

телевизионных сигналов в качестве зондирующего сигнала бистатистической РСА // Инфокоммуникационные технологии. - 2010. – Т.8. - №1. – С.41-46.

2. Горячкин О. В., Женгуров Б. Г. Алгоритм формирования радиолокационного изображения РСА, паразитирующего на телевизионном сигнале // Физика и технические приложения волновых процессов: Труды XI МНТК / под общ. ред. Ю. Е. Мительмана. – Екатеринбург: Изд. Урал. ун-та, 2012. – С.64-65.

3. Репин В. Г., Тартаковский Г. П. Статистический синтез при априорной неопределенности и адаптация информационных систем.-М.: Сов. радио, 1977.- 432с.

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ ОПТИМИЗАЦИИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ФИЗИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ**

Д. Н. Докшин, Л. С. Зеленко

Самарский государственный аэрокосмический университет

имени академика С.П. Королева

(национальный исследовательский университет),

г. Самара

Изучение адсорбционных процессов представляет большой интерес как с практической, так и с теоретической точки зрения. Области применения адсорбции непрерывно расширяются, возникают новые технологические операции, основанные на адсорбции: облагораживание бензиновых фракций, очистка воздуха от вредных примесей, газовый анализ и др.

Широкое распространение в области моделирования адсорбционных явлений получил метод вероятностного клеточного автомата (ВКА). Но он имеет существенные ограничения при моделировании процессов, происходящих в адсорбате: не учитывает взаимодействие и диффузию молекул, необходим расчёт пространственных характеристик (объём, площади проекций) молекул.

В данной работе рассматривается альтернативный метод моделирования физической адсорбции на границе «газ–твёрдое тело» на уровне межмолекулярных взаимодействий. В данном методе поведение адсорбата определяется потенциальной энергией взаимодействия его молекул, которая обычно определяется разложением Ван-дер-Ваальса:

$$U(r) = -\frac{C_6}{r^6} - \frac{C_8}{r^8} - \frac{C_{10}}{r^{10}} - \dots, \quad (1)$$

где  $r$  – расстояние между молекулами. Система молекул стремится к такому состоянию, в котором общая энергия молекул будет минимальной.

Таким образом, в общем случае моделирование поведения этой системы представляет из себя решение задачи многомерной глобальной оптимизации. Вероятностные характеристики адсорбции и десорбции определяются аналогично методу ВКА.

Система моделирования разрабатывается на языке C# платформы NET, архитектура системы построена на основе модульного проектирования с расчётом на дальнейшую модификацию. Настройки системы разделены на общие настройки (справочники, редко изменяемые данные) и настройки модели (настройки конкретного эксперимента) и могут быть сохранены как локально в системе, так и экспортированы в XML-файл, и при необходимости импортированы обратно. Программная система представлена в виде оконного приложения и работает в диалоговом режиме.

В системе предусмотрена визуализация состояния адсорбата. В текущей реализации учитывается взаимодействие молекул в одном слое адсорбата. В ходе выполнения моделирования выполняется сбор статистики состояния молекулярной системы и динамически строится график адсорбционного процесса, отображающий общие тенденции поведения системы. При необходимости пользователь может воспользоваться функцией отладки процесса моделирования и пошагово наблюдать за состоянием процесса, получая полную информацию о состоянии системы на момент останова: состав адсорбата, свойства молекул, вероятностные характеристики адсорбции и десорбции, параметры взаимодействия молекул и т.д.

В ходе отладки процесса моделирования или по его завершению пользователь может экспортировать статистику моделирования, а также состояние молекулярной системы (свойства и состав молекул адсорбата). Экспорт этих данных выполняется в файлы MSExcel. При этом в случае экспорта статистики сразу строятся графики: общий график адсорбции (рис. 1), график состава адсорбата, графики состава адсорбированного и десорбированного веществ.

В текущей версии программной системы для определения потенциалов взаимодействия молекул используется формула (1). В ней не учитываются углы поворота молекул относительно друг друга и адсорбента. Помимо добавления данной функциональности в следующих версиях планируется реализация алгоритмов подбора коэффициентов и

степеней функций взаимодействия, усовершенствование производительности существующих алгоритмов (распараллеливание, использование суперкомпьютеров), а также расширение набора инструментов системы для удобства проведения вычислительных экспериментов, например, возможность проведения серии экспериментов.

Также планируется использовать экспорт состояния молекулярной системы для её трёхмерного отображения.



Рис. 1. Общий график адсорбции

## УСТРОЙСТВО РЕГИСТРАЦИИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ РАЗРЯДОВ

А. Б. Ильин, П. Г. Плохотниченко

Самарский государственный аэрокосмический университет  
имени академика С.П. Королева  
(национальный исследовательский университет),  
г. Самара

На находящийся в космическом пространстве космический аппарат (КА) постоянно воздействуют факторы космической среды. Под действием этих факторов КА приобретает некоторый электрический заряд. Знак и величина электрического заряда и потенциала КА зависят как от свойств среды, в которой проходит полет, так и от свойств самого КА, в первую очередь от электрофизических характеристик материалов