

шиностроения ОАО "Криворожгормаш", базовом предприятии Украины, осуществляющем серийный выпуск перфораторов.

#### Список литературы

1. **Неймирко С.И.** Теоретическое исследование виброзащитного устройства переносного пневматического перфоратора на базе двухмассовой системы с промежуточной массой / **С.И. Неймирко** // Вісник Криворізького технічного університету. - Кривий Ріг: КТУ. - Вип. 27, 2011. - С. 184-188.
2. **Неймирко С.И.** Теоретическое исследование виброзащитного устройства переносного пневматического перфоратора на базе динамического гасителя колебаний / **С.И. Неймирко** // Вісник Криворізького технічного університету: Кривий Ріг, КТУ. - Вип. 25, 2010. - С. 179-182.
3. **Выгодский М.Я.** Справочник по высшей математике / **М.Я. Выгодский** // М.: Астрель. АСТ, 2006. - 991 с.
4. Вибрации в технике: Справочник. Т6. Защита от вибрации и ударов / Под ред. **К.В. Фролова**. М.: Машиностроение, 1981. - 456 с.

Рукопись поступила в редакцию 02.03.12

УДК 535:546.47

Ю.С.РУДЬ, д-р техн. наук, проф., И.С. РАДЧЕНКО, канд. техн. наук, доц.,  
А.Ю. МАЛИНОВСКАЯ, преподаватель, ГВУЗ «Криворожский национальный университет»

### ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ЦИНКА

**Проблема и ее связь с научными и практическими задачами.** Изучение нанокристаллического состояния вещества является одной из самых актуальных современных научных проблем. Строение и свойства малых атомных агрегаций представляет значительный научный и прикладной интерес, так как являются промежуточными между строением и свойствами изолированных атомов и массивного (объемного) твердого тела. Однако вопрос о том, как быстро происходит и на каком этапе объединения атомов завершается формирование того или иного свойства массивного кристалла, до сих пор окончательно не решен. До настоящего времени не вполне ясно, каковы вклады поверхностных (связанных с границами раздела) и объемных (связанных в массиве частиц) атомов в свойства наноматериалов. Долгое время исследования в этом направлении проводились на изолированных частицах, которые содержали от нескольких десятков до нескольких сотен атомов. При этом размер частиц был не более 1 нм.

Научный интерес к нанокристаллическому состоянию твердого тела в дисперсном или компактном виде связан, прежде всего с наблюдаемыми различными размерными эффектами на свойствах наночастиц и нанокристаллитов, размеры которых соизмеримы или меньше, чем характерный параметр того или иного физического явления, который фигурирует в теоретическом описании какого-либо процесса (например, длина свободного пробега электронов проводимости при описании оптических свойств, размер магнитного домена в ферромагнетиках и т.д.).

Прикладной интерес к наноматериалам обусловлен возможностью значительной модификации и даже принципиального изменения свойств хорошо известных материалов при переходе в нанокристаллическое состояние. Этот интерес вызван также новыми возможностями, которые открываются нанотехнологиями в создании материалов и изделий из структурных элементов нанометрового размера. Например, в авиации применяются радиопоглощающие керамические материалы, в матрице которых беспорядочно распределены тонкодисперсные металлические частицы. Нитевидные монокристаллы (усы) и поликристаллы (волокна) обладают очень высокой прочностью, например, усы графита имеют прочность примерно 24,5 ГПа или в 10 раз больше, чем прочность стальной проволоки. Эти материалы применяются в качестве наполнителей легких композиционных материалов в аэрокосмической технике.

**Анализ исследований и публикаций.** К настоящему времени опубликовано довольно много работ, в которых изучались различные свойства как отдельных наночастиц так и различных нанокристаллических структур [1,2]. В этих работах рассматриваются некоторые свойства металлических частиц столь малых размеров, когда спектр электронных возбуждений становится дискретным. Именно для таких частиц должны наблюдаться квантовые размерные эффекты и начинают существенную роль играть поверхностные атомы. Они влияют на: температуру плавления; растворимость; электропроводность; токсичность; взрывоопасность; реакционную способность и т.д.

Практическое использование частиц малых размеров различных металлов часто ограничено малой их устойчивостью. Особенно малой устойчивостью характеризуются органометаллы, которые представляют большой интерес для целого ряда отраслей промышленности.

**Постановка задачи.** В настоящей работе были приготовлены коллоидные растворы цинка в разных средах (бензине, кристалле KCl и этилацетате), вычислены и измерены спектры поглощения и рассеяния света такими растворами в зависимости от их «возраста», т.е. в зависимости от времени, которое истекло с момента получения коллоидного раствора. Такие измерения спектров и сравнение их с вычисленными позволило установить размер коллоидных частиц и качественно проследить коагуляцию растворов.

**Расчет коэффициентов ослабления и рассеяния света.** Для расчетов коэффициентов ослабления света коллоидными растворами нами были использованы формулы теории Ми [3]. Необходимо отметить, что практически для подробных расчетов конкретных систем эти формулы стали использоваться лишь с появлением больших цифровых вычислительных машин.

По Ми [3] коэффициенты ослабления  $K_{осл}$  и  $K_{рас}$  света совокупностью сферических частиц в среде с показателем преломления  $m_0$  выражаются через суммы амплитуд парциальных электрических  $a_N$  и магнитных  $b_N$  колебаний

$$k_{осл} = C \frac{6\pi}{\lambda} m_0 \operatorname{Re} \sum (2N+1) \left( \frac{a_N^2}{2\alpha^3} + \frac{b_N^2}{2\alpha^3} \right); \quad (1)$$

$$k_{рас} = C \frac{6\pi}{\lambda} 2\alpha^3 m_0 \sum (2N+1) \left( \left| \frac{a_N}{2\alpha^3} \right|^2 + \left| \frac{b_N}{2\alpha^3} \right|^2 \right). \quad (2)$$

Амплитудные коэффициенты  $a_N$  и  $b_N$  являются функциями двух основных параметров: относительного диаметра  $\alpha = 2\pi r m_0 / \lambda$  и диэлектрической проницаемости вещества частиц  $\varepsilon = m^2 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ , где  $\varepsilon_1 = n^2 - \kappa^2$ ,  $\varepsilon_2 = 2n\kappa$  ( $n$  и  $\kappa$  - показатели преломления и поглощения соответственно);  $\lambda$  - длина волны падающего на частицу излучения;  $r$  - радиус частицы.

В случае  $\alpha \rightarrow 0$  коэффициент ослабления равен

$$k_{осл} = C \frac{6\pi m_0}{\lambda} I m \left( -\frac{m'^2 - 1}{m'^2 + 2} \right). \quad (7)$$

Согласно этой формулы  $K_{осл}$  не зависит от размера частиц и определяется только оптическими постоянными частиц и окружающей их среды  $m_0$

Для диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  частиц, используя свойство ее аддитивности, имеем

$$\varepsilon_1 = n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_1^b + \varepsilon_1^f; \quad (8)$$

$$\varepsilon_2 = 2n\kappa = \varepsilon_2^b + \varepsilon_2^f, \quad (9)$$

где  $\varepsilon_1^b$  и  $\varepsilon_2^b$  - действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости, обусловленные связанными электронами,  $\varepsilon_1^f$  и  $\varepsilon_2^f$  - действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости, обусловленные свободными электронами:

В этом случае найдем для коэффициента ослабления

$$k_{осл} = C \frac{18\pi}{\lambda} m_0^3 \frac{\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + 2m_0^2)^2 + \varepsilon_2^2}. \quad (12)$$

Максимум коллоидная полоса имеет при

$$\lambda_{\max} = 2\pi c \left( \frac{\omega_p^2}{1 + \varepsilon_1^b + 2m_0^2} - \frac{1}{\tau^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

Ее полуширина равна

$$H = \frac{2\pi c}{\omega_p^2} (1 + \varepsilon_1^b + 2m_0^2) \frac{1}{\tau}. \quad (14)$$

Здесь  $c$  - скорость света в вакууме.

Произведение максимального значения коэффициента ослабления  $k_{\max}$  на полуширину коллоидной полосы  $H$  равно

$$k_{\max}H = \frac{18\pi m_o^3}{1 + \varepsilon_1^b + 2m_o^2} C.$$

Отсюда находим объемную концентрацию металла в растворе

$$C = \frac{k_{\max}H(1 + \varepsilon_1^b + 2m_o^2)}{18\pi m_o^3}.$$

Если частицы имеют одинаковый размер, то  $C = NV$  ( $V$  - объем одной частицы) и можно определить плотность частиц.

Из (13) и (14) видно, что спектральное положение и полуширина её зависят от частоты релаксации. Для коллоидной частицы частота релаксации электронов проводимости может быть вычислена по формуле

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i} + \frac{U}{r}, \quad (15)$$

где  $\sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i}$  - учитывает столкновения электронов проводимости с фононами, дефектами решетки, электронами, с примесями;  $U$  - скорость электронов на уровне Ферми.

Из формул (13) и (14) следует, что увеличение частоты релаксации приводит к смещению максимума коллоидной полосы в длинноволновую область спектра («красное» смещение) и увеличению полуширины. Такой же эффект вызывает увеличение в малых частицах диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_1^b$ , обусловленной связанными электронами. Однако, если в малых металлических частицах диэлектрическая проницаемость уменьшается по сравнению с «массивным» металлом, максимум коллоидной полосы также смещается в длинноволновую область спектра, но ее полуширина уменьшается. Кроме того, из формулы (15) следует, что второе слагаемое играет существенную роль только для тех металлов, у которых  $\sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i} \leq 0,01$

В основу вычислений всегда приходится класть значения оптических постоянных металла, известные из литературы. Необходимо отметить, что определение  $n$  и  $k$  для металлов представляет собой довольно сложную экспериментальную задачу. Опыты по поляризации осложняются особенностями поверхностных слоев, которые вносят существенные погрешности. Опыты по измерению прохождения света через тонкие пленки требуют очень тонких пленок, толщина которых должна быть измерена независимым образом. Кроме того, величины  $n$  и  $k$  для пленок могут в некоторых случаях отличаться от таковых для «массивного» металла. Далее мы дадим анализ оптических постоянных цинка, полученных различными авторами.

*Оптические постоянные цинка.* Оптические постоянные цинка измерялись многими исследователями [5,6], как на монокристаллах по отражению  $s$ - и  $p$ -поляризованного света при разных углах падения, так и на поликристаллических пленках, осажденных в вакууме, обычным поляриметрическим методом. На рис. 1 показаны спектральные зависимости показателя преломления  $n$  и поглощения  $k$  массивного цинка по измерениям различных исследователей.

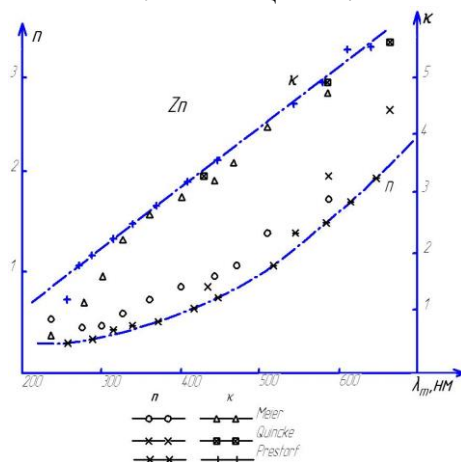


Рис. 1. Спектральная зависимость коэффициентов преломления и поглощения  $k$  для массивного цинка по данным различных авторов

В инфракрасной области, где диапазоны длин волн, которые использовались в работах [6] (1,23-10 мкм), перекрываются, можно убедиться, что результаты измерений на пленках и монокристаллах мало отличаются друг от друга и в средней части диапазона приблизительно удовлетворяют критерию применимости формул Друде-Зинера.

Усредненные микрохарактеристики электронов проводимости цинка по данным различных авторов существенно различаются между собой и зависят от спектральной области измерения и способа приготовления образцов. Это же можно сказать и о наблюдаемых вели-

чинах оптических постоянных.

В табл. 1 приведены значения оптических постоянных Zn, которые использовались в наших расчетах.

Таблица 1

| Оптические постоянные цинка |       |       |                |       |       |
|-----------------------------|-------|-------|----------------|-------|-------|
| $\lambda$ , нм              | $n$   | $k$   | $\lambda$ , нм | $n$   | $k$   |
| 250                         | 0,212 | 1,527 | 525            | 1,152 | 4,23  |
| 275                         | 0,273 | 1,8   | 550            | 1,267 | 4,469 |
| 300                         | 0,339 | 2,06  | 575            | 1,386 | 4,709 |
| 325                         | 0,409 | 2,312 | 600            | 1,509 | 4,95  |
| 350                         | 0,485 | 2,558 | 625            | 1,637 | 5,192 |
| 375                         | 0,566 | 2,8   | 650            | 1,769 | 5,435 |
| 400                         | 0,651 | 3,04  | 675            | 1,906 | 5,68  |
| 425                         | 0,742 | 3,279 | 700            | 2,046 | 5,926 |
| 450                         | 0,837 | 3,517 | 725            | 2,191 | 6,174 |
| 475                         | 0,938 | 3,754 | 750            | 2,34  | 6,424 |
| 500                         | 1,043 | 3,992 | 775            | 2,493 | 6,675 |

В области 275-800 нм действительная  $\varepsilon_1$  и мнимая  $\varepsilon_2$  части диэлектрической проницаемости описываются равенствами

$$\varepsilon_1(\lambda) = 1,9 - 6,7 \cdot 10^{-5} \lambda^2, \quad (16)$$

$$\varepsilon_2(\lambda) = 7,5 - 6,7 \cdot 10^{-8} \lambda^3 - 0,002 \lambda, \quad (17)$$

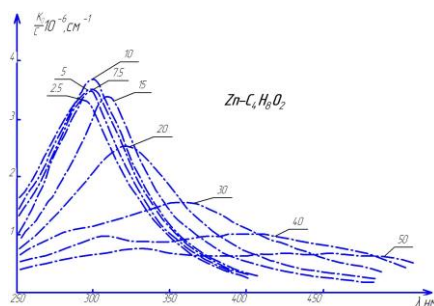
где  $\lambda$  выражена в нм.

**Методика эксперимента.** Органозоли цинка в этилацетате были получены электрическим распылением по методу высокочастотного разряда Сведберга [7]. Применение в качестве растворителей органических кислородосодержащих соединений устраняет обугливание дисперсной среды, которое может возникнуть от соприкосновения электрической дуги с растворителем. В нашей установке использовалось напряжение около 100 В, сила тока в высокочастотном контуре была 0,15-1,0 А. Использовались платиновые электроды. Как правило, использовались металлические стружки и мелкие кусочки металла. Время распыления составляло 10-15 мин. Полученные золи сразу же подвергались центрифугированию на протяжении 3-5 мин. Цинк является наиболее легко распыляемым металлом. Кроме того, он, как показывают наши исследования, дает сравнительно устойчивые (до одного месяца) органозоли.

Спектры поглощения света коллоидными растворами цинка были измерены на спектрофотометре СФ-4. Толщина кюветы 4,505 мм.

**Обсуждение результатов.** На рис. 2 показаны вычисленные спектральные зависимости коэффициентов ослабления света совокупностью сферических частиц цинка в этилацетате. В расчетах использовались оптические постоянные Zn, приведенные в табл. 1.

При этом плазменная частота  $\omega_p^2 = 111,1739 \cdot 10^{30} \text{ с}^{-2}$ ;  $\sum \frac{1}{\tau} = 0,1094 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ;  $U_F = 1,4451 \cdot 10^{15} \text{ нм/с}$ .



**Рис. 2.** Спектральная зависимость коэффициента ослабления света совокупностью сферических частиц цинка в этилацетате. Цифры у кривых показывают радиус частиц в нм

Показатель преломления этилацетата  $C_4H_8O_2$  был вычислен по формуле

$$m_o = 1,3625 + \frac{3336,39}{\lambda^2} \quad (\lambda \text{ выражено в нм}). \quad (18)$$

Из этого рисунка видно, что коллоидная полоса цинка в этилацетате в случае мельчайших частиц ( $r < 5$  нм) имеет максимум при  $\lambda_m = 293$  нм. Увеличение размеров частиц приводит к смещению полосы в длинноволновую область спектра, коэффициент ослабления в максимуме полосы  $k_{om}$  сначала увеличивается (до  $r = 10$  нм), а затем при дальнейшем увеличении радиуса  $r$  уменьшается.

Спектральное положение коллоидной полосы ослабления для системы Zn- $C_4H_8O_2$  дается зависимостью

$$\lambda_m = 0,0737 r^2 - 0,0187 r + 293,02 \quad (r \text{ выражено в нм}). \quad (19)$$

Из последнего равенства можно оценить «чувствительность»  $\lambda_m$  к изменению радиуса частиц цинка

$$\frac{d\lambda_m}{dr} = 0,1474 r - 0,0187, \quad (20)$$

т.е. имеется линейная зависимость.

Полуширина полосы с увеличением радиуса частиц увеличивается и ее зависимость от  $r$  записывается соотношением, нм

$$H = 0,0928r^2 + 0,216r + 65,44,$$

Согласно выражению (19) смещение максимума коллоидной полосы со временем в растворе происходит только в случае увеличения размеров частиц. При этом

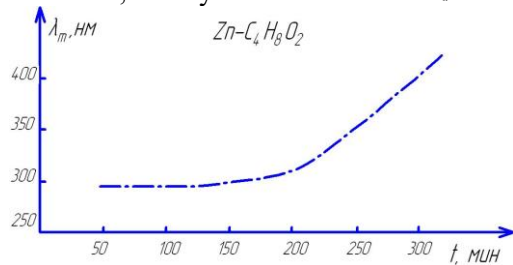
$$\frac{d\lambda_m}{dr} = (0,1474 r - 0,0187) \frac{dr}{dt}. \quad (21)$$

Увеличение размеров частиц будет происходить, если в растворе имеются атомы, способные прилипнуть к частицам. Пусть  $m_A$  - масса атома, кг;  $V_A$  - его средняя скорость, м/с;  $\gamma$  - вероятность прилипания атома к частице,  $N_A$  - концентрация конденсирующихся атомов, см<sup>-3</sup>;  $\rho$  - плотность частиц, г/см<sup>3</sup>. Тогда скорость роста сферической частицы определяется формулой

$$\frac{dr}{dt} = \gamma \frac{N_A m_A V_A}{4\rho}. \quad (22)$$

При коагуляции число атомов, находящихся в замкнутом объеме уменьшается, поэтому скорость увеличения радиуса частиц может уменьшаться со временем. На рис. 3 показана измеренная зависимость спектрального положения максимума коллоидной полосы ослабления света системой Zn-C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> от времени измерения.

Из рис 3 видно, что в промежутке времени 0-150 мин  $\lambda_m$  почти не изменяется. Это обусловлено тем, что чувствительность  $\Delta\lambda/\Delta r$  в области размеров 2-12 нм небольшая.



**Рис. 3.** Зависимость спектрального положения максимума коллоидной полосы  $\lambda_m$  для Zn-C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> от времени измерения  $t$  при комнатной температуре

При  $t > 150$  мин  $\lambda_m$  смещается в длинноволновую область спектра довольно быстро. Это обусловлено тем, что объединяются более крупные частицы и для них  $(\Delta\lambda/\Delta r) \geq 4$ . После 10 часов отстоя можно наблюдать образование осадка. Измеренный спектр поглощения показывает, что в растворе остаются взвешенные частицы Zn с  $r \sim 3-5$  нм.

При коагуляции твердых частиц происходит их слипание и образование по существу комков (2 и более слипшихся частиц). Такое образование кластеров частиц можно проследить, измеряя спектры поглощения. На рис. 4 показан вычисленный спектр поглощения двумя частицами Zn с  $r=10$  нм, которые находятся на различных расстояниях  $l$  (расстояние между центрами сферических частиц). При этом коэффициент ослабления равен

$$k_o = \frac{k_{o\parallel} + 2k_{o\perp}}{3}, \quad (23)$$

где

$$k_{o\parallel} = C \frac{6\pi}{\lambda} m_a I m(-A_{II}); \quad (24)$$

$$k_{o\perp} = C \frac{6\pi}{\lambda} m_o I m(-A_{\perp}); \quad (25)$$

$$A_{II} = a_1^M / \left( 1 - 2 \left( \frac{R}{l} \right)^3 a_1^M \right); \quad A_{\perp} = a_1^M / \left( 1 + \left( \frac{R}{l} \right)^3 a_1^M \right); \quad (26)$$

$$a_1^M = \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}. \quad (27)$$

Детальный расчет коэффициентов ослабления света цепочками из двух сферических частиц Zn показывает, что при  $l=2R$  максимум полосы смещается в длинноволновую область спектра, а полуширина полосы значительно увеличивается. Если  $l > 5R$  спектральное положение полосы и ее полуширина не изменяются.

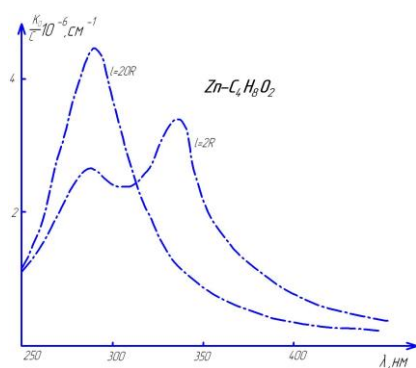


Рис. 4. Спектр поглощения света сферическими частицами цинка с  $r=10$  нм в этилацетате при различном расстоянии между ними  $l$

На рис. 5 показана спектральная зависимость коэффициента рассеяния света совокупностью сферических частиц Zn в этилацетате.

Из этого рисунка видно, что частицы с  $r \geq 10$  нм имеют малый коэффициент рассеяния. Наибольший коэффициент рассеяния имеют частицы с  $R = 30$  нм. Частицы Zn с  $R \geq 90$  нм в области 200-800 нм рассеивают все падающие частоты одинаково и  $k_p$  во всем частотном диапазоне не имеет ярко выраженного максимума.

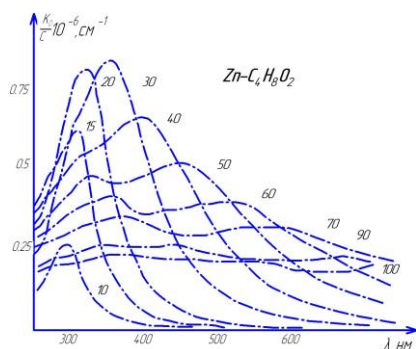
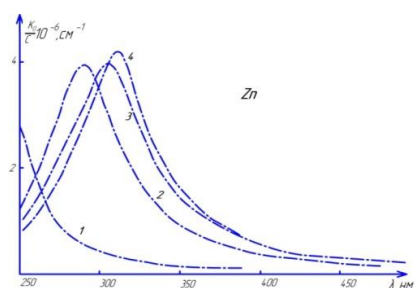


Рис. 5. Вычисленная спектральная зависимость коэффициента рассеяния света сферическими частицами Zn в этилацетате. Цифры у кривых показывают радиус частиц в нм

На рис. 6 показано вычисленные спектры поглощения света сферическими частицами Zn в различных средах: 1 - в воздухе ( $m_0 = 1$ ); 2 - в этилацетате (см. (29)); 3 - в бензине ( $m_0=1,5014$ ); 4 - в кристалле KCl. Показатель преломления кристалла KCl вычислялся по формуле

$$m_o = 1,4690 + \frac{7047}{\lambda}, \lambda - \text{в нм.}$$

Рис. 6. Вычисленные спектры поглощения света сферическими частицами Zn в различных средах: 1 - в воздухе ( $m_0=1$ ); 2 - в этилацетате; 3 - в бензине ( $m_0=1,5014$ ); 4 - в кристалле KCl



Из рис. 5 видно, что увеличение показателя преломления внешней среды (растворителя) смещает коллоидную полосу поглощения цинка в длинноволновую область спектра.

Таблица 2

Зависимость спектрального положения коллоидной полосы Zn от показателя преломления растворителя

| Система   | $m_0$  | $\lambda_m$ нм | H, нм |
|---|--------|----------------|-------|
| Zn - воздух                                       | 1      | < 250          |       |
| Zn - KCl  | 1,5414 | 312            | 60    |
| Zn - C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub> | 1,4022 | 290            | 62    |
| Zn - бензин                                       | 1,5014 | 305            | 56    |

Исследование коллоидального цинка в бензине, полученного на установке, показало, что такие золи значительно устойчивее, чем система Zn - C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>.

Рабинович и др. [8] исследовали органозоли щелочных и щелочноземельных металлов, которые были получены также конденсацией паров. В этой работе делается вывод, что эти органозоли являются системами ионно-стабилизированными. Следовательно, здесь, как и у гидрозолей, стабилизатором является некоторый третий компонент. Он создает на поверхности коллоидной частицы двойной электрический слой.

В таком случае устойчивость органозолей металлов будет определяться электрическими свойствами растворителя: поляризацией ориентации и дипольного момента его молекул. Стабилизирующая оболочка может быть построена их ионов и диполей растворителя.

Недостаточность экспериментальных данных по устойчивости органозолей металлов не позволяет построить строгую теорию агрегативной устойчивости.

**Выводы.** 1. Были получены методом Сверберга органозоли цинка в этилацетате и конденсацией паров в парафине. Исследовано устойчивость органозолей цинка. Устойчивость органозолей цинка определяется наличием двойного электрического слоя, а, следовательно, электрическими свойствами растворителя.

2. Вычислены коэффициенты ослабления и рассеяния света совокупностью сферических частиц Zn в этилацетате и бензине. Показано, что процесс коагуляции частиц цинка можно проследить во времени измеряя спектры ослабления света.

3. Система Zn - C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> менее устойчивая, чем система Zn-бензин.

#### Список литературы

1. Григорьева Л.К., Нагаев Э.Л., Чижик С.П. Малые металлические частицы в физике и химии. – Природа, 1988. - №6. - С. 4-11.
2. Морохов И.Д., Трусов Л.И., Чижик С.П. Ультрадисперсные металлические среды. М.: Атомиздат, 1977. - 264 с.
3. Mie G. Beiträge zur Optik trüber Medien speciell kolloidaler Metallösungen. Ann. Phys., 1908. Vol. 25. S. 377-445.
4. Шифрин К.С. Рассеяние света в мутной среде. М. Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1951. - 289 с.
5. Motulevich G.P., Shubin A.A. – J. N. T. P, 1969. - Vol.29. - 24 p.
6. Mosteller L.P., Wooten F. Phys. Rev, 1968. - V.171. - P. 743.
7. Николаева М.А., Преис Е.М. Исследование агрегативной устойчивости органозолей металлов. Коллоидный журнал, 1946. - №6. - С.409-414.
8. Рабинович А.И., Каргин В.А., Фодиман Е.В. Журнал физической химии, 1931. - №2. - С.64 – 68.

Рукопись поступила в редакцию 28.04.12

УДК 681.51: 622.7

А.І. КУПІН, д-р техн. наук, доц., ДВНЗ «Криворізький національний університет»

### ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОБҐРУНТУВАННЯ ВИБОРУ МЕТОДІВ НАВЧАННЯ БАГАТОВИМІРНИХ НЕЙРОМЕРЕЖЕВИХ СТРУКТУР ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

Виконано аналіз існуючих методів навчання багатовимірних нейромережових структур. Шляхом комп'ютерного моделювання досліджено найбільш ефективні методи навчання. Надано рекомендації застосування обраних методів на прикладі завдань багатовимірної апроксимації для збагачувальної технології.

**Проблема та її зв'язок з практичними задачами.** Зараз все частіше для вирішення прикладних завдань інформатизації та автоматизації в умовах складних виробництв застосовують різноманітні технології інтелектуального керування [1]. При цьому одним з базових підходів для побудови математичних моделей у процесі апроксимації, ідентифікації, класифікації є застосування багатосарових нейронних мереж (НМ) різної архітектури.

На сьогодні у теорії штучних нейронних мереж немає чітких відповідей на конкретні питання однозначного вибору тієї чи іншої архітектури та найбільш ефективного методу навчання (параметризації). Тому більшість дослідників діють емпіричним способом, обираючи з певної множини потенційно можливих альтернатив кращий варіант за визначеними критеріями та в умовах конкретної технології.

**Аналіз останніх досліджень, публікацій та постановка завдання.** Для навчання (параметризації) багатовимірних нейромережових структур, призначених для подальшої ідентифікації та керування складними технологічними процесами (ТП) в режимі реального часу, необхідно застосовувати методи, які відповідають певним вимогам. Згідно з [2] до цих вимог, перш за все, відносяться: швидкість збіжності, обчислювальна робастність, вимоги щодо оперативної пам'яті ЕОМ тощо. На сьогодні серед існуючих методів цим вимогам у найбільшій мірі відповідають так звані методи 2-го порядку, а саме [2-6]:

Левенберга-Маркардта; Гауса-Ньютона; сполученого градієнта.

Тому подальший аналіз, дослідження та вибір потенційно найефективніших методів навчання нейронних структур технологічного призначення, запропонованих в [1], буде обмежений множиною саме цих методів. При цьому дуже важливим з точки зору автоматизації подальших розрахунків та моделювання є те, що зазначені методи реалізовані у складі найбільш потужних пакетів прикладних програм з емуляції нейромережових структур (MATLAB Neural Tools, Neuro Solutions, Statistical Neural Network тощо) [5,6].

**Викладення матеріалу та результати.** Усі вищезазначені методи засновано на розкладі функціоналів у ряд Тейлора до 2-го порядку включно. Такий розклад поблизу точки  $\Theta^*$  (теоретичного оптимуму параметрів НМ) буде мати такий вигляд [4]