



УДК 621.385

O.O.ZARIPOV, G.SH.ABIDOVA

**ANALYSIS OF THE MATHEMATICAL METHODS FOR DETERMINATION
INFORMATION PARAMETER DESCRIBED BY GAUSS'S FUNCTION**

Гаусс функцияси билан ифодаланувчи маълумотли параметрларни аниқлаш учун математик усулларнинг таҳлил натижалари кўриб чиқилган. Ҳозирги даврда нанотехнологиялар мустақил илмий йўналишига ажралиб чиқаётганлигини намоён этиб, у иқтисодий тармоқлар учун янги имкониятлар яратмоқда. Гаусс функцияси билан ифодаланувчи қўшилиб кетган чўққиларнинг гуруҳларини тавсифловчи эгри чизиқлар келтирилган. Чўққининг маълумотли параметрларини аниқловчи математик моделлар таҳлили натижаси асосида аппаратли қурилмаларнинг тузилмаси, ўрганилаётган чўққиларнинг маълумотли параметрлари соддалашади.

Таянч сўзлар: ўта-тоза моддалар, тозалик даражаси, адсорбцион ускуна, чўққининг боши, охири ва экстремуми.

Рассматриваются результаты анализа математических методов для определения информативных параметров, описываемых функцией Гаусса. Показано, что в настоящее время нанотехнологии выделяются в самостоятельное научное направление, которое дает новый импульс для развития отраслей экономики. Представлены кривые, характеризующие группу слитых пиков, описываемых функцией Гаусса. На базе полученных результатов анализа математических моделей, определяющих информативные параметры пика, происходит упрощение при построении аппаратных устройств на основе информационных параметров исследуемых пиков.

Ключевые слова: особо чистые вещества, степень очистки, адсорбционная установка, начало, конец и экстремум пика.

Results of the analysis of the mathematical methods are considered in article for determination information parameter, described by Gauss's function. It is shown that at present nanotechnologies stand out in independent scientific direction, which gives the new pulse for development of the branches of the economy. The presented curves characterizing group merged peak, described function Gausses. On base got result of the analysis of the mathematical models, defining information parameters peak, occurs the simplification at building hardware device, information parameters under investigation peak.

Keywords: specifically-cleaner material, cleaning degree, adsorption installation, beginning, the end and extreme peak.

Известно, что решение таких фундаментальных задач, как прямое превращение тепловой и солнечной энергии в электрическую, создание сверхпроводящих материалов, термически устойчивых материалов, в том числе для развития нанотехнологий, находится в прямой зависимости от решения задачи получения особо чистых веществ.

Существуют такие системы очистки, как ректификационные колонки, устройства на основе центрифуги, устройства в которых используются поверхностное натяжение и устройства, где применяется эффект адсорбции.

Получить особо чистые вещества с процентным содержанием микропримесей менее $10^6\%$ возможно, в основном, с помощью адсорбционной установки с большим количеством используемых колонок. При промышленном производстве количество колонок в этой установке составляет от 5000 до 10000 штук.

Чтобы реализовать данную задачу, требуется такое же количество усилителей, аналого-цифровых преобразователей и устройств для определения начала и конца пика. Использование

персонального компьютера может практически полностью заменить требуемое количество аналого-цифровых преобразователей и усилителей [1]. Однако учитывая, что определение информативных параметров пика следует выполнять в реальном времени для обеспечения работоспособности системы очистки требуется использование нескольких сотен персональных компьютеров. Экономически выгодно использовать цифровые устройства определения информативных параметров выходного пика.

Изучение количественной стороны распределения концентраций вещества в эволюционной зоне, близкое к Гауссовому, приводит к установлению и изучению функциональной зависимости между участвующими в данном явлении переменными величинами. Если такую функциональную зависимость можно выразить аналитически, т.е. в виде одной или нескольких формул, то мы получаем возможность исследовать эту функциональную зависимость средствами математического анализа.

В адсорбционной установке абсолютное разделение двух и более сорбатов – трудно достигаемый процесс [2]. Поэтому с помощью математического анализа рассмотрим определения начала, конца и экстремумов неполностью разделенных пиков. Следует отметить, что в этом случае конец предыдущего пика является началом следующего, и $x=x_1$, если $f(x_1+\Delta x) < f(x_1)$ при любых Δx (положительных и отрицательных), достаточно малых по абсолютной величине [3]. Так, например, функция $y=f(x)$, график которой изображен на рис.1, имеет максимум при $x=x_1$.

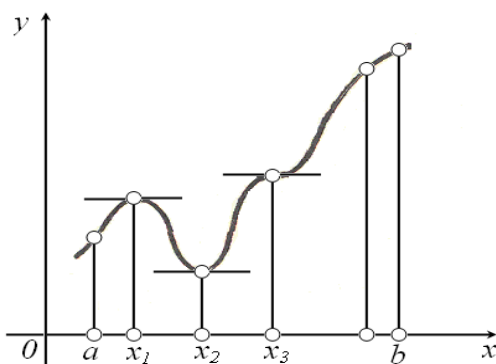


Рис. 1. Зависимость в виде кривой, характеризующей группу невыраженных слитых пиков.

Определение минимума пика. Функция $f(x)$ имеет минимум (minimum) при $x=x_2$, если $F(x_2+\Delta x) > f(x_2)$.

При любых Δx – как положительных, так и отрицательных, – достаточно малых по абсолютной величине определена зависимость в виде кривой, характеризующей группу невыраженных слитых пиков (рис.1).

Например, функция $y=x^4$, при $x=0$ имеет минимум, так как $y=0$ при $x=0$ $y>0$ при других значениях x [4].

В связи с определениями максимума и минимума следует обратить внимание на следующие обстоятельства:

- Функция, определенная на отрезке, может достигать максимума и минимума только при значениях x , заключенных внутри рассматриваемого отрезка.

- Максимум и минимум функций не являются соответственно ее наибольшим и наименьшим значениями на рассматриваемом отрезке: в точке максимума функция имеет наибольшее значение лишь по сравнению с теми значениями, которые она имеет во всех точках, достаточно близких к точке максимума, а в точке минимума – наименьшее значение лишь по

сравнению с теми значениями, которые она имеет во всех точках, достаточно близких к точке минимума.

Так, на рис.2 изображена функция, определенная на отрезке $[a, b]$, которая при $x=x_1$ и $x=x_3$ имеет максимум, при $x=x_2$ и $x=x_4$ имеет минимум, но минимум функции при $x=x_4$ больше максимума функции при $x=x_1$.

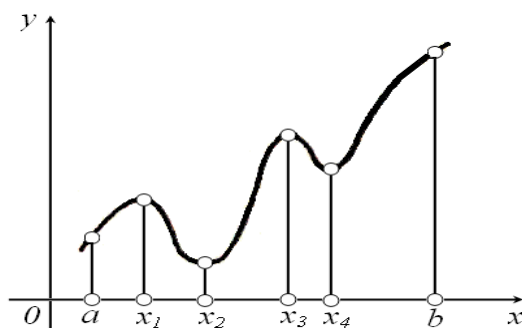


Рис.2. Зависимость в виде кривой, характеризующей группу выраженных слитых пиков.

При $x=b$, значение функции больше любого максимума функции на рассматриваемом отрезке.

Экстремальные значения функции и их расположение на отрезке $[a, b]$ в известной степени характеризуют изменение функции в зависимости от изменения аргумента.

Теперь укажем метод нахождения экстремальных значений. Предположим, для определенности, что в точке $x=x_1$ функция имеет максимум. Тогда при достаточно малых по абсолютному значению приращениях $\Delta x (\Delta x \neq 0)$ имеет место $f(x_1 + \Delta x) < f(x_1)$, т.е. $f(x_1 + \Delta x) - f(x_1) < 0$. Но в таком случае знак отношения

$$\frac{f(x_1 + \Delta x) - f(x_1)}{\Delta x}$$

определяется знаком Δx , а именно:

$$\frac{f(x_1 + \Delta x) - f(x_1)}{\Delta x} > 0 \text{ при } \Delta x < 0,$$

$$\frac{f(x_1 + \Delta x) - f(x_1)}{\Delta x} < 0 \text{ при } \Delta x > 0.$$

Согласно определению производной имеем:

$$f'(x_1) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_1 + \Delta x) - f(x_1)}{\Delta x}.$$

Если $f(x)$ имеет производную при $x=x_1$, то предел, стоящий справа, не зависит от того, как при этом Δx стремится к нулю (оставаясь положительным или отрицательным). Однако если $\Delta x \rightarrow 0$, оставаясь отрицательным, то $f'(x_1) \geq 0$. Если же $\Delta x \rightarrow 0$, оставаясь положительным, то $f'(x_1) \leq 0$.

Поскольку $f'(x_1)$ есть определенное число, не зависящее от способа стремления Δx к нулю, то два последних неравенства совместимы только в том случае, если $f'(x_1) = 0$.

Аналогичным образом метод доказывается и для случая минимума функции.

Вышеизложенному соответствует следующий очевидный геометрический факт: если в точках максимума и минимума функция $f(x)$ имеет производную, то касательная к кривой $y=f(x)$ в этих точках параллельна оси ox . Действительно, из того, что $f'(x_1) = \operatorname{tg} \varphi = 0$, где φ - угол между касательной и осью ox , следует, что $\varphi = 0$ (рис.1).

Пусть функция $f(x)$ непрерывна в некотором интервале, содержащем критическую точку x_1 , и дифференцируема во всех точках этого интервала (кроме, быть может, самой точки x_1). Если при переходе слева направо через эту точку производная меняет знак с минуса на плюс, то функция имеет в этой точке минимум.

Таким образом:

а) если $f'(x) > 0$ при $x < x_1$, $f'(x) < 0$ при $x > x_1$,

то в точке x_1 функция имеет максимум;

б) если $f'(x) < 0$ при $x < x_1$, $f'(x) > 0$ при $x > x_1$,

то в точке x_1 функция имеет минимум. При этом надо иметь в виду, что условия а) или б) должны выполняться для всех значений x , достаточно близких к x_1 , т.е. во всех точках некоторой достаточно малой окрестности критической точки x_1 .

Предположим сначала, что производная меняет знак с плюса на минус, т. е. что для всех x , достаточно близких к точке x_1 , имеем

$$f'(x) > 0 \text{ при } x < x_1,$$

$$f'(x) < 0 \text{ при } x > x_1.$$

Применяя теорему Лагранжа к разности $f(x)-f(x_1)$, получим

$$f(x)-f(x_1) = f'(\xi)(x-x_1),$$

где ξ - точка, лежащая между x и x_1 .

1) Пусть $x < x_1$;

тогда:

$$\xi < x_1, f'(\xi) > 0, f'(\xi)(x-x_1) < 0;$$

и, следовательно,

$$f(x)-f(x_1) < 0,$$

или,

$$f(x) < f(x_1). \quad (1)$$

2) Пусть $x > x_1$;

тогда:

$$\xi > x_1, f'(\xi) < 0, f'(\xi)(x-x_1) < 0,$$

и, следовательно,

$$f(x)-f(x_1) < 0,$$

или

$$f(x) < f(x_1). \quad (2)$$

Соотношения (1) и (2) показывают, что для всех значений x , достаточно близких к x_1 , значения функции меньше, чем значения функции в точке x_1 . Следовательно, в точке x_1 функция $f(x)$ имеет максимум.

Аналогичным образом доказывается вторая часть – о достаточном условии минимума [4].

Пусть в точке $x=x_1$ имеем $f'(x_1) = 0$ и для всех x , достаточно близких к точке x_1 , выполняются неравенства

$$f'(x) > 0 \text{ при } x < x_1,$$

$$f'(x) < 0 \text{ при } x > x_1.$$

Тогда при $x < x_1$ касательная к кривой образует с осью ox острый угол – функция возрастает, а при $x > x_1$ касательная образует с осью ox тупой угол – функция убывает; при $x = x_1$ функция переходит от возрастания к убыванию, т. е. имеет максимум.

Если в точке x_2 имеем $f'(x_2) = 0$ и для всех значений x , достаточно близких к точке x_2 , то выполняются неравенства

$$f'(x) < 0 \text{ при } x < x_2,$$

$$f'(x) > 0 \text{ при } x > x_2,$$

При $x < x_2$ касательная к кривой образует с осью ox тупой угол – функция убывает, а при $x > x_2$ касательная к кривой образует с осью ox острый угол – функция возрастает. При $x = x_2$ функция переходит от убывания к возрастанию, т. е. имеет минимум.

Если при $x = x_3$ имеем $f'(x_3) = 0$ и для всех значений, достаточно близких к x_3 , выполняются неравенства

$$f'(x) > 0 \text{ при } x < x_3,$$

$$f'(x) > 0 \text{ при } x > x_3,$$

то функция возрастает как при $x < x_3$, так и при $x > x_3$. Следовательно, при $x = x_3$ функция не имеет ни максимума, ни минимума. Именно такой случай имеет место для функции $y = x^3$ при $x = 0$.

Действительно, производная $y' = 3x^2$, следовательно,

$$y'|_{x=0} = 0, y'|_{x<0} > 0, y'|_{x>0} > 0,$$

а это значит, что при $x = 0$ функция не имеет ни максимума, ни минимума.

Как известно, для полного определения площади пика на выходе адсорбционной установки, описываемой функцией Гаусса, достаточно определить начало, конец, экстремум и дисперсию пика.

Опишем определение точки перегиба с помощью математического анализа.

Рассмотрим на плоскости кривую $y = f(x)$, являющуюся графиком однозначной дифференцируемой функции $f(x)$.

Допустим, что кривая обращена выпуклостью вверх на интервале (a, b) , если все точки кривой лежат ниже любой ее касательной на этом интервале.

Отметим, что кривая обращена выпуклостью вниз на интервале (b, c) , если все точки кривой лежат выше любой ее касательной на этом интервале.

Кривую, обращенную выпуклостью вверх, будем называть выпуклой, а обращенную выпуклостью вниз – вогнутой.

На рис.3 показана кривая, выпуклая на интервале (a, b) и вогнутая на интервале (b, c) .

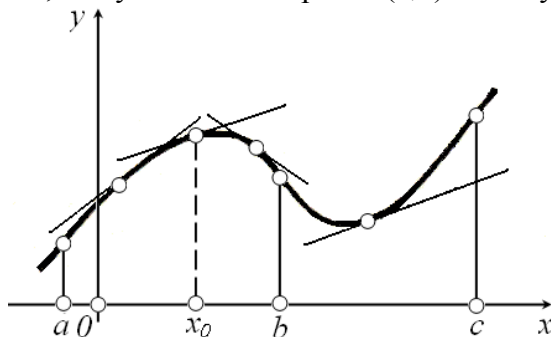


Рис.3. Зависимость в виде кривой, характеризующей одиночный слитый пик.

Направление выпуклости кривой – важная характеристика ее формы. Настоящая работа посвящена в том числе установлению признаков, по которым можно было бы, исследуя функцию $y=f(x)$, судить о направлении выпуклости ее графика на различных интервалах.

Возьмем на интервале (a,b) произвольную точку $x=x_0$ (рис.3) и проведем касательную к кривой в точке с абсциссой $x=x_0$. Данные будут достоверны, если мы установим, что все точки кривой на интервале (a,b) лежат ниже этой касательной, т.е. что ордината любой точки кривой $y=f(x)$ меньше ординаты y касательной при одном и том же значении x [5].

Уравнение кривой имеет вид:

$$y=f(x). \quad (3)$$

Уравнение же касательной к кривой в точке $x=x_0$ имеет вид:

$$\bar{y} - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

или

$$\bar{y} = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0). \quad (4)$$

Из уравнений (3) и (4) следует, что разность ординат кривой и касательной при одном и том же значении x равна:

$$y - \bar{y} = f(x) - f(x_0) - f'(x_0)(x - x_0).$$

Применяя теорему Лагранжа к разности $f(x) - f(x_0)$, получим:

$$y - \bar{y} = f'(c)(x - x_0) - f'(x_0)(x - x_0),$$

(где c лежит между x_0 и x), или:

$$y - \bar{y} = [f'(c) - f'(x_0)](x - x_0).$$

К выражению, стоящему в квадратных скобках, снова применяем теорему Лагранжа, тогда:

$$y - \bar{y} = f''(c_1)(c - x_0)(x - x_0), \quad (5)$$

(где c_1 лежит между x_0 и c).

Рассмотрим сначала случай, когда $x > x_0$. Здесь $x_0 < c_1 < c < x$; так как $x - x_0 > 0$, $c - x_0 > 0$ и так как, кроме того, по условию, $f''(c_1) < 0$, то из равенства (5) следует, что $y - \bar{y} < 0$.

Проанализируем теперь случай, когда $x < x_0$. Здесь $x < c < c_1 < x_0$ и $x - x_0 < 0$, $c - x_0 < 0$, а так как по условию $f''(c_1) < 0$, то из равенства (5) следует, что $y - \bar{y} < 0$.

Таким образом, мы доказали, что любая точка кривой лежит ниже касательной к кривой, каковы бы ни были значения x и x_0 на интервале (a,b) . А это означает, что кривая выпуклая.

Аналогичным образом доказывается, что если во всех точках интервала (b,c) вторая производная функции $f(x)$ положительна, т.е. $f''(x) > 0$, то кривая $y=f(x)$ на этом интервале обращена выпуклостью вниз (кривая вогнутая).

Рассмотренное выше можно использовать как математический аппарат для определения информативных параметров выходного адсорбционного пика. Как отмечалось выше, выходные информативные сигналы на выходе адсорбционной установки имеют ярко выраженные пикообразные формы, которые моделируются кривыми Гаусса:

$$y(t) = A \exp\left[-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (6)$$

Для определения минимума и экстремума пика используется первая производная функции (6), т.е.

$$y'(t) = y(t) \left(-\frac{t-t_0}{2\sigma} \right). \quad (7)$$

Теперь рассмотрим геометрическое значение определения начала, конца, экстремума и дисперсии пика с Гауссообразной формой с помощью производных по результатам аналого-цифрового преобразования. Как известно, производная функции выглядит следующим образом:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}. \quad (8)$$

Применительно к аналого-цифровому преобразованию, время между двумя тактовыми импульсами выражается в виде Δx из формулы (8), а значение Δy является разностью между выходным значением аналого-цифрового преобразователя (АЦП) и предыдущим выходным значением АЦП. Отсюда следует, что момент при $\Delta y \geq \kappa$, принимается как начало пика, а момент при $\Delta y \leq |\kappa|$, – как конец пика. Момент времени перехода значения Δy из положительного в отрицательное принимается как экстремум пика.

Как было указано выше, при определении дисперсии адсорбционного выходного пика, следует определить точку перегиба функции, с помощью второй производной функции Гаусса:

$$y''(t) = y(t) \left(-\frac{t\sigma + 2t + t_0}{2\sigma} \right). \quad (9)$$

Геометрическое значение второй производной применительно к аналого-цифровому преобразованию выглядит следующим образом:

$$\Delta z = \Delta y_n - \Delta y_{n-1}. \quad (10)$$

Момент времени перехода Δz из положительного значения в отрицательное, принимается как точка перегиба функции.

На основе полученных результатов анализа рассмотренных математических моделей, определяющих информативные параметры пика, производится упрощение при построении аппаратных устройств, определяющих информативные параметры исследуемых пиков. Практическое использование приведенных математических моделей намного упрощает построение автоматизированной системы управления адсорбционной установкой для получения особо чистых веществ [6].

References:

1. Dorohova E.N., Prohorova K.V. Analiticheskaya himiya. Fiziko-himicheskie metody'. - M., 2004. 467 s.
2. Mingulina E`I. Maslennikova G.N. Korovin N.V. Filippov E`L. Kurs obsch'ey himii. 2-e izd., pererab. i dop. - M.: Vy'ssh. shk., 1990. - 446 s: il. ME`I.
3. Andreev A.V., Gorlov M. I. Osnovy' e`lektroniki i e`lektricheskikh processov. - Rostov/D:Feniks, 2003. - 416 ss.
4. Vy'godskiy M.YA. Spravochnik po vy'sshey matematike - M.:AST:Astrel', 2006. - 991s.
5. Epifanov A. Vy'sshaya matematika. Standartny'e zadachi s osnovami teorii: Uchebnoe posobie KPT/Epifanov - Spbyu: Lan' KPT, 2016.-256 s.
6. Igumnov V.N. Fizicheskie osnovy' mikroe`lektroniki: uchebnoe posobie - M./Berlin:Direkt - Media, 2014.-358 s.:il.

*Зарипов Орипжон Олимович – доктор технических наук, проректор по учебной части ТГТУ;
Абидова Гулмира Шухратовна – кандидат технических наук, старший научный сотрудник-соискатель
кафедры «Система обработки информации и управление», ТГТУ,
Тел.: 318-05-05, E-mail: mir-miral@mail.ru.*