

РЕФЕРАТЫ

УДК 539.194 : 681.3.06

О возможности структурно-группового анализа вещества по его молекулярным спектрам с применением машинных корреляционных таблиц. Грибов Л. А., Дементьев В. А., Тищенко А. И., Эляшберг М. Е., Якупов Э. З. «Автометрия», 1975, № 1, с. 3—11.

Описан принцип построения корреляционных таблиц, хранящихся во внешней памяти ЭВМ, для автоматического поиска возможных структурных группировок после ввода в машину ИК- и масс-спектров вещества.

Приведен алгоритм одновременной обработки информации, содержащейся в ИК- и масс-спектрах вещества.

Рассмотрены примеры расшифровки структуры веществ по их спектрам.

УДК 621.391.234

Представление электронного спектра поглощения через известные спектры поглощения простых хромофорных систем. Дробышев Ю. П., Нигматуллин Р. С., Соколов С. П. «Автометрия», 1975, № 1, с. 11—13.

Идентификация комбинаций независимых хромофорных групп основывается на том, что ее электронный спектр поглощения (ЭСП) представляет собой суперпозицию ЭСП отдельных хромофоров. В связи с этим возникает задача отыскания во множестве спектров (мощность равна нескольким тысячам) линейной комбинации ЭСП с целочисленными коэффициентами аппроксимирующей с заданной степенью точности ЭСП исследуемого соединения. Решение данной задачи известными методами не представляется возможным из-за ее большой размерности.

В статье представляется эвристический алгоритм, позволяющий получить решение задачи аппроксимации заданного ЭСП линейной комбинации из 3 спектров отыскиваемой в коллекции из ~5000 ЭСП на ЭВМ БЭСМ-6 за 1 мин.

УДК 661.63.001.57 : 658.5.011.56

Аналитическое решение конкретной задачи физико-математического моделирования процесса дозирования реагентов в производстве суперфосфата методом структурной декомпозиции. Домбровский Е. А., Кричевский Е. С. «Автометрия», 1975, № 1, с. 13—18.

На примере многомерного технологического объекта (переработки апатита на суперфосфат) показана методика составления физико-математических моделей отдельных звеньев структуры с учетом скоростей реакций, материального и теплового балансов, а также гидродинамики потоков. Описаны пути формализации задачи путем объединения моделей отдельных звеньев. Составлена физико-математическая модель объекта.

УДК 621.391.234

Минимизация больших массивов данных. Дробышев Ю. П., Соколов С. П. «Автометрия», № 1, с. 19—23.

Минимизация исходного описания заданного множества объектов имеет два аспекта: а) уменьшение мощности исходного множества объектов посредством построения ϵ -сети; б) понижение размерности исходного пространства посредством построения оптимального базиса. Методы решения задачи минимизации описания в общей постановке неизвестны.

В работе отыскиваются алгоритмы решения частных задач, приводятся результаты численных экспериментов.

УДК 518.5 : 541.63+539.193

Моделирование на ЭВМ пространственной структуры органических соединений. Жоров Б. С. «Автометрия», 1975, № 1, с. 23—29.

Излагаются основные принципы построения комплекса программ, предназначенных для теоретического конформационного анализа (в приближении атом-атом потенциалов) широкого класса органических соединений. В качестве входных данных используется описание структуры молекулы (комплекса молекул), а все необходимые для конформационных расчетов массивы готовятся сервисной программой. Вычисление наряду с энергией молекулы обобщенных внутримолекулярных сил позволяет осуществлять быстрый поиск устойчивых конформаций при наличии многих варьируемых параметров. Управление режимами работы осуществляется программой настройки, позволяющей изменять математическую модель молекулы и исследовать влияние различных факторов на ее конформационные свойства.

УДК 681.3.001 : 518.5

Алгоритмы определения скользящего спектра. Оботнин А. Н., Страшин Е. Э. «Автометрия», 1975, № 1, с. 30—36.

Предлагаются устойчивые алгоритмы вычисления спектральных характеристик сигналов на скользящих интервалах времени, требующие для своей реализации небольшого числа арифметических операций и малого объема памяти. Алгоритмы синтезируются в виде структурных схем дискретных фильтров и позволяют проводить анализ сигналов в темпе с поступающей информацией.

УДК 517.948.33

Идентификация нестационарного нелинейного теплового объекта с применением фильтра Калмана. Гольцов А. С., Симбирский Д. Ф. «Автометрия», 1975, № 1, с. 36—42.

Рассматривается задача определения (идентификации) теплового состояния и скорости разрушения теплозащитного покрытия, а также коэффициента теплоотдачи на поверхности разрушения и температуры среды по выполняемым измерениям температур одной или нескольких точек внутри покрытия с использованием алгоритма фильтра Калмана. Выполнено математическое моделирование процедуры идентификации перечисленных параметров.

УДК 517.52 : 621.391

Оценки элементов дискретного преобразования Уолша. Попов С. С. «Автометрия», 1975, № 1, с. 43—48.

Рассматривается дискретное преобразование Уолша, переводящее последовательность $f(i)$ в последовательность

$$a_k = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f(i) w_k(i), \quad k=0, \dots, N-1,$$

где $w_k(i)$ — дискретные функции Уолша.

Получены оценки элементов последовательности a_k в случае, когда r -е разности последовательности $f(i)$ ограничены.

УДК 53.088 : 62-52

Параллельный корреляционный анализатор с устройством запаздывания на ОЗУ. Виленкин Ю. Б., Якименко В. И. «Автометрия», 1975, № 1, с. 48—52.

Рассматривается структурная схема параллельного цифрового корреляционного анализатора для определения текущих характеристик случайных процессов по полярному алгоритму. Предлагается методика использования ОЗУ универсальных ЦВМ для создания временно запаздывания одного или нескольких исследуемых процессов. Приведены технические параметры коррелятора.

УДК 681.335 : 681.325.05

Структура помехоустойчивого аналого-цифрового преобразователя. Браткевич В. В., Галалу Б. Г., Стахов А. П. «Автометрия», 1975, № 1, с. 52—57.

Приводится структура аналого-цифрового преобразователя, работающего в системе счисления, значения весовых коэффициентов которой определяются числами Фибоначчи. На нескольких примерах рассматривается работа аналого-цифрового преобразователя при воздействии на его входные цепи помех длительностью не более одного такта сравнения или приведенных к ним структурных сбоев цифровой части прибора. Результаты моделирования на ЦВМ и экспериментальные данные показывают, что предлагаемая структура полностью исключает влияние однократных отрицательных помех и значительно ослабляет влияние положительных помех.

УДК 681.142.621

Конвейерный аналого-цифровой преобразователь. Беломестных В. А., Вьюхин В. Н., Касперович А. Н., Литвинов Н. В., Соложенко В. И. «Автометрия», 1975, № 1, с. 57—64.

Анализируется соотношение интервала дискретизации и апертурного времени АЦП с точки зрения восстановления преобразованного АЦП сигнала. Осуществляется выбор структурной схемы АЦП, позволяющего производить до $20 \cdot 10^6$ преобразований в секунду с погрешностью 1—2%. Описывается реализация такого АЦП с малым апертурным временем. В разработанном АЦП конвейерного типа, вместо линий задержки измеряемого сигнала, используются устройства выборки и хранения, что позволило улучшить метрологические характеристики АЦП.

УДК 543.422 : 621.317.373

Оптимизация параметров фазометрических оптических приборов. Колпаков Ю. М., Пухонин В. В. «Автометрия», 1975, № 1, с. 65—69.

Предлагаются аналитические выражения для определения оптимальных параметров фазометрических фотометров с любыми фотометрическими диапазонами измерения.

В качестве критерия оптимальности используются минимум отношения шум/сигнал, минимум порога чувствительности (с учетом воздействия на результирующий сигнал системы АРУ) и линейность градуировочной характеристики. Исходными данными служат коэффициенты поглощения исследуемых веществ.

Предложены также аналитические выражения, позволяющие оценить линейность градуировочной характеристики и погрешность, возникающую при замене полученной характеристики линейной.

УДК 681.325.36

Датчик периодической последовательности равновероятных временных интервалов. Евзлина Г. В., Гер-Израелов Г. С., Тер-Хачатуров А. А. «Автометрия», 1975, № 1, с. 69—74.

Описывается принцип действия датчика периодической последовательности равновероятных временных интервалов, использующего свойства пуассоновского потока импульсов.

Излагаются результаты аналитического вывода статистических характеристик и приводятся сравнительные данные расчетов, экспериментальной проверки и моделирования работы датчика на ЭЦВМ. Датчик может быть использован в приборах статистической обработки экспериментальной информации, при моделировании различных процессов. Преимущества датчика являются простота реализации, стабильность статистических характеристик и легкость контроля их.