

На правах рукописи

ПОПКО ЕВГЕНИЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС  
ГЕНЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ  
ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ДИЭЛЕКТРИКАХ

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2009

Работа выполнена на кафедре вычислительной техники в ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург.

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор  
Смирнов Геннадий Борисович

Научный консультант: доктор физико-математических наук  
Вайнштейн Илья Александрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор  
Шориков Андрей Федорович

доктор физико-математических наук, профессор  
Мелких Алексей Вениаминович

Ведущая организация: Институт математики и механики УрО РАН,  
г. Екатеринбург

Защита состоится 16 февраля 2010 г. в \_\_\_\_:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.285.13 при ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, аудитория I главного учебного корпуса (зал ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале библиотеки ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Отзыв на автореферат в одном экземпляре, заверенный гербовой печатью, просим направить по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», ученому секретарю университета.

Автореферат разослан " \_\_\_\_ " января 2010 года.

Ученый секретарь диссертационного  
совета Д 212.285.13,  
кандидат физ.-мат. наук, профессор



Рогович В.И.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность.** Применение программных комплексов (ПК) в автоматизированных системах научных исследований при изучении различных объектов физики конденсированного состояния позволяет решать задачи структурной и параметрической идентификации механизмов сложных явлений по данным натурального эксперимента. Кроме этого появляется дополнительная возможность эффективного использования методов многофакторного вычислительного эксперимента для количественного анализа поведения твердотельных систем в широком диапазоне изменяемых структур и значений их параметров. Явление термолюминесценции (ТЛ) в диэлектриках, традиционно моделируемое системами обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с переменной структурой и многими параметрами, относится к классу объектов, для которого целесообразно применить описанную идеологию.

Существенный вклад в развитие теоретических основ математического моделирования процессов ТЛ внесли российские и зарубежные исследователи: В.В. Антонов-Романовский, Э.И. Адирович, В.С. Кортов, П. Браунлих, Р. Хен, С. МакКивер. Большинство известных программных пакетов для численного анализа ТЛ данных, как правило, не решают задачу идентификации (как структурную, так и параметрическую) в полном объеме. Предлагаемые методики либо заменяют существующие модели упрощенными аналитическими выражениями, либо используют локальные методы поиска. Это связано с тем, что в случае систем ОДУ, задающих модели ТЛ, возникают следующие сложности при решении задач идентификации: необходимо использование численных методов, производная оптимизируемой функции может быть найдена только приближенно, присутствуют локальные минимумы, большое количество параметров (в рассматриваемой задаче при аппроксимации требуется настраивать до 50 значений), большие диапазоны изменения параметров, необходимо производить настройку системы уравнений (подбирать количество уравнений и слагаемых).

Вышеприведенные факторы представляют определенную сложность для традиционных методик идентификации моделей. Альтернативным подходом в данном случае могут выступать эвристические методы, одним из которых является генетический алгоритм (ГА). ГА – это итеративная процедура эволюционного развития, которая работает с популяцией особей-решений, трансформируя ее во времени с помощью имитации принципов естественного отбора. Данный метод не имеет значительных математических требований к виду целевой функции, устойчив к попаданию в локальные минимумы, эффективен при решении крупномасштабных проблем оптимизации. ГА показали свою эффективность при решении различных оптимизационных задач физики твердого тела (построение кристаллических структур

и кластеров наночастиц, описание магнитных свойств в модели Изинга, расчеты в приближении локальной плотности двухъямного потенциала). Данный подход отличается гибкостью, универсальностью. Для мультимодальных задач большой размерности ГА, как правило, находят лучшее решение при меньших вычислительных затратах по сравнению с традиционными методиками.

Таким образом, с учетом всего вышесказанного ГА представляется перспективным подходом для идентификации ТЛ-моделей в реальных широкозонных материалах. Разработка такого рода программного комплекса с использованием генетических алгоритмов является актуальной задачей математического моделирования. За счет обоснованного принятия решений у исследователя появляются новые возможности по обработке и верификации экспериментальных ТЛ данных в кристаллах, как на стадии изучения априорной информации, так и на стадии численного анализа полученных результатов.

**Объект исследования.** Модели ТЛ-процессов и генетические алгоритмы для параметрической и структурной идентификации.

**Предмет исследования.** Реализация и условия применимости ГА к задачам моделирования ТЛ-процессов.

**Цель работы и задачи исследования.** Целью исследования является разработка программного комплекса моделирования процессов термолюминесценции в диэлектриках на основе применения генетических алгоритмов.

Для достижения поставленной цели в диссертации последовательно решены следующие задачи:

1) выделение особенностей актуального класса исследуемого явления, который характеризуется определенным комплексом механизмов термолюминесценции, задающих структуру математических моделей;

2) выбор прототипа ПК из имеющихся аналогов;

3) обоснование выбора генетических алгоритмов для моделирования процессов ТЛ.

4) модификация математической модели для выбранного класса ТЛ-моделей, которая позволит производить выбор требуемой зонной схемы путем построения системы дифференциальных уравнений;

5) подбор наиболее эффективных генетических операторов для решения задач идентификации ТЛ-моделей и разработка оригинального генетического алгоритма на их основе;

6) проектирование создаваемого программного комплекса генетического моделирования ТЛ-процессов в диэлектриках;

7) программирование, тестирование и настройка комплекса на основе известных частных моделей термолюминесценции.

**Научная новизна работы.** 1. Модифицирована обобщенная кинетическая модель термолюминесценции для многоголовушечных систем в кристаллах, которая позволяет с использованием ГА конструировать зонные схемы ТЛ-процессов на основе введенных битовых «выключателей».

2. Разработан новый генетический алгоритм с двоично-вещественным кодированием, осуществляющий одновременный перебор моделей и поиск оптимальных значений их параметров при аппроксимации экспериментальных ТЛ кривых.

3. Предложены и обоснованы с использованием полного многофакторного эксперимента новые модификации операторов мутации, селекции и кроссовера, обеспечивающие наилучшее быстроедействие алгоритма при заданной точности.

4. По сравнению с прототипом расширена структура интегрированного пакета для решения комплекса задач при моделировании процессов термолюминесценции на основе ГА за счет внедрения нового блока построения моделей.

**Защищаемые положения.** 1. С использованием битовых «выключателей» в структуре систем кинетических уравнений можно описывать широкий класс моделей ТЛ процессов в диэлектрических кристаллах, а также учитывать вероятные дополнительные механизмы при анализе зонных схем.

2. Созданный генетический алгоритм позволяет при обработке экспериментальных ТЛ кривых в едином цикле определять величины параметров заданной модели (идентификация в узком смысле), а также проводить поиск неизвестной зонной схемы и одновременную оценку ее параметров (идентификация в широком смысле).

3. Эмпирическое выражение, полученное в рамках полного 4-факторного эксперимента, дает возможность количественно оценивать влияние разных вариантов генетических операторов на целевую функцию.

4. Предложенная методика генетического моделирования позволяет оценить разбросы параметров зонных схем и выявить среди них наиболее сильно влияющие на форму ТЛ-пика.

5. Улучшенная по сравнению с прототипом структура программного комплекса позволяет расширить функциональность системы и решать задачи структурной идентификации ТЛ-моделей в диэлектриках.

**Практическая значимость работы.** Разработанные алгоритмы и программное обеспечение позволяют одновременно проводить параметрическую и структурную идентификацию моделей в отличие от традиционных методов. Созданный программный комплекс обеспечивает снижение временных затрат по сравнению с прототипом при аппроксимации экспериментальных ТЛ кривых с заданной точно-

стью. Имеется акт внедрения разработанного ПК, а также получены три Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ. Созданная система может использоваться в образовательном процессе при обучении студентов физических и информационных специальностей, а также при подготовке научных кадров высшей квалификации.

**Апробация работы.** Основные результаты и положения исследований докладывались и обсуждались на конференциях молодых ученых УГТУ-УПИ (Екатеринбург, 2004-2009), на I Международной научно-практической конференции «Современные информационные технологии и ИТ-образование» (Москва, 2005), на XIV и XV Международных конференциях по люминесценции (Китай, Пекин, 2005; Лион, Франция, 2008), на IV Международном симпозиуме по лазерам, сцинтилляторам и нелинейным оптическим материалам (Чехия, Прага, 2006), на X Международной школе-семинаре по люминесценции и лазерной физике ЛЛФ-2006 (Иркутск, 2006), на 6-й и 7-й европейских конференциях по люминесцентным детекторам и преобразователям ионизирующих излучений (Львов, Украина, 2006; Краков, Польша, 2009), на Международной научно-практической конференции «Новые информационные технологии в образовании» (Екатеринбург, 2007), на 15-й Международной конференции по твердотельной дозиметрии (Нидерланды, Делфт, 2007), на IV Уральском семинаре «Люминесцентные материалы и твердотельные детекторы ионизирующих излучений» (Екатеринбург, 2008).

**Публикации.** По теме диссертации имеется 28 публикаций, в том числе 7 статей в научных журналах, согласно перечням ВАК 2005 – 2009 гг., а также 3 Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 111 наименований, 4 приложений и содержит 136 страниц основного машинописного текста, 41 рисунок, 13 таблиц.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность решаемой проблемы, выделены научная новизна и практическое применение поставленных задач.

**В первой главе** проведен обзор существующих математических моделей термолюминесценции и современных программ моделирования кинетических процессов, произведен выбор прототипа.

Рассмотрен класс зонных схем, выбранный для исследования в данной работе: «одна ловушка – один рекомбинационный центр» (OTOR), система невзаимодействующих ловушек (NMTS), взаимодействующих ловушек (IMTS). Помимо этого, приведены феноменологические описания – модели первого, второго и общего порядков кинетики, модель с учетом распределения ловушек, описание кинетики Шо-

на-Клозенса, модели с учетом эффекта туннелирования, с учетом локализованных переходов, с учетом нескольких рекомбинационных центров [1, 2].

Выполнен литературно-аналитический обзор существующих программных пакетов, предназначенных для математического моделирования кинетических процессов, родственных для ТЛ. В качестве прототипа была выбрана система OSL-GA. Данный аналог обладает следующими достоинствами: возможность построения ТЛ-кривых для различных моделей, использование методик для аппроксимации экспериментальных данных в рамках исследуемой зонной схемы. Основным недостатком прототипа, выявленным в результате анализа, является то, что в нем не реализована возможность проведения структурной идентификации. Данный недостаток может быть устранен путем введения в систему процедуры глобальной оптимизации для поиска значений параметров и типа модели.

Был проведен анализ различных методов оптимизации, в результате которого для решения задач параметрической и структурной идентификации предложено использовать генетический алгоритм. Используя различные генетические операторы, исследователь может получать разные виды ГА. Кроме того, эволюционные алгоритмы различаются по дополнительным принципам: наличие механизмов адаптации параметров (адаптивные ГА), объединение с другими методами оптимизации (гибридные ГА), использование различных алфавитов для кодирования хромосом [3, 4].

**Вторая глава посвящена разработке алгоритмов параметрической и структурной идентификации. В данной главе производится адаптация структурированной обобщенной кинетической модели термолюминесценции, описывается методика работы генетического конструктора (ГК), значительное внимание уделяется эволюционным операторам, используемым в рамках данного подхода.**

В целях систематизации информации о различных механизмах ТЛ была модифицирована обобщенная кинетическая модель, в рамках которой исследователь может построить базовые зонные схемы OTO, NMTS и IMTS. За ее основу было взято описание многоголовушечных систем, представленное Хеном и МакКивером [1].

В приведенной ниже системе уравнений рассмотрены ловушки только электронного типа. При необходимости указанная система может быть расширена за счет включения дырочных ловушек.

Были введены так называемые битовые «выключатели»  $K = \{0, 1\}$ , позволяющие настраивать вид и количество кинетических уравнений в системе. В настоящей реализации используются 4 битовых «выключателя», в зависимости от состояния которых активируются определенные дополнительные слагаемые или даже целые уравнения в системе ОДУ:  $K_{ni}$  – включение в рассмотрение  $i$ -й активной ловушки (АЛ) с набором конкретных значений параметров;  $K_{mj}$  – подключение  $j$ -й

глубокой ловушки (ГЛ);  $K_X$  – наличие исходной концентрации рекомбинационных центров;  $K_q$  – учет механизма температурного тушения люминесценции.

С использованием «выключателей» изменение концентрации  $n_i$  заполненных АЛ описывается следующим уравнением:

$$K_{ni} \cdot \left[ \frac{dn_i}{dt} = -n_i \cdot s_i \cdot e^{\frac{-E_{ni}}{kT}} + n_c \cdot (N_i - n_i) \cdot A_{ni} \right], \quad (1)$$

где  $i = 1, 2, \dots, \eta$ . Здесь  $\eta$  – максимально допустимое количество обычных ловушек (одна ловушка есть всегда, т.е.  $K_{ni} \equiv 1$ );  $k$  – постоянная Больцмана;  $N_i$  – общая концентрация  $i$ -й АЛ, термоактивация с которой характеризуется энергией  $E_{ni}$  и частотным фактором  $s_i$ ;  $n_i$  и  $n_c$  – концентрации  $i$ -й АЛ и свободных электронов в зоне проводимости соответственно;  $A_{ni}$  – скорость захвата на  $i$ -ю ловушку. В случае если определенная  $i$ -я АЛ в модели не рассматривается, то  $K_{ni} = 0$  и соответствующее кинетическое уравнение в системе отсутствует;  $T$  – температура;  $t$  – время.

Для учета возможных конкурирующих процессов захвата используются термически несвязанные ГЛ:

$$K_{mj} \cdot \left[ \frac{dm_j}{dt} = n_c \cdot (M_j - m_j) \cdot A_{mj} \right], \quad (2)$$

где  $j = 1, \dots, \mu$ . Здесь  $\mu$  – максимально допустимое количество глубоких ловушек;  $M_j$  – общая концентрация  $j$ -й ГЛ;  $m_j$  – моментальная концентрация заполненной глубокой ловушки;  $A_{mj}$  – вероятность захвата на ГЛ.

Концентрация электронов в зоне проводимости описывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{dn_c}{dt} = \sum_{i=1}^{\eta} K_{ni} \cdot n_i \cdot s_i \cdot e^{\frac{-E_{ni}}{kT}} - n_c \cdot \sum_{j=1}^{\mu} K_{mj} \cdot (M_j - m_j) \cdot A_{mj} - \\ - n_c \cdot \sum_{i=1}^{\eta} K_{ni} \cdot (N_i - n_i) \cdot A_{ni} - n_c \cdot h \cdot A_h, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $A_h$  – скорость рекомбинации;  $h$  – концентрация рекомбинационных центров, изменение которой связано с интенсивностью ТЛ-свечения  $I_{TL}$ :

$$I = -\frac{dh}{dt} \cdot \gamma = n_c \cdot h \cdot A_h \cdot \left[ 1 + K_q \cdot s_q \cdot \exp\left(-\frac{E_q}{kT}\right) \right]^{-1}. \quad (4)$$

Коэффициент  $\gamma$  учитывает температурное тушение люминесценции, которое задается энергией активации  $E_q$  и множителем  $s_q$ . В данной работе рассматривается



модель с одним рекомбинационным центром (РЦ), однако возможно расширение предложенной модели за счет добавления дополнительных центров. В этом случае концентрации всех РЦ суммируются.

Начальное условие в момент времени  $t = 0$  имеет следующий вид:

$$h_0 = \sum_{i=1}^{\eta} K_{ni} \cdot n_{0i} + \sum_{j=1}^{\mu} K_{mj} \cdot m_{0j} + K_X \cdot h_X, \quad (5)$$

где  $h_X$  – исходная концентрация РЦ, присутствовавших в кристалле до облучения.

С использованием «выключателей» система (1) – (5) может быть расширена любыми слагаемыми или уравнениями, в зависимости от структуры модели, рассматриваемой исследователем. В рамках приведенной обобщенной системы уравнений (1) – (5) могут быть описаны, например, простейшие кинетические схемы термолюминесценции в твердых телах: OTOR –  $(\eta, \mu, K_X, K_q) = (1, 0, 0, 0)$ ; IMTS –  $(1, 1, 0, 0)$  и NMTS –  $(1, 0, 1, 0)$ .

Основным назначением адаптированной кинетической модели (1) – (5) является предоставление интерфейсных возможностей, с помощью которых в рамках ГА будет производиться перебор моделей в рамках численного конструирования разнообразных зонных схем. Термины эволюционного моделирования, используемые в описании алгоритмов, их определения и соответствующие им объекты решаемой задачи приведены в табл. 1. Данная таблица позволяет понять специфику применения ГА к решаемой задаче идентификации и систематизировать информацию об элементах алгоритмов.

В предлагаемой методике генетического конструирования предполагается, что одновременно оптимизируются структура модели и значения ее параметров. Генетический код особи в рамках такого подхода распадается на 2 части: двоичную и вещественную. Битовое кодирование задает структуру системы уравнений и указывает наличие в ней тех или иных элементов. Такой способ задания хромосом обусловлен необходимостью обеспечить дискретность и перебор различных вариантов зонных схем. Вещественная часть представляет собой вектор-массив значений параметров, задаваемых в явном виде.

Следует учитывать, что двоичное описание модели отличается от представления параметров в битовой кодировке. В данном случае каждый бит всего лишь отвечает за наличие определенного элемента (например, ловушки). Если в соответствующей позиции стоит 1, то элемент модели присутствует, если 0, то отключен. На рис. 1 хромосома, отвечающая за активные ловушки, может задать до 4 ловушек. Как видно из данного примера, одна из активных ловушек включена ( $\eta = 1$ ), в то время как глубокие ловушки отсутствуют ( $\mu = 0$ ). Приведенная на рисунке хромосома соответствует модели NMTS.

Таблица 1

## Термины эволюционного моделирования применительно к ТЛ-процессам

Термин	Определение	Пояснение для ТЛ-процессов
Хромосома	Последовательность из нулей и единиц или вещественное значение	Параметр модели или ее структурный элемент. Может быть задан с помощью вещественного и битового кодирования
Особь (состоит из генетического кода)	Набор хромосом, который и является вариантом решения задачи	Наборы параметров и структурных элементов, задающих модель
Битовая часть кода	Хромосомы, ответственные за структуру	Набор структурных элементов, задающих модель и вид системы уравнений
Вещественная часть кода	Хромосомы, ответственные за параметры	Набор параметров, задающих модель (например, для модели ОТОР – это $E_n, A_n/A_h, s, n_0/N$ )
Популяция	Набор особей (решений)	Множество моделей с определенными структурами и параметрами
Приспособленность особи	Значение целевой функции	Критерий, описывающий точность аппроксимации экспериментальных данных в рамках модели
Кроссовер	Операция, при которой две особи обмениваются своими генетическими кодами	Изменение значений параметров модели. Обмен структурными элементами (слагаемыми ОДУ) между моделями
Селекция	Отбор особей по какому-либо правилу	Отбор структур и параметрических наборов
Мутация	Случайное изменение одной или нескольких позиций в хромосоме	Случайное изменение значения одного параметра модели в диапазоне, задаваемом пользователем по определенному правилу. Случайное включение или выключение структурного элемента

$K_{ni}$				$K_{mj}$				$K_x$	$K_d$
1	0	0	0	0	0	0	0	1	0

Рис. 1. Часть генетического кода, задающая структуру системы

Таким образом, каждая особь состоит из 2 основных частей: битовой части генетического кода, задающей модельную структуру, и вещественной части генетического кода, содержащей значения параметров.

Каждому варианту решения задачи соответствует целевая функция, которая служит для оценки приспособленности особи. Нами предложено использовать в основе функции пригодности  $f$  показатель качества аппроксимации  $FOM$ , который ис-

пользуется во многих исследованиях ТЛ-процессов. Целевая функция в данном случае имеет вид

$$f = FOM = \frac{\sum_{i=1}^n |I_i^{calc} - I_i^{exp}|}{\sum_{i=1}^n I_i^{calc}} \cdot 100 \% , \quad (6)$$

где  $I^{calc}$  – расчетное значение интенсивности термолюминесценции, соответствующее данному набору параметров;  $I^{exp}$  – экспериментальное значение интенсивности;  $n$  – количество экспериментальных точек. Меньшее значение параметра  $FOM$  соответствует лучшему качеству аппроксимации.

Работа алгоритма начинается с создания исходной популяции. Случайным образом генерируются особи-модели, задаваемые структурой и параметрами. Количество особей  $N_p$  в популяции задается пользователем перед запуском алгоритма. Пример задания исходной популяции приведен на рис. 2, *a* в пространстве из двух модельных параметров – глубины ловушки  $E_n$  и частотного фактора  $s$ . На данном рисунке различная штриховка областей соответствует разным значениям  $FOM$ , приведенным в подрисуночной подписи для обозначенных линий уровня целевой функции. Квадратными символами обозначены особи, каждой из которых соответствует свой набор значений данных параметров. Отметим, что в начальной популяции значения  $FOM > 45 \%$ , а значит и качество аппроксимации, являются неудовлетворительными. На рис. 2, *b* приведено распределение окончательной популяции в том же пространстве. Видно, что в результате работы алгоритма большинство особей оказываются в областях локальных минимумов, где  $FOM < 5 \%$ .

Решение любой задачи с помощью ГА включает в себя помимо работы алгоритма предварительный подбор и настройку структуры и параметров эволюционных операторов в зависимости от специфики решаемой задачи. Существует множество различных вариантов исполнения внутренних операторов ГА – селекции, кроссовера и мутации. При этом процесс настройки ГА включает в себя выбор наиболее оптимальных генетических операторов с точки зрения скорости работы при необходимой точности решения и подстройку параметров отобранных эволюционных операторов для обеспечения наибольшего быстродействия алгоритма.

Для каждого оператора можно рассмотреть набор методов, наиболее часто встречающихся в литературе по эволюционному моделированию. Таким образом, задача сводится к подбору комбинации способов селекции, кроссовера и мутации, дающей наилучшие результаты по скорости при заданной точности для рассматриваемой задачи. Нами были рассмотрены наиболее распространенные варианты эволюционных операторов, которые приведены в табл. 2. Кроме этого, в столбце 5 перечислены варианты, предложенные нами: модифицированная турнирная селекция,

модифицированный 2-точечный линейный кроссовер и адаптивный оператор мутации.

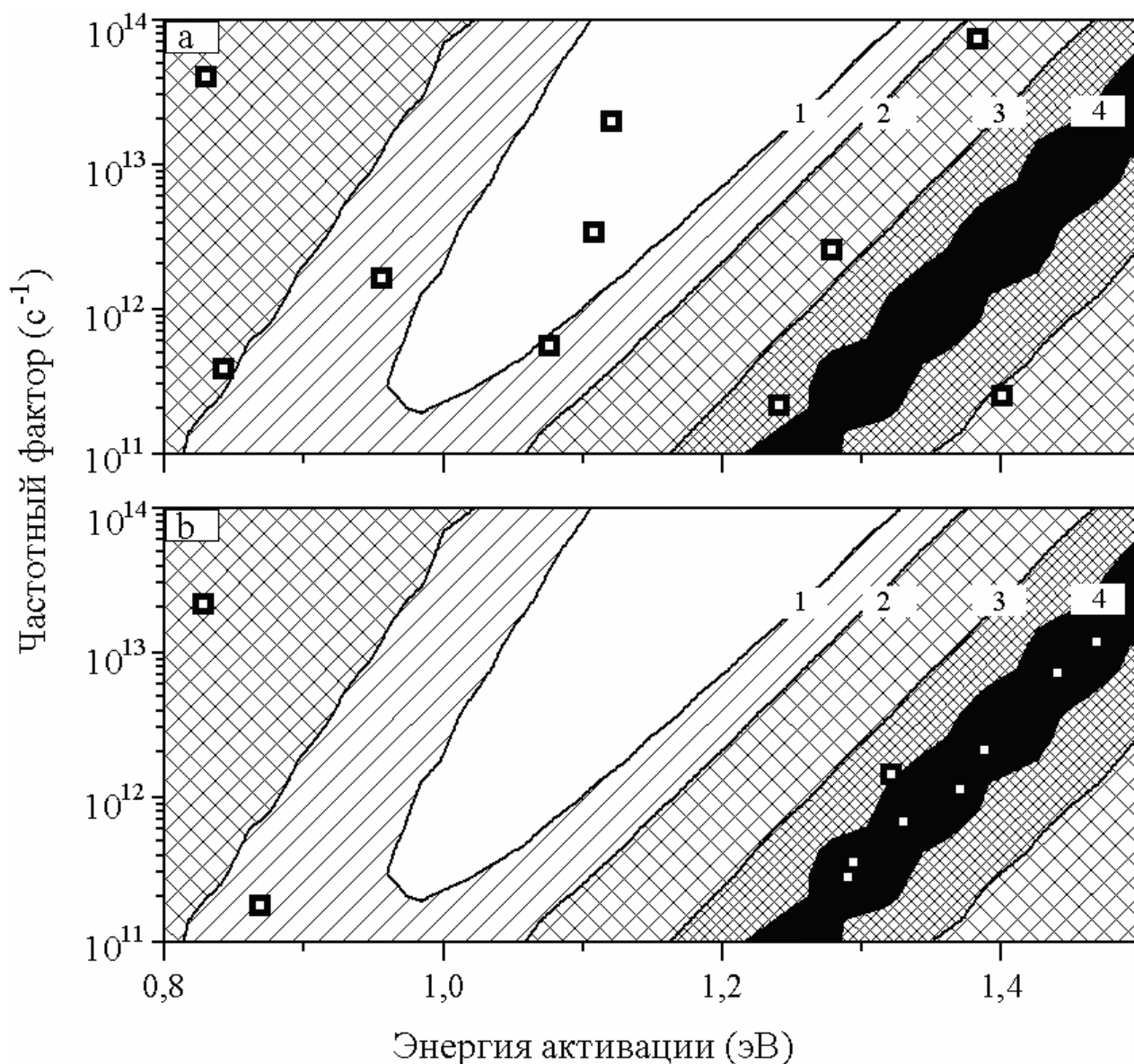


Рис. 2. Пример распределения популяции в пространстве параметров для двухловушечной модели OTOR: *a* – исходное поколение, *b* – последнее поколение.  
1 –  $FOM = 200\%$ ; 2 –  $180\%$ ; 3 –  $90\%$ ; 4 –  $45\%$ .

Перебор различных типов ГА производился путем комбинирования операторов из табл. 2 по правилам планирования полного 4-факторного эксперимента с различным числом уровней варьирования: сначала фиксировали параметры селекции, во вторую очередь – кроссовера структурной части, в третью – кроссовера вещественной части и в последнюю очередь варьировали параметры мутации. Для всех вариантов реализации были установлены одинаковые размер популяции  $N_p = 200$  и количество поколений  $N_g = 200$ .

## Предлагаемые эволюционные операторы

Тип оператора ГА	Реализация в алгоритме			
	$x_j = 1$	$x_j = 2$	$x_j = 3$	$x_j = 4$
1	2	3	4	5
Селекция ( $x_1$ )	На основе равномерного распределения [4]	Турнирная [4]	—	Модифицированная турнирная
Кроссовер структурной части ( $x_2$ )	1-точечный [4]	Однородный [4]	3-точечный [4]	2-точечный
Кроссовер параметрической части ( $x_3$ )	Плоский кроссовер	Арифметический кроссовер	Линейный	Модифицированный многоточечный линейный
Мутация ( $x_4$ )	Случайная с равномерным распределением [4]	Неоднородная Михалевича [4]	С нормальным распределением [4]	Модифицированная адаптивная

В качестве аппроксимируемых экспериментальных данных использовалась заранее построенная кривая термолюминесценции с заданными параметрами в рамках одноловушечной модели OTOR. Параметры модели:  $E_n = 1$  эВ,  $s = 10^{12} \text{ с}^{-1}$ ,  $A_n = 10^{-7} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $A_h = 10^{-9} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $N = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ ,  $n_0/N = 0.1$ .

В результате применения методики многофакторного вычислительного эксперимента получена эмпирическая функциональная зависимость

$$FOM(\%) = 6.683 - 0.201x_1 - 0.419x_2 - 0.463x_3 - 0.219x_4. \quad (7)$$

Кроме этого, значимыми являются все коэффициенты парных взаимодействий для нелинейной регрессии. Значения целевой функции для обоих случаев приведены в табл. 3. Кроме того, была проведена оценка адекватности. Значения расчетных критериев Фишера также приведены в табл. 3. Поскольку  $F_{расч} < F_{табл}$ , гипотеза об адекватности подтверждается для обоих типов регрессии.

В рамках линейного подхода показано, что наибольшее влияние на эффективность работы алгоритма в режиме локального поиска оказывают кроссовер параметрической части и кроссовер модельной части.  $FOM$  принимает наибольшее значение 5.381 % при условии  $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 1$ . Подобное качество аппроксимации считается удовлетворительным и было получено при подгонке экспериментальных кривых в различных независимых работах [2, 5, 6, 7]. Указанный результат служит обосно-

ванием для выбора порогового значения  $FOM = 5 \%$ , которое используется нами для перехода ГА в режим локального поиска.

Таблица 3

Полученные значения целевой функции и критерия Фишера

Параметр	Линейная регрессия	Нелинейная регрессия
$FOM_{min}$ $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 4$	1.475	1.571
$FOM_{max}$ $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 1$	5.381	5.333
$F_{расч}$	12.96	13.15
$F_{табл} p = 0.95$	19.49	

Критерий  $FOM$  принимает наименьшее значение 1.571 % при условии  $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 4$ . Проведенная настройка эволюционных операторов позволила улучшить качество аппроксимации по сравнению с наихудшим рассмотренным вариантом реализации в 3 раза. Полученные результаты можно считать обоснованием для использования значения  $FOM = 2 \%$  в качестве порогового для условия остановки работы ГА.

В рамках полученного наиболее эффективного ГА была дополнительно произведена адаптация внутренних параметров кроссовера и мутации. Было показано, что наилучшим выбором для модифицированного многоточечного оператора кроссовера является использование двух точек разрыва. Найдены пороговые значения для процедуры мутации генетического кода особей:

$FOM^{Th} = 5 \%$  (критерий перехода в режим локального поиска);

$p_{mut}^{Th} = 70 \%$  (нижняя граница изменения битового кода);

$\Delta p_{mut}^H = 7 \%$  и  $\Delta p_{mut}^L = 1 \%$  (приращения вероятности мутации в режимах настройки и локального поиска соответственно).

**В третьей главе представлено моделирование ПК, включающее в себя определение требований к системе и ее анализ. Также рассматриваются проектирование и реализация комплекса.**

Анализ программной архитектуры и документации позволил восстановить структуру основного прототипа и выделить подсистемы настройки и генерации параметров. На следующем этапе были восстановлены и приведены алгоритмы функционирования прототипа, на его базе предложено развитие структуры и алгоритмов системы. Структура синтезированного прототипа и предлагаемое решение изображены на рис. 3.

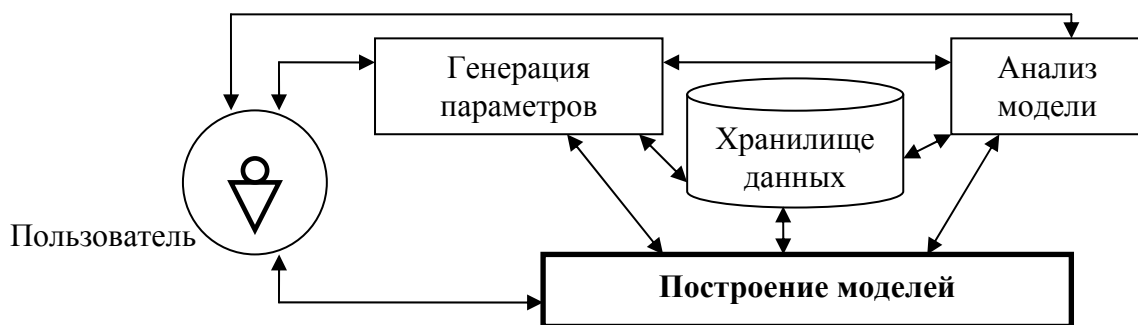


Рис. 3. Общая структура прототипа ПК (выделено предлагаемое улучшение структуры)

Основными базовыми элементами структуры являются модули, каждый из которых выполняет свою группу функций. Модуль «Генерация параметров» включает функции задания зонной схемы и входных параметров, решения систем уравнений и построения ТЛ-кривых. Блок «Анализ модели» реализует функции оптимизации (генетический алгоритм) и построение статистических отчетов. Внедрение в структуру модуля «Построение моделей» позволяет устранить недостатки прототипа, приведенные в первой главе, и получить требуемую функциональность системы.

По результатам анализа синтезирован алгоритм работы прототипа (рис. 4). Для возможности решения задач структурной идентификации алгоритм работы был подвержен модификации. Блок, который добавлен нами, выделен на рисунке. Как видно из рисунка, режим работы выбирается на основе запросов пользователя, и выполняемые задачи распределяются между соответствующими модулями.

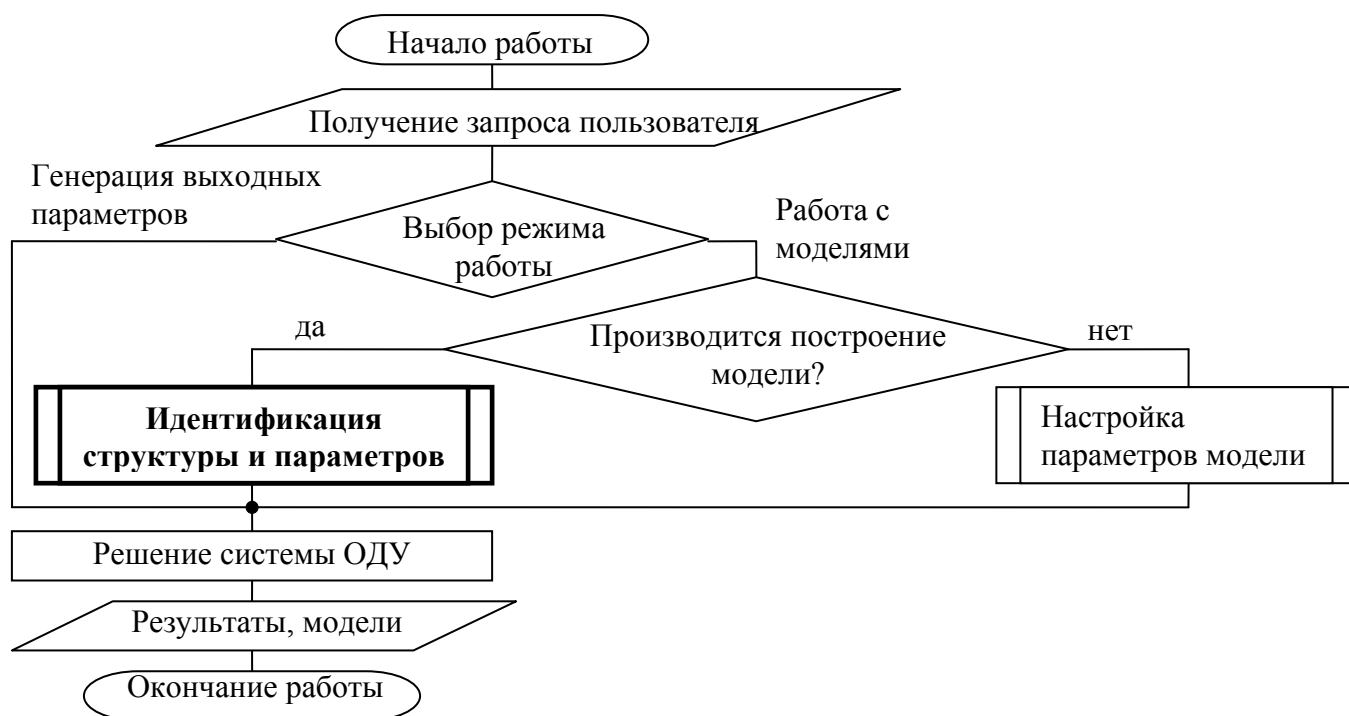


Рис.4. Алгоритм прототипа программного комплекса и предлагаемое решение (выделено предлагаемое расширение алгоритма)

Модель программного комплекса была представлена в виде кортежа:

$$P = \langle Name, Mods, Rels, Ints \rangle, \quad (8)$$

где *Name* – название программного комплекса; *Mods* – множество модулей комплекса; *Rels* – множество взаимосвязей между модулями; *Ints* – множество интерфейсов.

Модули описываются следующей кортежной моделью:

$$Mod = \langle Name, Ms, Rs, Inputs, Outputs \rangle, \quad (9)$$

где *Name* – название модуля; *Ms* – множество методов, реализованных в модуле; *Rs* – множество взаимосвязей между методами; *Inputs* – множество входных переменных, задаваемых пользователем; *Outputs* – множество выходных переменных.

Каждый метод, используемый в комплексе, реализован в виде отдельной законченной процедуры. Модель метода может быть представлена в виде кортежной модели:

$$M = \langle Name, O, Pars, Comp \rangle, \quad (10)$$

где *Name* – название метода; *O* – цель метода; *Pars* – множество параметров метода; *Comp* – множество процедур, являющихся составляющими метода.

Функциональная и информационная модели проектируемой системы были описаны в нотации IDEF. После этого был произведен выход на техническое задание и проектирование ПК.

**Четвертая глава посвящена тестированию разработанных алгоритмов на основе генерации кривых ТЛ и расчета их параметров, аппроксимации опытных ТЛ данных в рамках конкретной кинетической модели, а также анализу данных вычислительного эксперимента для заранее заданных моделей с одновременной настройкой структуры зонной схемы.**

Результаты решения соответствующих систем ОДУ показали, что ПК дает возможность исследователю получать новые и точные результаты при генерировании кривых термолюминесценции, а также изучать зависимости геометрических факторов формы пиков от параметров модели. В частности, были получены зависимости для полуширины, положения максимума и площади ТЛ-пика от исходной концентрации рекомбинационных центров в кристалле и от соотношения  $A_n/A_h$  для схемы NMTS с температурным тушением.

С помощью разработанного программного комплекса была произведена оценка адекватности используемой кинетической модели ТЛ-процессов для анионно-дефектных монокристаллов  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . ТЛ регистрировалась в диапазоне температур  $300 \div 600$  К при линейном нагреве со скоростью 2 К/с. Детальное описание экспериментальной установки и условия измерений приведены в [5].

Сначала для проверки однородности дисперсий результатов повторных измерений использовался критерий Кохрена. При его вычислении для различных интер-



валов температур и при сравнении с табличным значением было обнаружено, что однородность сохраняется в диапазоне 400 – 505 К (рис. 5). Затем анализируемые экспериментальные результаты были описаны в рамках модели (1,0,1,0) – NMTS с учетом температурного тушения. Результат аппроксимации показан на рис. 5. При этом значения модельных параметров ( $E_n = 1.25$  эВ,  $s = 1.1 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ,  $A_n/A_h = 80$ ,  $h_x/N = 2.5$ ,  $E_q = 1.01$  эВ,  $s_q = 1.6 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ), полученные для кристаллов оксида алюминия, находились в хорошем согласии с данными других авторов (см. ссылки в [5, 7]).

Далее была произведена оценка адекватности обобщенной кинетической модели с использованием критерия Фишера. Результаты показывают, что расчетное значение  $F_{расч} = 1.019$  не превышает табличные для уровней значимости 5 и 1 %, то есть модель (1,0,1,0) является адекватной для описанных экспериментальных данных.

Для оценки эффективности ПК в настоящей работе в качестве «экспериментальных» пиков использовались кривые, построенные в рамках зонных схем с заранее заданными параметрами. Для этого использовался оригинальный программный пакет GenTL, позволяющий моделировать процессы для различных зонных схем. Далее выполнялась аппроксимация с помощью встроенного модуля генетического конструктора. Максимальное число поколений составляло 300, размер популяции – 200 - 300 особей. Результаты работы ГК представлены в табл. 4, которая содержит список искомым моделей с разным количеством активных и глубоких ловушек,  $\eta$  и  $\mu$  соответственно.

Для каждой зонной схемы задавался свой диапазон поиска во множестве моделей и число  $R$  варьируемых параметров. Модели располагаются в порядке увеличения  $R$ . Как правило, для более сложных структур зонных схем задавалось пространство поиска большей размерности.

Как видно из табл. 4, генетический поиск обеспечивает достаточно хорошее качество аппроксимации. Для большинства моделей величина  $FOM$  не превышает 2 %, что близко к предельной оценке по выражению (7) (табл. 3). Также в табл. 4

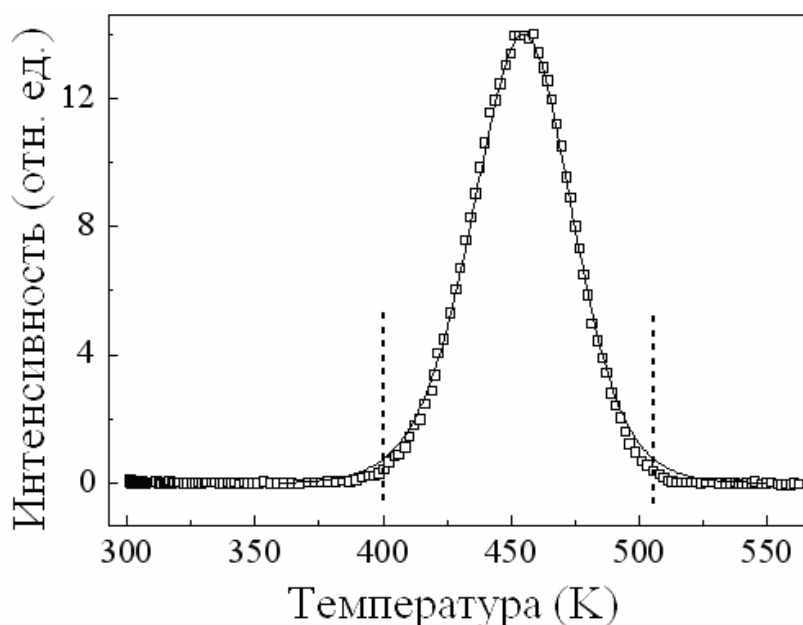


Рис.5. Результаты аппроксимации данных эксперимента из [5]. Символами обозначены экспериментальные данные, сплошная линия – рассчитанная кривая, штриховые линии – границы диапазона однородности дисперсий

представлены соответствующие номера поколений  $V$ , на которых были найдены зонные схемы. Видно, что ГК верно определяет искомую модель в пределах 100 поколений. При этом номер поколения, на котором найдена структура, не зависит от типа зонной схемы и количества варьируемых параметров. Соответствующие временные затраты поиска каждой модели приведены в табл. 4. Результаты показывают, что время расчета также практически не зависит от количества параметров.

Таблица 4

Описание рассмотренных моделей

Номер модели	Модель	$\eta$	$\mu$	$R$	$V$	Время, ч	$FOM$ , %
1	«1 ловушка (1-ловушечная ОТОР) с тушением»	1	0	20	7	5.4	0.60
2	«2 обычные ловушки+1 термически несвязанная ловушка с тушением»	2	1	20	10	8.9	1.09
3	«1 обычная ловушка +1 дырочная ловушка с тушением»	1	0	22	11	9.5	0.38
4	Система взаимодействующих ловушек с тушением	1	1	22	2	2.1	0.28
5	«3 ловушки (3-ловушечная ОТОР) с тушением»	3	0	22	15	8.4	1.75
6	«2 ловушки (2-ловушечная ОТОР) с тушением»	2	0	24	91	7.4	3.24
7	«1 обычная ловушка+1 термически несвязанная ловушка+1 дырочная ловушка»	1	1	24	62	1.4	0.78
8	Система невзаимодействующих ловушек	1	0	25	1	9.8	0.44

В табл. 5 представлены результаты аппроксимации моделей №1 – 4 из табл. 4. Такие параметры, как энергии активации ловушек  $E_n$ , в большинстве случаев определяются достаточно точно, со средней относительной погрешностью меньше 5%. В свою очередь значения соотношений  $A_n/A_h$  и частотного фактора  $s$  в некоторых случаях могут существенно отклоняться от «экспериментальных» (в 10 раз). При этом сохраняется высокое качество аппроксимации ( $FOM < 3\%$ ). Указанную достоверность численных оценок необходимо учитывать при анализе кривых ТЛ в реальных диэлектрических кристаллах.

Таблица 5

Результаты работы ГК при описании ТЛ-процессов

Параметр	Модель № 1		Модель № 2		Модель № 3		Модель № 4	
	Исх.	ГА	Исх.	ГА	Исх.	ГА	Исх.	ГА
$E_{n1}$ , эВ	1	1.001	1	1.004	1	1.01	1	1.005
$E_{n2}$ , эВ	-	-	1.3	1.333	-	-	-	-
$n_{01}/N_1$	0.1	0.098	0.1	0.1	0.1	0.099	0.1	0.097
$n_{02}/N_2$	-	-	0.1	0.1	-	-	-	-
$s_1$ , с <sup>-1</sup>	$1 \cdot 10^{12}$	$5.4 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{12}$	$3.2 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{12}$	$7 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^{12}$
$s_2$ , с <sup>-1</sup>	-	-	$1 \cdot 10^{12}$	$2.3 \cdot 10^{12}$	-	-	-	-
$A_{n1}/A_h$	100	508	100	348	100	533	100	456
$A_{n2}/A_h$	-	-	1	1	-	-	-	-
$m_{01}/M_1$	-	-	0.001	0.01	-	-	0.01	0.006
$A_{m1}/A_h$	-	-	10	11.78	-	-	-	-

В качестве примеров на рис. 6 представлены данные, полученные в результате тестирования разработанного ПК. Из рисунка видно, что для представленных моделей расчетные зависимости хорошо описывают «экспериментальные» кривые. При этом значения *FOM* не являются наименьшими среди представленных в табл. 4.

Отметим, что проведенные вычисления занимают 6-8 часов. Продолжительность данных расчетов значительно меньше, чем продолжительность расчетов, произведенных с помощью прототипа на компьютере класса Pentium IV (до 72 часов) [6].

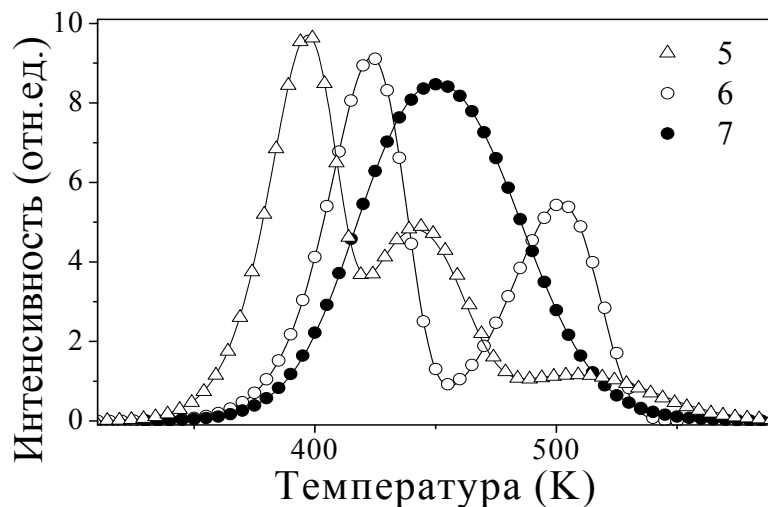


Рис. 6. Примеры аппроксимации ТЛ кривых с использованием генетического конструктора. Символы – исходные данные, сплошные линии – расчетные зависимости. Цифры соответствуют номерам моделей в табл. 4

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Проведен анализ существующих средств моделирования кинетических процессов и методов оптимизации, используемых при решении задач идентификации моделей ТЛ-процессов. Сформулированы критерии оценки аналогов и выбран прототип программного комплекса – система OSL-GA. Выявлены недостатки различных методов оптимизации применительно к задаче моделирования ТЛ-процессов – большое количество вычислений, застревание в локальных минимумах, требование указания целевой функции в явном виде. Обоснованы преимущества использования ГА для дальнейшего решения поставленных задач.

2. Принципы и понятия эволюционного моделирования адаптированы применительно к ТЛ-анализу. Обоснован выбор типа кодирования: для структурной части хромосомы используется битовая строка, для параметрической части – вещественная. Предложена трехуровневая иерархия численных методов, используемых в ПК, для решения задач идентификации ТЛ-моделей. Задача высшего уровня включает в себя параметрическую (настройка параметров) и структурную (подбор схемы) иден-

тификации в рамках генетического конструирования. На основе созданной иерархии выполнено алгоритмическое и функциональное описание ПК.

3. Проанализированы особенности операторов мутации, селекции и кроссовера, влияющие на быстроедействие ГА при конструировании зонных моделей ТЛ в диэлектриках. С помощью полного 4-факторного численного эксперимента проведена настройка эффективности эволюционных операторов, заключающаяся в определении оптимальных значений для вероятности и приращений мутаций, количества точек разрыва, пороговых величин целевой функции и т.д.

4. Для параметрической части ГА предложен модифицированный кроссовер, отличающийся от обычного линейного оператора введением двух точек разрыва. В турнирную селекцию внедрена адаптивная процедура лидерства, задающая число пар родителей, в которые обязательно входит особь-лидер с наилучшим значением целевой функции. Модифицирован оператор мутации с подстраиваемыми значениями вероятности изменения генетического кода в зависимости от текущего значения  $FOM$ .

5. Исходя из требований к реализации ПК, создан конечный программный инструментарий, включающий в себя модули TOSL и GenTL. По результатам работы данного комплекса исследователь может делать обоснованные предположения о физическом содержании ТЛ-модели и получать количественные оценки ее параметров.

6. Определены относительные погрешности для оценок параметров ТЛ-моделей в диэлектриках. В рамках вычислительного эксперимента показано, что энергии активации ловушек определяются достаточно точно, со средней погрешностью меньше 5 %, а значения скорости захвата на ловушки и частотного фактора в некоторых случаях могут существенно отклоняться от истинных величин (в 10 раз). При этом сохраняется высокое качество аппроксимации ( $FOM < 3\%$ ). Указанную достоверность численных оценок необходимо учитывать при анализе кривых ТЛ в реальных диэлектрических кристаллах.

7. Практическим результатом исследования является разработка программного комплекса, позволяющего:

- существенно повысить скорость и точность идентификации моделей ТЛ по сравнению с аналогами за счет использования разработанных алгоритмов, при этом значение параметра  $FOM$  лежит в пределах 0.2 – 3.5 %;
- практически полностью исключить участие пользователя в процессе поиска;
- проводить параллельно структурную и параметрическую идентификацию ТЛ-моделей.

### **Цитируемая литература**

1. Chen R. Theory of Thermoluminescence and Related Phenomena / R. Chen, S. W. S. McKeever. Singapore: World Scientific, 1997.
2. Pagonis V. Numerical and practical exercises in thermoluminescence / V. Pagonis, G. Kitis, C. Furetta. New York : Springer, 2006.
3. Holland J.H. Adaptation in natural and artificial systems / J.H. Holland. Michigan: The University of Michigan Press, 1975.
4. Mitchell M. An introduction to genetic algorithms / M. Mitchell. Cambridge: MIT Press, 1999.
5. Орозбек уулу Аскар. Особенности кинетики люминесценции F<sup>+</sup>-центров в аниондефектных кристаллах оксида алюминия: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 : защищена 19.02.07 / Орозбек уулу Аскар. Екатеринбург, 2007. 125 с.
6. Adamiec G. Application of a genetic algorithm to finding parameter values for numerical simulation of quartz luminescence / G. Adamiec, M. Garcia-Talavera, R.M. Bailey // Geochronometria. 2004. Vol. 23. P. 9-14.
7. Analysis with a multilayer model of heating rate effect on thermally stimulated luminescence, conductivity and exoelectronic emission of  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / A. Berkane-Krachai, P. Iacconi, R. Bindi, S. Vinceller // J. Phys. D: Appl. Phys. 2002. Vol.35. P.1895-1902.

### **Основные положения диссертации опубликованы в следующих работах:**

#### **Статьи в журналах, сборниках и материалах конференций**

1. Попко Е.А. Настройка операторов генетического моделирования методом полного факторного эксперимента / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн, Г.Б. Смирнов // Известия ОрелГТУ. Серия «Информационные системы и технологии». 2009. №5. С. 42-47.
2. Weinstein I.A. Genetic synthesizing of band schemes for thermoluminescence in dosimetric crystals / I.A. Weinstein, E.A. Popko // Radiation Measurements. 2008. Vol. 43, No.2-6. P. 218-221.
3. Попко Е.А. Настройка операторов генетического алгоритма для моделирования термоактивационных процессов / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн, Г.Б. Смирнов // Инжиниринг. Инновации. Инвестиции: сборник научных трудов. Челябинск: ЧНЦ РАН, 2008. С. 87-103.
4. Weinstein I.A. Evolutionary approach in the simulation of thermoluminescence kinetics / I.A. Weinstein, E.A. Popko // Radiation Measurements. 2007. Vol. 42, No.4-5. P. 735-738.
5. Попко Е.А. Концептуальное проектирование программного комплекса моделирования кинетических процессов / Е.А. Попко, Г.Б. Смирнов // Новые информационные технологии в образовании, 26-28 февраля 2007 г.: материалы международной научно-практической конференции, в 2 ч. Екатеринбург, 2007. Ч.1. С. 112-113.

6. Weinstein I.A. The simulation of TL processes in  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> using different ratios between microparameters of trapping and luminescent centers / I.A. Weinstein, E.A. Popko // Journal of Luminescence. 2007. V. 122 – 123. P. 377 – 380.
7. Попко Е.А. Оценка адекватности обобщенной кинетической модели при анализе экспериментальных кривых термолюминесценции / Е.А. Попко, Г.Б. Смирнов, И.А. Вайнштейн // Академия инженерных наук на Урале: Научно-практическая и организационная деятельность на рубеже веков: сборник научных трудов, в 5 т. Екатеринбург: ООО «Технезис», 2007. Т5. С. 125-127.
8. Вайнштейн И.А. Эволюционное моделирование ТЛ процессов для системы невзаимодействующих ловушек / И.А. Вайнштейн, Е.А. Попко // X Международная школа-семинар по люминесценции и лазерной физике, 2 - 6 октября 2006 г.: материалы конференции. Иркутск, 2007. С. 71 - 79.
9. Вайнштейн И.А. Генетический поиск модельных параметров при аппроксимации кривых термолюминесценции / И.А. Вайнштейн, Е.А. Попко // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 12. С. 56-62.
10. Попко Е.А. Структура системы управления знаниями для оценки адекватности моделей в АСНИ / Е.А. Попко, В.И. Рогович, И.А. Вайнштейн // Вестник УГТУ-УПИ. Специальный выпуск. 2005. С. 77-81.
11. Попко Е.А., Вайнштейн И.А. Система программного обеспечения TOSL для АСНИ процессов люминесценции в диэлектриках // Современные информационные технологии и ИТ-образование: сборник докладов научно-практической конференции. М.: МАКС Пресс, 2005. С. 546-550.
12. Учет температурного тушения при моделировании параметров ТЛ-пикув в  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Е.А. Попко, Орозбек уулу Аскар, И.А. Вайнштейн, В.С. Кортон // Вестник УГТУ-УПИ. Специальный выпуск, в 2 ч. 2004. Ч.1. С. 145-147.

### **Свидетельства о регистрации программ**

13. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программный модуль «Электронный ГА-конструктор люминесцентных моделей с термоактивационной кинетикой» (GenTL) / И.А. Вайнштейн, Е.А. Попко. № 2006614299. опубл. 18.12.2006. М., 2006.
14. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Электронный учебник «Планирование и организация эксперимента» (DEXP) / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн, Н.Г. Светличный. № 2006611978. опубл. 08.06.2006. М., 2006.
15. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. Программный модуль «Моделирование механизмов термофотолюминесценции в ди-

электриках» (TOSL) / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн, В.С. Кортков. № 2005610234. опубл. 25.01.2005. М., 2005.

### Тезисы докладов

16. Compensation relationship between parameters of Thermoluminescence kinetics in crystals / I.A. Weinstein, A.S. Vokhmintsev, E.A. Popko, V.S. Kortov // 7<sup>th</sup> International Conference on Luminescent Detectors and Transformers of Ionizing Radiation. Krakow (Poland), 2009. P. 146.
17. Попко Е.А. Сравнительный анализ эффективности двоичного и вещественного кодирования при параметрической идентификации термолюминесценции в генетических алгоритмах / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн, Г.Б. Смирнов // XV Международная научная конференция молодых ученых: сборник статей, в 3 ч. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. Ч. 2. С. 266-267.
18. Попко Е.А. Генетическое моделирование механизмов термолюминесценции в кристаллах / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн, Г.Б. Смирнов // IV Уральский семинар ТТД-2008, 13-14 ноября 2008 г.: тезисы. Екатеринбург, 2008. С. 85-86.
19. Weinstein I.A. Peculiarities of the genetic simulation for TL analysis in solids / I.A.Weinstein, E.A. Popko, G.B. Smirnov // Abstracts of The 15th International Conference on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter, 7-11 July 2008. Lyon, France, 2008. P. 416.
20. Попко Е.А. Разработка программного комплекса генетического моделирования: обзор, аналоги, прототип и предлагаемое решение / Е.А. Попко, Г.Б.Смирнов // XII отчетная конференция молодых ученых УГТУ-УПИ: сборник статей, в 3 ч. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2007. Ч. 2. С. 26-28.
21. Weinstein I.A. Genetic synthesizing of band schemes for thermoluminescence in dosimetric crystals / I.A. Weinstein, E.A. Popko // 15<sup>th</sup> International Conference on Solid State Dosimetry. Book of abstracts, July 8-13 2007. Delft, The Netherlands, 2007. P. 80.
22. Вайнштейн И.А. Эволюционное конструирование кинетических моделей термолюминесценции в кристаллах / И.А. Вайнштейн, Е.А. Попко // X Международная школа-семинар по люминесценции и лазерной физике, ЛЛФ-2006, 2-6 октября 2006 г.: тезисы лекций и докладов. Иркутск, 2006. С. 26-28.
23. Weinstein I.A. The evolutionary approach in the simulation of thermoluminescence kinetics / I.A. Weinstein, E.A. Popko // 6<sup>th</sup> European conf. on luminescent detectors and transformers of ionizing radiation. Lumdetr 2006 abstracts, June 19-23 2006. Lviv, Ukraine, 2006. P. 130.

24. Weinstein I.A. The use of genetic algorithm for simulation of thermoluminescence in crystals / I.A. Weinstein, E.A. Popko // Abstracts of 4th Int. Symposium on Laser, Scintillator and NonLinear Optical Materials (ISLNOM-4), June 26-30 2006. Prague, Czech Republic, 2006. P. 53.
25. Попко Е.А. Иерархия методов эволюционного моделирования кинетических процессов / Е.А. Попко, Г.Б. Смирнов, И.А. Вайнштейн // XI отчетная конференция молодых ученых УГТУ-УПИ: сборник статей, в 3 ч. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2006. Ч. 2. С. 141-142.
26. Попко Е.А. Моделирование кривых термолюминесценции с использованием различных соотношений между микропараметрами центров захвата и рекомбинации / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн // 11-я Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-11, 24-31 марта 2005 г: сборник тезисов. Екатеринбург, 2005. С. 123-124.
27. Weinstein I.A. The simulation of TL processes in  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> using different ratios between microparameters of trapping and luminescent centers / I.A. Weinstein, E.A. Popko // The 14<sup>th</sup> International Conference on Luminescence. ICL'05 Abstracts, July 25-29 2005. Beijing, China, 2005. P. TUE\_P\_P156.
28. Попко Е.А. Программный пакет для моделирования термолюминесценции в диэлектриках / Е.А. Попко, И.А. Вайнштейн // Студент и научно-технический прогресс: сборник тезисов докладов студенческой научной конференции. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2004. С. 184-185.

---

Подписано в печать  
Бумага писчая.  
Уч.-изд. л. 1,3.

Плоская печать  
Тираж 100 экз.

Формат 60×84 1/16  
Усл. печ. л. 1,4  
Заказ

---

Копицентр «Копирус»  
620151, Екатеринбург, ул. Мамина-Сибиряка, 137