



ние (7) приходим к уравнению в частных производных Гамильтона – Якоби – Беллмана

$$\varepsilon \frac{\partial V}{\partial a} \cdot X(a, \phi, r) + \varepsilon \frac{\partial V}{\partial \phi} \cdot Y(a, \phi, r) + \frac{\partial V}{\partial \phi} \cdot \omega(r) + \frac{\partial V}{\partial r} \cdot \frac{dr}{dt} + \varepsilon \sum_{k=1}^2 b_k a_k^2 + U = 0. \quad (10)$$

Здесь  $\frac{dr}{dt} = O(\varepsilon)$ ,  $U = -\varepsilon c \left[ (u_\alpha^o)^2 + (u_\beta^o)^2 \right]$ , где  $u_\alpha^o$  и  $u_\beta^o$  определяются

выражениями (8–9).

Для определения приближенного решения уравнения Гамильтона – Якоби – Беллмана используется стандартный метод усреднения. В этом случае управление удастся определить аналитически, то есть осуществить синтез управления.

Так, например, приближенно оптимальное управление, когда  $F = 0$ , имеет вид

$$u_\alpha = \frac{\sqrt{b_1} a_1 \sin \gamma_1 + \sqrt{b_2} a_2 \sin \gamma_2}{\sqrt{c\omega_\theta}}, \quad u_\alpha = \frac{\sqrt{b_1} a_1 \cos \gamma_1 + \sqrt{b_2} a_2 \cos \gamma_2}{\sqrt{c\omega_\theta}}.$$

### Литература

1. Ярошевский В.А. Движение неуправляемого тела в атмосфере. Москва. Машиностроение. 1978..
2. Заболотнов Ю. М., Любимов В.В. Вторичные резонансные эффекты при вращении твердого тела вокруг неподвижной точки // Механика твердого тела. 2002. № 1. С. 49-59.
3. Заболотнов Ю. М., Наумов О.Н. Движение спускаемой капсулы относительно центра масс при развертывании орбитальной тросовой системы // Космические исследования. 2012. Т. 50. № 2. С. 177-187.
4. Летов А.М. Динамика полета и управление. Москва. Наука. 1969. 360 с.

Д.В. Кирш, А.В. Куприянов

## ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК В ТРЁХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

(Самарский государственный аэрокосмический университет  
имени академика С.П. Королёва)

### Введение

Кристаллическая решётка – это присущее кристаллам регулярное расположение частиц, характеризующееся периодической повторяемостью в трёх измерениях.



Задача структурной идентификации кристаллической решётки является одной из основных задач рентген-дифракционного анализа. Для её решения был предложен эффективный подход, основанный на сравнении параметров, идентифицированных у исследуемой решётки, с параметрами эталонных решёток [1]. Точная структурная идентификация кристаллической решётки с применением указанного подхода требует наличия большой базы заранее смоделированных решёток, параметры которых будут выступать в качестве эталонных.

В настоящей работе описывается разработанная информационная система, позволяющая моделировать кристаллические решётки в трёхмерном пространстве по заданному набору параметров.

### 1. Исходные параметры моделирования

Ввиду периодичности кристаллической решётки для её описания достаточно знать параметры её элементарной ячейки. В основе разработанной системы моделирования лежит представление элементарной ячейки в виде тройки некопланарных векторов – основных векторов трансляции.

Исходными параметрами для моделирования кристаллической решётки были выбраны следующие:

1. Длины трёх сторон  $l_1, l_2, l_3$  и величины трёх углов  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  (рисунок 1).

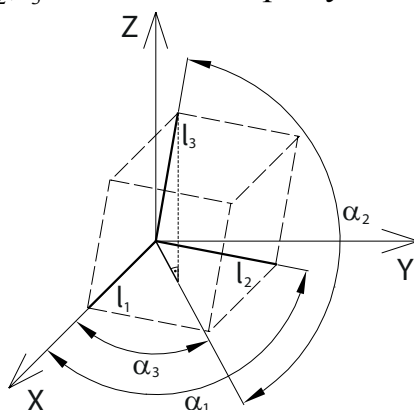


Рис. 1. Задаваемые параметры элементарной ячейки

2. Количество узлов решётки по каждому из векторов трансляции  $N_1, N_2, N_3$ .
3. Величины сдвига решётки относительно начала координат  $s_1, s_2, s_3$ .
4. Углы поворота решётки вокруг координатных осей  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ .
5. Дисперсии случайного смещения узлов относительно их изначального положения  $D_1, D_2, D_3$ .

Изображённый на рисунке 1 способ задания углов элементарной ячейки для моделирования кристаллической решётки отличается от способа задания углов, принятого в кристаллографии (рисунок 2). Он позволяет описывать все типы элементарных ячеек, причём его основным преимуществом является возможность независимого изменения углов друг от друга.

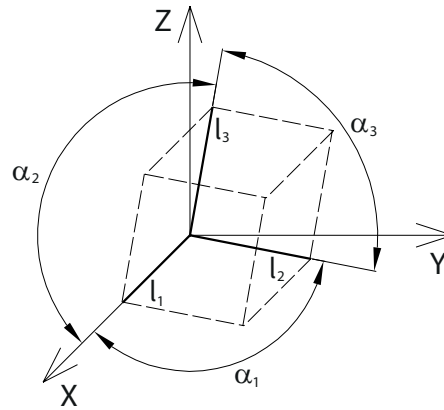


Рис. 2. Основные параметры элементарной ячейки Браве

## 2. Моделирование идеальной кристаллической решётки

Кристаллическая решётка, в которой отсутствуют дефекты, примеси и другие нарушения упорядоченности расположения её узлов, называется идеальной.

Для определения координат узлов идеальной кристаллической решётки необходимо вычислить тройку основных трансляционных векторов, определяющих элементарную ячейку Браве:

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} l_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} l_2 \cdot \cos(\alpha_1) \\ l_2 \cdot \sin(\alpha_1) \\ 0 \end{pmatrix}; \vec{r}_3 = \begin{pmatrix} l_3 \cdot \cos(\alpha_2) \cdot \cos(\alpha_3) \\ l_3 \cdot \cos(\alpha_2) \cdot \sin(\alpha_3) \\ l_3 \cdot \sin(\alpha_2) \end{pmatrix}.$$

Кристаллическую решётку, полученную путём трансляции элементарной ячейки Браве, можно представить в виде трёхмерной регулярной сетки. Координаты её узлов  $\vec{g}_k = (g_{k1}, g_{k2}, g_{k3})$ ,  $k = \overline{0, N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 - 1}$  находятся из следующего декартова произведения:

$$\{i_1 \cdot \vec{r}_1, i_1 = \overline{0, N_1 - 1}\} \times \{i_2 \cdot \vec{r}_2, i_2 = \overline{0, N_2 - 1}\} \times \{i_3 \cdot \vec{r}_3, i_3 = \overline{0, N_3 - 1}\}.$$

Полученная решётка имеет следующие особенности:

1. Один из узлов решётки совпадает с началом координат.
2. Решётка имеет вид параллельных слоёв (двухмерных решёток) одинаковой структуры, расположенных в плоскостях:

$$Z = i_3 \cdot l_3 \cdot \cos(\alpha_3), i_3 = \overline{0, N_3 - 1}.$$

В случае моделирования кристаллической решётки, случайным образом расположенной в пространстве, следует избавиться от указанных особенностей.

Для устранения первой особенности изменим координаты каждого узла решётки на вектор смещения  $(s_1, s_2, s_3)^T$ :

$$\vec{g}_k^I = \vec{g}_k + (s_1, s_2, s_3)^T.$$

Для устранения второй особенности повернём всю решётку на углы поворота  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$  вокруг каждой из координатных осей:

$$\vec{g}_k^{II} = M_Z(\varphi_3) M_Y(\varphi_2) M_X(\varphi_1) \vec{g}_k^I,$$



где  $M_x, M_y, M_z$  – матрицы поворота в трёхмерном пространстве соответственно вокруг  $X, Y, Z$  – координатных осей.

На рисунке 3 изображены две смоделированные идеальные кубические решётки, различающиеся расположением в пространстве (поворотом вокруг координатных осей).



Рис. 3. Пример моделирования идеальной кубической решётки  
а) исходное расположение решётки без сдвигов и поворотов, б) случайное расположение решётки в пространстве

### 3. Моделирование искажённой кристаллической решётки

Описанный выше способ позволяет моделировать идеальные решётки, однако, в реальности всегда существуют как нарушения в структуре самого кристалла, так и некоторая погрешность определения координат узлов. Для моделирования особенности реальных измерений искажим идеальную решётку – добавим к координатам узлов решётки значения белого гауссовского шума:

$$\bar{g}_k^{III} = \bar{g}_k^{II} + (P_1, P_2, P_3)^T,$$

где  $(P_1, P_2, P_3)$  – значения нормально распределённого трёхмерного случайного вектора с нулевым математическим ожиданием и дисперсиями  $(D_1, D_2, D_3)$ .

На рисунке 4 изображены две смоделированные искажённые кубические решётки, различающиеся дисперсиями шума.



Рис. 4. Пример моделирования искажённой кубической решётки  
а) искажение только по вертикальной оси ( $D_1=0.1, D_2=D_3=0$ ), б) искажение по всем координатным осям ( $D_1=D_2=D_3=0.1$ )



### **Заключение**

Разработанная информационная система моделирования кристаллических решёток в трёхмерном пространстве позволяет смоделировать любую решётку по заранее заданным параметрам, причём, параметры моделирования можно задавать и изменять независимо друг от друга.

Полученные в результате моделирования решётки могут быть использованы для детального исследования разрабатываемых методов параметрической идентификации кристаллических решёток – определение свойств инвариантности к положению решётки в пространстве, независимости от размера решётки, устойчивости к искажениям координат узлов.

### **Литература**

1. Куприянов, А. В. О наблюдаемости кристаллических решёток по изображениям их проекций [Текст] / А.В. Куприянов, В.А. Соيفер // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 2. – С. 249-256.
2. Куприянов, А. В. Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве [Текст] / А.В. Куприянов, Д.В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.

Вячеслав Котов

## **РЕШЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЯВЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОМАГНЕТИЗМА RAM-SEM SIMULATION SUITE**

(Представительство ESI Group)

За последние десятилетия обеспечения электромагнитной совместимости технических средств становится главной целью для всех отраслей промышленности. Производители должны гарантировать, что их продукция отвечает правилам международного EMC стандарта. С ростом использования бортового электронного оборудования, соблюдение правил EMC на ранней стадии разработки является одним из важнейших технических вопросов, а возможность моделирования EMC является перспективным направлением, для сокращения временных и материальных затрат.

### **Решатели RAM-SEM/FD, 3D Maxwell в области электромагнетизма**

Решатель RAM-SEM/FD (конечно-разностный метод) позволяет создать точный и быстрый расчет электромагнитной среды.

В случае решения задач электромагнитной совместимости достаточно просто описать идеальные электромагнитные волны, в то время как реалистичные модели передающих и приемных устройств разработаны в программе, чтобы соответствовать экспериментальным условиям на пути к виртуальной звукоизолирующей камере.