UOT 665.25+681.5

POLİMERLƏRİN MOLEKULYAR KÜTLƏ PAYLANMA FUNKSİYALARININ ÜÇÖLÇÜLÜ MOMENTLƏR FƏZASINA İNİKASI HAQQINDA

Ə.H.NAĞIYEV, H.M.HƏŞİMOVA
Sumqayıt Dövlət Universiteti
hbaqiyeva@mail.ru

Polimer materiallar üçün ən fundamental xarakteristika olan molekulyar-kütlə paylanma funksiyasının üçtərtibli başlanğıc momentlərlə ifadə oluna bilmə məsələsi qarşıya qoyulur. Göstərilir ki, bu funksiyalar çoxluğunu üçolçülü momentlər fəzasına qarşılıqlı birqiymətli inikası müəyyən əlavə şərtlər daxilində əldə edilə bilər. Təklif olunan approksimasiyaedici strukturlar vasitəsilə qeyd olunan paylanma funksiyalarının parametrikləşdirilməsi həyata keçirilir.

Açar sözlər: molekulyar-kütlə paylanma funksiyası, başlanğıc momentlər triadası, siqmoidal funksiya, мolekulyar-kütlə paylanma funksiyasının parametrikləşdirilməsi

Polimer materialların fiziki xassələrinin və materialşünaslıq baxımından keyfiyyət göstəricilərinin təkcə onların kimyəvi tərkibi ilə müəyyən olmadığı və xeyli dərəcədə mikrosəviyyədə aqreqatlaşmış molekulyar komplekslərin quruluşundan (fövqəlmolekulyar strukturlardan) asılı olması polimer texnologiyasında mütəxəssislərə yaxşı məlumdur [1]. Fövqəlmolekulyar strukturların formalaşmasında polimerləşmə dərəcəsinin mühüm rol oynadığı və bunun isə əsas göstəricisinin molekulyar kütlə paylanma funksiyasının (MKPF) olduğu da şübhə doğurmayan faktı əks etdirir [2]. MKPF-lərin bir sıra əlamətləri daşıması onların məhdud bir sinif daxilində araşdırılmasına prinsip etibarı ilə şərait yarada bilər. Bu əlamətlər kimi MKPF-lərin baxılan oblastda inteqrallarının vahidə bərabər olması, intervalın kənar nöqtələrində sıfır qiymətli olması, unimodal və kəsilməz olmalarını qeyd etmək olar. Belə bir xassələrə malik olan funksiya axtarışı Qausun ikiparametrli normal paylanma funksiyası formasında konstruksiya olunmasına bir zəmin yaratmış olur.

Qəbul edək ki, $\varphi(x)$ funksiyasında $x-$polimer moekulunda monomerlərin sayını, $x \in [a,b]$ təyin oblastını, funksiyanın özü isə $x-$ölçülü molekulların nisbi kütləsini ifadə edir. Bu funksiyanın aşağıdakı xassələri daşıması MKPF-lərin mahiyyətindən irəli gəlir:

$$\left|\varphi(a)\right| < \varepsilon; \left|\varphi(b)\right| < \varepsilon;$$

$$\left|\int_a^b \varphi(x)dx\right| < \varepsilon_1 \qquad (1)$$

harada ki, $\varepsilon, \varepsilon_1 -$ verilmiş kiçik kəmiyyətləri ifadə edirlər.

Qeyd olunan xassələri daşıyan funksiyanın aşağıdakı kimi konstruksiya edilməsinə prinsipial əsas, demək olar ki, kifayət qədər çoxdur:

$$f(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x); \qquad (2)$$

harada ki,

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\bar{x})^2/\sigma_1^2}; \quad x \in [a, \bar{x}]$$

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{\sigma_2\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\bar{x})^2/\sigma_2^2}; \quad x \in [\bar{x}, b] \qquad (3)$$

Təklif olunan $\varphi_1(x)$ və $\varphi_2(x)$ funksiyalarının standart meyletmə parametrləri σ_1, σ_2- lərin qiymətindən asılı olmayaraq həmişə $\int_{-\infty}^{\bar{x}} \varphi_1(x)dx = \int_{\bar{x}}^{\infty} \varphi_2(x)dx = 0.5$ xassəsini daşımasına baxmayaraq, həmin funksiyalar məhdud $x \in [a,b]$ intervalının kənar nöqtələrində sıfırdan fərqli qiymətlər alır. Digər tərəfdən, approksimasiyaedici $\bar{x}, \sigma_1, \sigma_2$ kəmiyyətlərinin həmin intervalda ixtiyari qiymətlər ala bilməməsi, başqa sözlə bir-biri ilə bağlı olmaları onların konstruksiya edilməsi məsələsini daha da mürəkkəbləşdirmiş olur.

İlk öncə $\bar{x}$ kəmiyyətinin dəyişdirilə biləcək intervalı aşağıdakı kimi müəyyən edək:

$$\bar{x} - a \le (b-a)/6; \quad b - \bar{x} \ge (b-a)/6 \text{ , yəni,}$$

$$\bar{x} = [\bar{x}_{\min}; \bar{x}_{\max}] = [a + (b-a)/6; b - (b-a)/6] \qquad (4)$$

Burada $\bar{x}_{\min}, \bar{x}_{\max}$ - verilmiş $x \in [a,b]$ intervalında qütblərin yerini müəyyən edir. Aşağıdakı

$$\bar{x} = \frac{a+kb}{1+k}; \; k = \frac{\bar{x}-a}{b-\bar{x}}; \qquad (5)$$

ifadələrində $k \in [0.4; 2.5]$ intervalında müntəzəm addımlarla artırmaqla $\bar{x} \in [\bar{x}_{\min}, \bar{x}_{\max}]$ çoxluğunun generasiya olunması çətinlik törətmir.

Variasiya olunan $\bar{x}$ -nin qiymətindən asılı olaraq $\sigma_1, \sigma_2 -$lərin seçilmə intervalları aşağıdakı kimi müəyyən olunur:

$$\sigma_1 \in \begin{cases} [(\bar{x}-a)/3], & if \; k = k_{\min} \\ [(b-a)/6; (b-a)/2], & if \; k = \frac{1}{2}(k_{\min} + k_{\max}) \end{cases} \qquad (6a)$$

$$\sigma_2 \in \begin{cases} [(b-a)/6; (b-a)/3], & if \; k = k_{\min} \\ [(\bar{x}-a)/3, \; (b-a)/2], & if \; k = \frac{1}{2}(k_{\min} + k_{\max}) \end{cases} \qquad (6b)$$

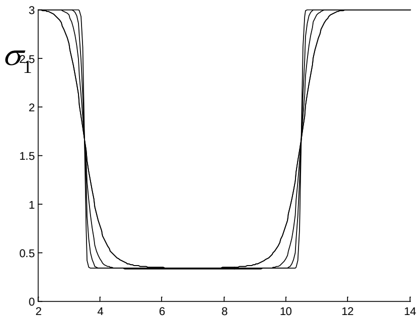
$$\sigma_1 \in \begin{cases} [(b-a)/6;\ (b-a)/3],\ if\ k = k_{\max} \\ [(b-a)/6;(b-a)/2],\ if\ k = \frac{1}{2}(k_{\min} + k_{\max}) \end{cases} \quad (6c)$$

$$\sigma_2 \in \begin{cases} [(b-\bar{x})/3)], \quad if\ k = k_{\max} \\ [(b-a)/6,\ (b-a)/2], \quad if\ k = \frac{1}{2}(k_{\min} + k_{\max}) \end{cases} \quad (6d)$$

Qeyd edək ki, σ_1, σ_2 – ədədlərinin $\bar{x}$ ədədi ilə əlaqələndirən produksiya qaydasının arasıkəsilməz funksional asılılıq şəklində ifadə etmək mümkündür. Siqmoidal funksiya əsasında tərtib olunmuş düstur (6a-6d) ifadələrini istənilən hamarlıqla approksimasiya etmək xassəsinə malikdir. Aşağıda produksiya qaydası kimi verilmiş (6a) ifadəsinin siqmoidal funksiya şəklində təsviri nümunə kimi göstərilmişdir:

$$\sigma_1(k) = \frac{(\bar{x}-a)/3}{1+e^{-\alpha(k-k_{\min})(k_{\max}-k))}} + \sigma \in [(b-a)/6;(b-a)/2] \times$$
$$\times [1 - \left(1+e^{-\alpha(k-k_{\min})(k_{\max}-k)}\right)^{-1}]; \quad (7)$$

Şəkil 1-də (7) ifadəsinin kompüter qrafikası ilə əldə edilmiş təsviri verilmişdir.



Şək.1. Siqmoidal funksiya əsasında qurulmuş əmsal dəyişdiriciləri.

Diskretləşdirmə parametri k üçün $k = [k_{\min}, k_{\max}]$ intervalının və $h_k = \frac{k_{\max} - k_{\min}}{n}$ addımının seçilməsi ilə $N = (k \times n \times n)$ variantda $\varphi_1(x)$ və $\varphi_2(x)$ funksiyaları generasiya edilmiş və onların hər biri üçün 0-cı, 1-ci və 2-ci tərtib başlanğıc momentlər hesablanmışdır:

$$M^{[0]} = \int_a^b f(x)dx; \quad M^{[1]} = \int_a^b xf(x)dx; \quad M^{[2]} = \int_a^b x^2 f(x)dx; \quad (8)$$

Bu momentlər triadasının sintez olunan $f_i(x); i = \overline{1, N}$ funksiyaları ilə birqiymətli əlaqəsini əks etdirən inikasın təyin edilməsi, başqa sözlə approksimasiya məsələsinin həlli MKPF-lərin parametrikləşdirilməsinə xidmət etməlidir. Lakin qeyd edilməlidir ki, (1) şərtinin inteqral hissəsinin nəzərə alınması bir sıra hesablama prosedurlarının yerinə yetirilməsini tələb edir. Qeyd edək ki, $f(x)$ funksiyasını qurmaq təkcə $\bar{x}, \sigma_1, \sigma_2$ ədədlərini seçməkdən ibarət olmayıb, həm də seçilmiş bu ədədlərin ixtiyari qiymətlərində “sağ” və “sol qanad” toplananlarının $\bar{x}$ nöqtəsində bir-birinə “tikilməsi” kimi mərhələni də nəzərdə tutur, yəni $\varphi_1(\bar{x}) = \varphi_2(\bar{x})$ bərabərliyinin ödənilməsi tələb olunur.

İxtiyari $\bar{x}, \sigma_1, \sigma_2$ triadasını seçək. Naməlum η ədədini daxil edək və onu elə qiymətləndirək ki,

$$\frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-(\bar{x}-\bar{x})^2/\sigma_1^2} = \frac{\eta}{\sigma_2\sqrt{2\pi}} e^{-(\bar{x}-\bar{x})^2/\sigma_2^2}$$
$$\frac{1}{\sigma_1} = \frac{\eta}{\sigma_2}; \quad \eta = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \tag{9}$$

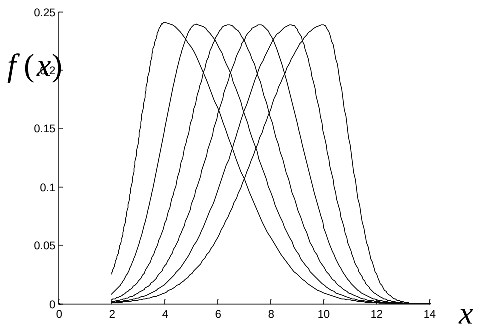
bərabərlikləri ödənilmiş olsun.

Fərz edək ki, sintez olunmuş $f(x)$ funksiyasının $x \in [a,b]$ parçasında inteqralı ξ – ya bərabərdir. Yeni, miqyaslayıcı μ parametrini daxil edək:

$$\mu = \frac{1}{\xi}; \quad F(x) = \mu f(x) = \frac{1}{\xi}[\underset{x\in[a,\bar{x}]}{\varphi_1(x)} + \eta \underset{x\in[\bar{x},\infty]}{\varphi_2(x)}] \quad . \tag{10}$$

Daxil etdiyimiz η və μ parametrləri nizamlayıcı parametrlər olub, ixtiyari a, b interval parametrləri və $\bar{x}, \sigma_1, \sigma_2$ forma parametrləri üçün (1) şərtinin hər iki hissəsinin nəzərə alına bilməsini təmin edir.

Təklif olunan alqoritm üzrə generasiya olunmuş molekulyar paylanma funksiyalarının bir neçəsi şəkil 2-də verilmişdir.



Şək.2. Molekulyar paylanma funksiyalarına qarşı qoyulan tələblərə cavab verən funksiyalar ailəsinin qrafik təsviri.

Sintez olunmuş belə funksiyalar çoxluğunun momentlər çoxluğuna inikasının birqiymətli olduğunu hesablama eksperimenti vasitəsilə yoxlamaq nəzəri və praktiki baxımdan maraq doğuran məsələ kimi tədqiqatın ikinci mərhələsini təşkil etmişdir. Belə bir qənaətin dəqiqliyini qiymətləndirmək üçün sintez olunmuş paylanma funksiyalarının orta kvadratik meyletmə kriterisi əsasında baxılan sinifdən götürülmüş ixtiyari funksiya ilə tutuşdurulmasından istifadə edilmişdir:

$$F = \int_a^b \left(\tilde{f}(x) - f(\bar{x}, \sigma_1, \sigma_2)\right)^2 dx \to \min \tag{11}$$

harada ki, $\tilde{f}(x) - (1)$ şərtlərini ödəyən ixtiyari funksiya, $f(\bar{x}, \sigma_1, \sigma_2)$ - parametrləri məhdud intervallarda dəyişdirilərək (11) ifadəsini minimuma yaxınlaşdıran approksimasiya edici funksiyadır.

ƏDƏBİYYAT

1. Васильев М.Р. Математическое моделирование процессов радикальной полимеризации. М.: Наука, 1964, 327 с.
2. Усманов Т.С., Максютова Э.Р., Спивак С.И. //Докл. РАН, 2002, т.387, №6, с.793-796.
3. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1981, 542 с.

О ВЗАИМНО-ОДНОЗНАЧНОМ ОТОБРАЖЕНИИ МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЛЯ ПОЛИМЕРОВ В ПРОСТРАНСТВЕ МОМЕНТОВ

А.Г.НАГИЕВ, У.М.ГАШИМОВА

РЕЗЮМЕ

Ставится задача представления молекулярно-массового распределения полимеров совокупностью начальных моментов третьего порядка. Показывается, что в рамках определенных условий, сужающих класс рассматривающихся функций, может быть достигнуто взаимно-однозначное отображение между бесконечномерным пространством функций распределения и трехмерным вектором моментов. Проводится параметризация названных функций с использованием определенных аппроксимирующих конструкций.

Ключевые слова: молекулярно-массовая функция распределения, триада начальных моментов, параметризация молекулярно-массовой функции распределения.

ON BIJECTIVE MAPPING OF MOLECULAR WEIGHT DISTRIBUTION OF POLYMERS IN THE SPACE POINTS

A.H.NAGIYEV, H.M.HASHIMOVA

SUMMARY

The paper puts forward the representation of the molecular weight distribution polymers set the initial moments of the third order. It is shown that under certain conditions, narrowing the class of the functions can be achieved by one-to-one mapping between the infinite-dimensional space distribution functions and three-dimensional vector of moments. Parameterization of these functions is carried out with the use of certain approximate designs.

Key words: The molecular mass distribution function, the triad of the initial moments, parameterization of molecular-mass distribution function

Redaksiyaya daxil oldu: 05.06.2013-cü il.
Çapa imzalandı: 17.10.2013-cü il.