$\sigma^2[\ln(F(2; 3))] = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m \ln^2(F(i/2; 3)).$$

Как показано в [2], производная от модели потенциала связи имеет вид

$$G(i/2; 3) = \frac{\hat{M}[R^{-1}(2)] - R^{-1}(2)}{\sigma[R^{-1}(2)]} - \frac{\hat{M}[R^{-1}(3)] - R^{-1}(3)}{\sigma[R^{-1}(32)]}, \quad (6)$$

и, соответственно, получаем отображение комбинации на ось ординат

$$U_3(i/2; 3) = \frac{G(i/2; 3)}{\sigma[G(2; 3)]}, \quad (7)$$

где

$$\sigma^2[G(2; 3)] = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m G^2(i/2; 3).$$

Кроме того, относительно идентифицированных в выборочном случае фазовых координат удается записать модели поведения отдельных элементов системы. В комбинации показателей на рисунке для азота, например, получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} 0.2119 \frac{dU_y}{dt} + U_y(t) &= 0.6637 U_z(t), \\ 0.1799 \frac{dU_z}{dt} - U_z(t) &= -0.4927 U_y(t) \end{aligned} \quad (8)$$

с решением

$$\begin{aligned} U_y(\theta) &= 2.80 \cdot e^{0.42\theta} \cdot \cos(\theta - 0.093), \\ U_z(\theta) &= 2.62 \cdot e^{0.42\theta} \cdot \cos(\theta + 0.255). \end{aligned}$$

Разнообразие видов поведения определяется, прежде всего, величинами сдвигов по аргументу $\theta = t - t_0$. Наиболее выражены приближающиеся и уклоняющиеся виды поведения относительно эллиптической границы устойчивости.

Здесь достаточно характерно сопоставление свойств углерода $C^{(6)}$ и фтора $F^{(9)}$, чьи изображающие точки расположены достаточно близко, но разделены прямой линейной регрессии. Начальная тенденция углерода — сближение по комбинированной характеристике с остальной системой; фтор обнаруживает тенденцию к выделению из совокупности. Такое же свойство проявляется у азота $N^{(7)}$.

Портрет группы инертных газов не только радикально отличается от остальной системы, но и расположен почти ортогонально линии связи. Смысл соответствующей независимости иллюстрируется моделью поведения криптона $Kr^{(36)}$.

Понятно, что при строгом анализе можно надежно оперировать только направлениями начальных производных, а построенные траектории имеют цель добиться наибольшей наглядности.

Список литературы

- [1] Логов А.Б., Кочетков В.Н., Рожков А.А. Энтропийный подход к моделированию процесса реструктуризации угольной отрасли. М.: Недра, 2001. 324 с.
- [2] Логов А.Б., Замараев Р.Ю., Логов А.А. Анализ функционального состояния промышленных объектов в фазовом пространстве. Кемерово: Институт угля и углехимии СО РАН, 2004. 168 с.

*Поступила в редакцию 11 февраля 2005 г.,
в переработанном виде — 12 мая 2005 г.*