

05(К.УН.)  
Вісн



# ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ**

**Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ**

**Випуск № 1**

**КИЇВ 2007**





# КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

## ВІСНИК

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК № 1 2007

Наукова бібліотека  
ім. М. Максимовича  
КНУ  
ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
  
**12823JB**  
45 - чит.зал періодики та дисерт. 20.00





## ЗМІСТ

### АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

|                                                                                                         |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Кликовка Б.М. Про кореляційні функції Пойя                                                              | 11 |
| Кочубінська Є.А. Абстрактна характеристика напівгрупи часткових автоморфізмів кореневого дерева         | 14 |
| Лодатко А.Є. Робастне оцінювання по спостереженнях з домішкою                                           | 17 |
| Одінцова О.О. Про групи з сепаруючими підгрупами відносно систем примарних циклічних підгруп            | 21 |
| Плахотник М.В. Кільцеві нерівності для матриць Кириченка, цикловий тип яких складається з двох чисел    | 25 |
| Рижов А.Ю. Інтервальна оцінка ймовірності виживання для компонент суміші                                | 30 |
| Рябухо О.М. Алгебраїчні праці професора Василя Єрмакова                                                 | 33 |
| Сухтаєва А.М., Хаджиєв Дж. О классах подгрупп определяемых с помощью инвариантных линейных функционалов | 38 |
| Черніков М.С., Требенко О.О. $RN$ -групи з наддоповнюваною циклічною $p$ -підгрупою                     | 46 |

### ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

|                                                                                                                                                                                                                 |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Зражевська В.Ф., Зражевський Г.М., Куценко О.Г. Чисельне розв'язання деякої нестационарної нелінійної задачі термопружності для порожнинного циліндру                                                           | 53 |
| Калайда О.Ф. Симетричне двостороннє чисельне диференціювання функцій за допомогою чисельного інтегрування                                                                                                       | 60 |
| Капустян О.В., Хосе Валеро Існування неперервного розв'язку для однієї тривимірної системи гідродинаміки                                                                                                        | 63 |
| Карнаухов В.Г., Карнаухова Т.В., П'ятецька О.В. Вплив деформацій зсуву на характеристики ортотропного сенсора при вимушених згинних коливаннях прямокутної композитної пластини з шарнірним закріпленням торців | 68 |
| Кривошея С.А. Деякі властивості лінійних нетерових операторів у гільбертових просторах                                                                                                                          | 71 |
| Лебедева І.В., Головач Г.П. До питання про розв'язок спектральної задачі для зрізаного двопорожнинного гіперболоїда обертання                                                                                   | 74 |
| Лісняк В.С. Неголономна геометрія в її основних поняттях                                                                                                                                                        | 78 |
| Михайленко В.В., П'ятецький В.О., Луциков О.В. Рівняння одночастотного наближення стаціонарних коливань непружних п'єзоелектричних тіл в потенціалах                                                            | 83 |



|                                                                                                                                                                            |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Мольченко Л.В., Лоос І.І., Індіамінов Р.Ш. Розв'язуюча система<br>нелінійних рівнянь магнітопружності для одношарових<br>ізотропних оболонок обертання змінної жорсткості  | 87 |
| Січко В.М., Золотий Ю.Г., Жук І.Ю. Метод визначення деформацій<br>поверхні оболонки довільної форми при її резонансній<br>вібрації на основі голографічної інтерферометрії | 93 |
| Ткач А.Б. Періодичні розв'язки деяких систем інтегро-<br>диференціальних рівнянь з частинними похідними з<br>імпульсним збуренням                                          | 99 |

## КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

|                                                                                                                                                                                  |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Боднар Т.Д. Формування оптимального портфеля в альтернативних<br>моделях                                                                                                         | 109 |
| Братійчук А.М. Система $M^b/G/1/b$ з відновлюючим рівнем вхідного<br>потoku                                                                                                      | 114 |
| Буй Д.Б., Шишацька О.В. UML – сучасна універсальна мова<br>моделювання: історія, специфікація, бібліографія                                                                      | 122 |
| Буй Д.Б., Сільвейструк Л.М. Модель “сутність-зв'язок”: ролі, сильні<br>та слабкі типи сутностей і типи зв'язків                                                                  | 129 |
| Бичков О.С., Колесніков К. Побудова (PN)-моделі теорії можливостей                                                                                                               | 134 |
| Гаращенко Ф.Г., Клименко В.Г. Оптимальний вибір пунктів доставки<br>однорідного товару з обмеженнями на пропускну спроможність                                                   | 139 |
| Горбачук В.М., Гаркуша Н.І. Рівноваги Курно–Неша за асиметричної<br>невизначеності та узагальнені рівноваги Курно–Штакельберга–<br>Неша                                          | 143 |
| Загородній Ю.В., Ковальчук О.Ф. Про один підхід до моделювання<br>розвитку систем                                                                                                | 149 |
| Зураб Н. Мегрелишвили, Ибраим Ш. Дидманидзе, Давид Т. Чхаидзе,<br>Етери Ш. Нижарадзе Математическая модель изменения<br>концентрации раствора поступающего в катионитовый фильтр | 153 |
| Івохін С.В., Косинський К.О. Спосіб оцінювання прецедентів на<br>основі нечіткого підходу                                                                                        | 157 |
| Іксанов О.М. Про супремум збуреного випадкового блукання                                                                                                                         | 161 |
| Карнаух Т.О. Використання $R$ -систем для задання фрактальних<br>множин                                                                                                          | 165 |
| Кашпур О.Ф., Малишева Т.М., Хлобистов В.В. Про точні на<br>поліномах інтерполяційні формули в гільбертовому просторі                                                             | 168 |
| Коцовський В.М. Нейронні елементи над полем комплексних чисел                                                                                                                    | 172 |
| Кудін Г.І., Бублик С.Б. Синтез лінійних дискретних систем керування<br>з крайовими умовами засобами псевдообертання                                                              | 176 |
| Кулян В.Р., Рутицька В.В., Юнькова О.О. Множина досяжності в<br>задачах фінансового менеджменту                                                                                  | 179 |



|                                                                                                                        |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Меркур'єв М.Г. Стійкість неперервних гібридних автоматів                                                               | 183 |
| Середенко В.М., Коновалова О.М. Комп'ютерно - математичне моделювання задач динаміки міжфазової взаємодії в композитах | 188 |
| Турбал Ю.В. Про самоорганізацію динамічних систем у векторних                                                          | 192 |
| Утебаєв Д. Оцінки точності схеми метода скінчених елементів за часом та простором для гіперболічних рівнянь            | 198 |
| Шарапов М.М., Галковський Т.О., Максимець О.М. Про підрахунок значень функції Лапласа                                  | 201 |

## РАДІОФІЗИКА

|                                                                                                                                                                       |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Афанас'єва Т.В., Коваль І.П., к.ф., Находкін М.Г., Суховій Є.П. Дифузія димерів Si-Si та Ge-Ge вздовж димерного ряду поверхні Ge (001)                                | 207 |
| Багацька О.В., Бутрим О.Ю., Юлія В. Дурнєва Ю.В., Шульга С.М. Новий метод локалізації джерела магнітного поля в задачах магнітокардіографії                           | 212 |
| Бар'яхтар В.Г., Білоколос Є.Д., Дмитрієв О.В., Самар Г.В. Сингулярності Ліфшиця електронних термодинамічних величин однозонного металу                                | 218 |
| Вакуленко А.В., Кравченко О.Ю., Левада Г.І., Лиситченко Т.Є., Яструб Ю.А. Просторово-періодичні дисипативні структури в радіочастотних розрядах з пиловими частинками | 226 |
| Гнатишин М.А., Смирнов Є.М., Юрченко О.В. Дослідження багатократного відбиття повільної зсувної хвилі від вільних поверхонь в парателуриті                            | 230 |
| Гожик І.А., Григорук В.І., Огенко В.М., Онисько Ю.Т., Слінченко Ю.А. Про застосування температурної залежності показника заломлення кремнійорганічного полімеру       | 234 |
| Денєга С.З., Колєнов С.О., Смирнов Е.М. Дослідження просторового спектра першого порядку брегівської дифракції світла в частотно-модульованому акустичному полі       | 237 |
| Іванісік А.І., Конопатський А.В. Формування надкоротких оптичних імпульсів унаслідок перехідного ефекту на межі самофокусуєчого середовища                            | 244 |
| Іванюта О.М., Прокопенко О.В. Методи підвищення власної добротності резонатора поверхневої електромагнітної хвилі                                                     | 248 |
| Ільченко В.В. Моделювання вольт-фарадних характеристик для контакту метал-напівпровідник з кількома шарами вбудованих квантових точок                                 | 253 |
| Козяревич І. О., Покидько О. К. Орієнтація молекулярних стіків фталоціанінів за допомогою магнітного поля                                                             | 263 |



|                                                                                                                                                                                                    |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Лаунець В.Л., Олійник В.В. Дослідження взаємодії електромагнітної хвилі з довільною структурою діелектричних пластин у хвилеводі                                                                   | 267 |
| Максюта М.В. Розрахунок спектра мас лептонів на основі моделі кристалоподібного простору                                                                                                           | 271 |
| Мелков Г.А., Чумак А.В., Васючка В.І., Мойсеєнко В.А. Обернення хвильового фронту з конверсією частоти в анізотропних середовищах                                                                  | 275 |
| Павлюк С.П., Кушніренко В.В. Кінетика виникнення коливань у $n^+ - n - n^+$ структурах при проходженні через них потужних імпульсів струму з екстремальною густиною                                | 280 |
| Фелінський Г.С. Експериментальні дослідження напівпровідникових лазерних діодів для акусто-оптичних процесорів НВЧ радіосигналів.                                                                  | 284 |
| Черняк В.Я., Юхименко В.В., Слюсаренко Ю.І. Конверсія етанолу в плазмі газового розряду з рідкими стінками                                                                                         | 292 |
| Шаповал В.О., Черняк В.Я., Юхименко В.В., Наумов В.В., Мізерачек Й., Дорс М. Особливості плазмової обробки водних розчинів фенолу в плазмово-рідинній системі з вторинним розрядом                 | 296 |
| Шульга С.М., Багацька О.В., Ши Хе., Назиров Ф. Розв'язання задачі розсіяння електромагнітних хвиль на включенні у $T$ – подібному з'єднанні двох прямокутних хвилеводів за допомогою теореми Гріна | 301 |

## СУЧАСНА ФІЗИКА

|                                                                                                                                                                  |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Бежснар А.А., Копань В.С. Поверхневий натяг та внутрішні напруги фторопласту                                                                                     | 311 |
| Біляєв С.В., Велещук В.П., Ляшенко О.В., Фонкіч О.М. Збагачення поверхні монокристалів $CdTe$ надлишковим телуrom при обробці в системі $Br_2 - HBr - H_2O$      | 316 |
| Боровий М.О., Іщенко Р.М., Степаніщев М.Б. Інтегральні перерізи іонізації М-підоболонок атомів Pb при електронному ударі в діапазоні енергій 5–30 keV            | 320 |
| Булавін Л.А., Соколовський Б.І., Склярчук В.М., Плевачук Ю.О. Перехід до металевої провідності в розплавах на основі селену                                      | 326 |
| Бурлій П.В., Козаченко В.В., Коробкіна О.О., Кучеров І.Я, Ільїн П.П. Вплив акустоелектронної взаємодії на розповсюдження поперечних акустичних хвиль в пластинах | 329 |
| Вільчинський С. Й., Чумаченко А. В. Метод континуального інтегрування при отриманні низькочастотної асимптотики                                                  | 332 |



|                                                                                                                                                                                                                                                                |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| функцій Гріна для сильно взаємодіючої Бозе-системи                                                                                                                                                                                                             |     |
| Гаврюшенко Д.А. Концентрація компонентів бінарного розчину в зовнішньому полі                                                                                                                                                                                  | 336 |
| Гаркуша Л.М. В'язкопружні властивості водних розчинів крохмалю з добавками $MgCl_2$                                                                                                                                                                            | 339 |
| Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Водоп'янов Д.Л., Шостак С.В. Поляризованість структурно-неоднорідних кульових частинок                                                                                                                                               | 343 |
| Губанов В.О., Скіпа Т.А., Білий М.М., Дмитренко О.П., Ковригін С.В., Комарова Л.О., Куліш М.П., Лізунова С.В., Покропивний В.В. Вплив хіральності на симетрію коливальних мод нітридборних нанотрубок та його прояв у спектрах комбінаційного розсіяння світла | 352 |
| Дзисюк Н.Р., Каденко І.М., Майданюк В.К. Особливості визначення перерізу ядерної реакції $^{72}Ge(n,2n)^{71}Ge$                                                                                                                                                | 367 |
| Захаренко М. І., Семенко М. П. Структурна релаксація аморфних сплавів в неізотермічних умовах                                                                                                                                                                  | 371 |
| Копань Ю.В., Хуторянська Н.В., Копань В.С. Деформування металевого скла шліфуванням                                                                                                                                                                            | 374 |
| Кортес І., Калдера М., Рамірез П. Й., Кортес Л., Вега Г., Переа Г. Ідентифікація дефектів на поверхні зубної емалі                                                                                                                                             | 378 |
| Ломакіна О.В., Шайкевич І.А. Еліпсометричні дослідження із збудженням поверхневих поляритонів перехідного шару на межі поділу тонка плівка Мо – діелектрична підкладка                                                                                         | 385 |
| Лопатинська О.Г., Лопатинський А.М., Чегель В.І., Поперенко Л.В., Ширшов Ю.М. Вплив УФ радіації на біомолекулярну взаємодію в умовах специфічного зв'язування                                                                                                  | 390 |
| Онанко А.П. Кінетика пружино-непружного тіла сплаву $Al_{0.5}Be_{0.5}$                                                                                                                                                                                         | 394 |
| Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Перетворення Лоренца для багат шарового покриття                                                                                                                                                                     | 396 |
| Сагун В.П., Стукаленко В.В., Гайдідей Г.І. Симетрія оптичних центрів $NO_2^-$ та $NO_3^-$ в водних розчинах електролітів                                                                                                                                       | 406 |
| Сіденко Т.С. Апроксимаційні формули для дисперсії показників заломлення монокристала дифосфіда кадмію                                                                                                                                                          | 410 |
| Усенко К.В. Класифікація станів двочастинкових квантових каналів переносу інформації. Частина 1                                                                                                                                                                | 415 |
| Чалий О.В., Чалий К.О. Розмірні залежності критичних параметрів та фізичних властивостей просторово обмежених рідин                                                                                                                                            | 426 |







1992, 1, 1-11

Journal of Mathematical Sciences

Journal of Mathematical Sciences

The problem of uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

Key Words: correlation functions, empirical Polya correlation function.

1. INTRODUCTION

The problem of uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

The problem of uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

2. DEFINITIONS AND NOTATION

1992, 1, 1-11

Journal of Mathematical Sciences

Journal of Mathematical Sciences

Journal of Mathematical Sciences

The problem of uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

Key Words: correlation functions, empirical Polya correlation function.

1. INTRODUCTION

1. INTRODUCTION

The problem of uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

Key Words: correlation functions, empirical Polya correlation function.

2. DEFINITIONS AND NOTATION

The problem of uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

3. THEOREM 1. Uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

4. THEOREM 2. Uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

5. THEOREM 3. Uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

6. THEOREM 4. Uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

7. THEOREM 5. Uniqueness of theoretical correlation functions which coincide with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type uniqueness is shown.

11





УДК 519.9

Борис М. Кликавка, аспірант

## Про кореляційні функції Пойа

Розглянуто питання про єдиність теоретичної кореляційної функції що приймає однакові значення з емпіричною кореляційною функцією на даній множині. На прикладі кореляційних функцій Пойа показано існування двох різних кореляційних функцій, що набувають однакових значень на деякій множині точок простору.

Ключові слова: кореляційна функція, випадкове поле, кореляційна функція Пойа.

E-mail: bklykavka@yahoo.com

### 1 Вступ

Додатньо визначені функції мають широке застосування в теорії ймовірностей, статистиці, де вони виступають у ролі характеристичних функцій, коваріаційних функцій випадкових полів, і як перетворення Фур'є деяких ймовірнісних мір. Одним із найбільш видатних результатів в класичному аналізі і теорії ймовірностей є критерій Пойа про додатню визначеність опуклих функцій.

Для скінченної вибірки спостережень з простору  $\mathbb{R}^n$  і теоретичної ізотропної кореляційної функції, що збігається зі значеннями емпіричної кореляційної функції, побудованою за цими даними, постає питання про єдиність такої теоретичної кореляційної функції. Поставлена таким чином проблема є досить цікавою з точки зору статистики. В одновимірному випадку Феллером, Гнейтінгом [1,3] та іншими було показано, що може бути кілька таких характеристичних функцій. Зокрема Феллер показав, що дві різні характеристичні функції можуть бути рівними на множині ненульової міри. Прикладом таких функцій є вгнуті полігони (див. [1], гл. 15). За допомогою критерія Пойа на прямій можна побудувати безліч прикладів кореляційних функцій з однаковими значеннями у скінченній множині точок. В роботі розглянута аналогічна багатовимірна проблема про існування двох різних ізотропних кореляційних функцій Пойа, що набувають однакових значень на деякій множині точок простору.

### 2 Існування різних кореляційних функцій з однаковими значеннями на заданій скінченній множині точок

B.M. Klykavka, PhD student

## An correlation functions of Polya type

Problem of uniqueness of theoretical correlation function which coincides with empirical correlation function on given set was studied. For correlation functions of Polya type nonuniqueness is shown.

Key Words: correlation function, random fields, Polya correlation function.

Нехай задано ймовірнісний простір  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ ,  $n$ -вимірний Евклідовий простір  $\mathbb{R}^n$ . Тоді випадковим полем є дійснозначна функція  $\xi(x) = \xi(x, \omega)$ , яка для кожного  $x \in \mathbb{R}^n$  є вимірною функцією від  $\omega \in \Omega$ .

Типовим прикладом відстані в  $\mathbb{R}^n$  може слугувати Евклідова відстань:

$$t = d(x, y) = \|x - y\|, \quad x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Означення 1. Кореляційною функцією поля  $\xi(x)$  називають функцію

$$\rho(x, y) := E(\xi(x) - E\xi(x))(\xi(y) - E\xi(y)).$$

Означення 2. Випадкове поле називається однорідним (в широкому розумінні), якщо  $E\xi(x) = m$ ,  $\rho(x, y) = \rho(x - y)$ , де  $m$  - деяка константа. Відповідна кореляційна функція називається однорідною кореляційною функцією.

Означення 3. Однорідне випадкове поле називається ізотропним випадковим полем, якщо кореляційна функція залежить лише від відстані, тобто  $\rho(x, y) = \rho(t)$ , де  $t = d(x, y)$ . Відповідна кореляційна функція називається ізотропною кореляційною функцією.

Якщо  $d(\cdot, \cdot)$  - Евклідова відстань, то ізотропна кореляційна функція допускає зображення:

$$\rho(t) = 2^{-\frac{n-2}{2}} \Gamma(n/2) \int_0^\infty \frac{J_{\frac{n-2}{2}}(\lambda t)}{(\lambda t)^{\frac{n-2}{2}}} d\Phi(\lambda),$$

де  $\Phi(\lambda)$ ,  $\lambda > 0$ , деяка обмежена неспадна функція, яку називають спектральною функцією поля  $\xi(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$ .

Нехай  $\varphi(t)$  неперервна ізотропна



кореляційна функція, диференційовна, опукла, і така, що:

$$\varphi(0)=1, \lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t)=0, (-1)^p \varphi^{(p)}(t) \geq 0, \quad (1)$$

$$p \in \mathbb{Z}_+, t > 0.$$

Зауваження. Прикладом функції, що задовольняє умові (1) може слугувати експоненційна кореляційна функція виду  $\rho(t) = e^{(-t/R)}$ , де  $R$  – деяка константа. Доведення додатньовизначеності функції можна знайти в [6].

**Теорема.** Для довільного  $m \in \mathbb{N}$  і набору точок  $x_1, x_2, \dots, x_m \in \mathbb{R}^n$  існують дві різні неперервні ізотропні кореляційні функції  $\varphi_1, \varphi_2$ , що задовольняють умову (1), і такі, що  $\varphi_1(\|x_i\|) = \varphi_2(\|x_i\|)$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ .

*Доведення.* Покладемо  $t_i = d(x_i, 0) = \|x_i\|$ . Нехай  $\varphi_1(t)$  – деяка ізотропна кореляційна функція, що задовольняє умову (1). Без втрати загальності можемо вважати, що  $t_1 < t_2 < \dots < t_m$ .

Побудуємо неперервну кореляційну функцію  $\varphi_2(t)$  таку, що  $\varphi_1(t)$  та  $\varphi_2(t)$  збігаються у двох точках  $t_1$  і  $t_2$ . Пряма, що з'єднує точки  $(t_1, \varphi_1(t_1))$  і  $(t_2, \varphi_1(t_2))$  на площині, описується рівнянням

$$y(t) = \frac{\varphi_1(t_2) - \varphi_1(t_1)}{t_2 - t_1} t - t_1 \frac{\varphi_1(t_2) - \varphi_1(t_1)}{t_2 - t_1} + \varphi_1(t_1).$$

Надалі позначатимемо

$$a = \frac{\varphi_1(t_2) - \varphi_1(t_1)}{t_2 - t_1}, \quad b = -t_1 \frac{\varphi_1(t_2) - \varphi_1(t_1)}{t_2 - t_1} + \varphi_1(t_1).$$

Розглянемо функцію

$$\psi(t) = \begin{cases} \varphi_1(t) + \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^l, & t \in [t_1, t_2] \\ \varphi_1(t), & t \notin [t_1, t_2], \end{cases} \quad (2)$$

де  $l \geq 1$ ,  $C = \max_{t \in [t_1, t_2]} (at + b - \varphi_1(t))$ .

На Рис.1 зображено схематично графіки функції  $\varphi_1(t)$  та відрізка прямої, що з'єднує точки  $(t_1, \varphi_1(t_1))$  і  $(t_2, \varphi_1(t_2))$ .

$$\begin{aligned} \psi'_+(t_1) &= \lim_{t \rightarrow t_1+} \frac{\varphi_1(t) + \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^l - \varphi_1(t_1) - \left( \frac{at_1 + b - \varphi_1(t_1)}{2C} \right)^l}{t - t_1} = \\ &= \varphi'_1(t_1) + l \left( \frac{at_1 + b - \varphi_1(t_1)}{2C} \right)^{l-1} \left( \frac{a - \varphi'_1(t_1)}{2C} \right) = \varphi'_1(t_1), \end{aligned}$$

і аналогічно

$$\psi'_-(t_1) = \lim_{t \rightarrow t_1-} \frac{\varphi_1(t) - \varphi_1(t_1)}{t - t_1} = \varphi'_1(t_1).$$

Тому існує  $\psi'(t_1)$  і  $\psi'(t_1) = \varphi'_1(t_1)$ .

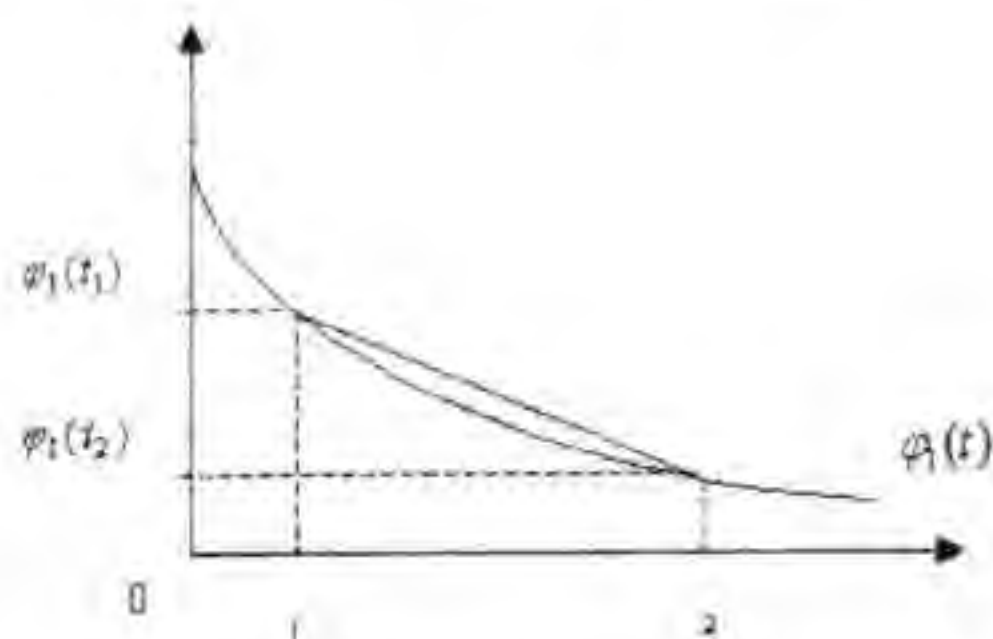


Рис. 1

Аналогічно існує  $\psi'(t_2)$  і  $\psi'(t_2) = \varphi'_1(t_2)$ .

Отже  $\psi(t)$  диференційована на  $\mathbb{R}_+$ . Дослідимо на опуклість функцію  $\psi(t)$  на відрізку  $[t_1, t_2]$ .

$$\begin{aligned} \psi''(t) &= \varphi''_1(t) + l(l-1) \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^{l-2} \left( \frac{a - \varphi'_1(t)}{2C} \right)^2 - \\ &- l \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^{l-1} \frac{\varphi''_1(t)}{2C}, \quad \text{де} \quad \varphi''_1(t) \geq 0, \\ \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} &\geq 0, \text{ а вираз} \end{aligned}$$

$$-l \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^{l-1} \leq 0.$$

Оскільки  $\max_{t \in [t_1, t_2]} \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} = \frac{1}{2}$ , то

$$\lim_{l \rightarrow \infty} l \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^{l-1} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{- \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^{l-1}}{\ln \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)} = 0.$$

Так як  $t$  належить компакт  $[t_1, t_2]$ , то існує таке  $l_0 \in \mathbb{Z}_+$ , що для всіх  $l \geq l_0, t \in [t_1, t_2]$ :  $\psi''(t) \geq 0$ . Поза відрізком  $[t_1, t_2]$ , за рахунок визначення і опуклості  $\varphi_1(t)$ ,  $\psi''(t) \geq 0$ .

Отже для деякого  $l \geq l_0$  функція  $\psi(t)$  опукла на  $\mathbb{R}_+$ . Не втрачаючи загальності можемо припустити, що  $l \geq p+2$ .

Позначимо

$$\eta_1(t) = \psi(t), \quad \eta_2(t) = \left( -\frac{d}{dt} \right)^{p-1} [-\eta'_1(t)]$$

і перевіримо функцію  $\eta_2(t)$  на опуклість.

$$\begin{aligned} \eta_2''(t) &= (-1)^{p+2} \psi^{(p+2)}(t) = \\ &= \begin{cases} (-1)^{p+2} \varphi_1^{(p+2)}(t) + (-1)^{p+2} \left( \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^l \right)^{(p+2)}, & t \in [t_1, t_2] \\ (-1)^{p+2} \varphi_1^{(p+2)}(t), & t \notin [t_1, t_2]. \end{cases} \end{aligned}$$

Для полегшення обчислень, позначимо



$$g(t) = \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C}, \text{ Тоді}$$

$$(g(t))^{(p+2)} = \sum_{r=1}^{p+2} Q_r(l) g(t)^{l-r} D_r(g(t)), \quad (3)$$

де  $Q_r(l)$  – поліном степеня  $r$  від  $l$ .  
 $D_r(g(t))$  – скінчена лінійна комбінація добутків множників типу  $(g^{(j)})'(t)$ ,  $0 \leq l, j \leq p+2$ , для  $r$  – го доданку.

$$(g^{(j)})'(t) = \left( -\frac{1}{2C} \varphi_1^{(j)}(t) \right)' < \infty, \quad t \in [t_1, t_2]$$

за визначенням функції  $\varphi_1(t)$ .

$$\lim_{l \rightarrow \infty} Q_r(l) g(t)^{l-r} = 0,$$

оскільки  $g(t) < 1, t \in [t_1, t_2]$ .

Кількість членів у (3) скінчена і їх кількість не залежить від  $l$ , то аналогічно до попередніх міркувань, спрямувавши  $l \rightarrow \infty$ , отримаємо, що ви-

раз  $\left( \left( \frac{at + b - \varphi_1(t)}{2C} \right)^l \right)^{(p+2)}$  можна зробити як зав-

годно малим на  $t \in [t_1, t_2]$ .

Використавши умову (1), отримаємо:  
 $\eta_2^*(t) \geq 0$ , що показує опуклість функції  $\eta_2(t)$ .  
Отже, можемо використати критерій Поїа ([4]).

**Критерій Поїа.** Нехай  $\varphi(t): [0, +\infty] \rightarrow \mathbb{R}$  – неперервна функція,  $\varphi(0) = 1$  і  $\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t) = 0$ . Припустимо, що  $k$  і  $p$  – невід'ємні цілі числа, хоча б одне з яких строго додатне.

$$\text{Покладемо } \eta_1(t) = \left( -\frac{d}{dt} \right)^k \varphi(\sqrt{u}) \Big|_{u=t^2}.$$

Якщо існує  $\alpha \geq 1/2$ , таке, що

$$\eta_2(t) = \left( -\frac{d}{dt} \right)^{k+p-1} [-\eta_1'(t^\alpha)] \text{ опукла при } t > 0, \text{ тоді}$$

$\varphi$  належить класу неперервних кореляційних функцій простору  $\mathbb{R}^n, n = 1, 2, \dots, 2p+1$ .

Розглянувши випадок  $k = 0, \alpha = 1, p$  – довільне додатне ціле число, отримуємо, що  $\varphi_2(t)$  є кореляційною функцією.

Побудувавши послідовно таким самим чином функції  $\psi_i(t)$  для пар точок  $(t_i, t_{i+1}), i = 2, \dots, m-1$ , і на кожному кроці беручи за функцію  $\varphi(t)$  вже побудовану функцію  $\psi_{i-1}(t)$  ( $\psi_1(t) \equiv \varphi(t)$ ), отримаємо, що  $\psi_{m-1}(t) = \varphi_2(t)$ . Аналогічно попереднім міркуванням, використавши критерій Поїа, маємо, що  $\varphi_2(t)$  належить класу кореляційних функцій простору  $\mathbb{R}^n, n = 1, 2, \dots, 2p+1$ .  $\square$

### 3 Висновки

У роботі було побудовано кореляційну функцію  $\varphi_2(t)$ , яка приймає однакові значення з заданою кореляційною функцією  $\varphi_1(t)$  на даній множині точок простору  $\mathbb{R}^n$ . Цікавим напрямком продовження таких досліджень може слугувати одержання результатів аналогічних [2], коли довільну кореляційну функцію можна було б апроксимувати стаціонарними кореляційними функціями, але додатково вимагаючи збіг на скінченній множині точок. Іншим цікавим напрямком для дослідження може бути знаходження верхньої межі для відхилення в деякій метриці однієї кореляційної функції від іншої, якщо ці функції однакові на скінченній множині точок (див. [5]).

### Список використаних джерел

1. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. - Мир, Т.2., 1967.
2. Barry R.P. The local approximation of variograms in  $\mathbb{R}^2$  by covariance functions. //Statistics and Probability Letters. -2005. - 74. -P. 171-177.
3. Gneiting T. Simple test for the validity of correlation function models on the circle. //Statistics and Probability Letters. -1998. - 39. -P. 119-122.
4. Gneiting T. Criteria of Polya type for radial positive definite functions. //Proc. of the American Mathematical Society. -2001. 129, №.8. -P. 2309-2318.
5. Olenko A.Ya., Pavlov D.V. On some estimates for the closeness of correlation and spectral functions of random fields. //Naukovi zapiski UKMA. -2000. -18. - P. 17-20.
6. Schoenberg J. Metric spaces and positive definite functions. -Trans. Amer. Math. Soc. - 1938.- 44.

Надійшла до редколегії 10.03.2006



УДК 512.53

Євгенія А. Кочубінська, аспірант

## Абстрактна характеристика напівгрупи часткових автоморфізмів кореневого дерева

Дано абстрактну характеристику напівгрупи  
часткових автоморфізмів кореневого дерева.

Ключові слова: абстрактна характеристика,  
частковий автоморфізм, кореневе дерево.

E-mail: eugenia@univ.kiev.ua

### 1 Вступ

Вивчення напівгруп перетворень конкретних алгебраїчних і комбінаторних структур уже давно є одним із основних завдань теорії напівгруп (див., наприклад, огляд [3]). Зокрема, багато робіт присвячено дослідженню напівгруп різних класів перетворень графів: ендоморфізмів, часткових автоморфізмів, часткових ендоморфізмів, стискуючих перетворень і т.п. (див., наприклад, [3,4,6] і вказану там літературу).

Одним з питань, яке виникає при дослідженні різних напівгруп перетворень графів, є питання їх абстрактної характеристики, тобто опису з точністю до ізоморфізму тих напівгруп, які є напівгрупами перетворень (даного типу) графів із даного класу. У певному сенсі такі дослідження беруть початок від відомої роботи Р.Фрухта [1], який показав, що кожна скінченна група є групою автоморфізмів деякого графа. Приклади інших абстрактних характеристик (із посиланням на оригінальні роботи) містить і огляд В.Молчанова [3]. Серед інших результатів вкажемо роботу [4], де дається абстрактна характеристика напівгрупи часткових ендоморфізмів графа, і роботу [6], де дається абстрактна характеристика напівгрупи тих часткових ендоморфізмів, які зберігають порядок.

Ми розглядаємо кореневі дерева (тобто дерева з виділеною вершиною — коренем) і ті часткові автоморфізми кореневого дерева, які зберігають рівень вершини (тобто віддаль від вершини до кореня), і область визначення яких є зв'язним підграфом дерева. Основним результатом роботи є теорема 2, в якій дається абстрактна характеристика таких напівгруп.

### 2 Абстрактна характеристика напівгрупи часткових автоморфізмів кореневого дерева

Означення. Порядковим ідеалом частково впорядкованої множини  $P$  називається така її

Yevgeniya A. Kochubinska, PhD Student

## Abstract characterization of the semigroup of partial automorphisms of a rooted tree

Abstract characterization of the semigroup of  
partial automorphism of a rooted tree is given.

Key Words: abstract characterization, partial  
automorphism, rooted tree.

підмножина  $I \subset P$ , що якщо  $x \in I$  і  $y \leq x$ , то  $y \in I$ .

Множина порядкових ідеалів, яка впорядкована за включенням, утворює частково впорядковану множину  $J(P)$ . Відносно операцій об'єднання та перетину підмножин з  $P$  множина  $J(P)$  є дистрибутивною решіткою.

**Теорема 1.** [6, Теорема 3.4.1] Нехай  $L$  — скінченна дистрибутивна решітка. Тоді існує єдина (з точністю до ізоморфізму) скінченна частково впорядкована множина  $P$ , для якої  $L \cong J(P)$ , де  $J(P)$  — решітка порядкових ідеалів.

Нехай  $T$  — кореневе дерево,  $VT$  та  $ET$  — множини його вершин та ребер відповідно,  $\text{ConPAut } T$  — напівгрупа таких часткових автоморфізмів, які не рухають кореневу вершину, і область визначення яких є зв'язним графом.

Кожний ідемпотент напівгрупи  $\text{ConPAut } T$  однозначно задається своєю областю визначення — кореневим піддеревом. Перетин та об'єднання двох корневих піддерев знов буде кореневим піддеревом. Отже, решітку ідемпотентів напівгрупи  $\text{ConPAut } T$  можна розглядати як підрешітку решітки підмножин множини  $ET$ , причому операції в решітці ідемпотентів переходять у звичайні операції перетину та об'єднання множин. Відомо, що решітка підмножин деякої множини відносно перетину та об'єднання є дистрибутивною, тому решітка ідемпотентів напівгрупи  $\text{ConPAut } T$  також дистрибутивна. Отже, маємо наступне твердження:

**Твердження 1.** Решітка ідемпотентів напівгрупи  $\text{ConPAut } T$  дистрибутивна.

На множині вершин кореневого дерева вводиться відношення порядку: для вершин  $x$  та  $y$   $x \leq y$ , якщо існує шлях з вершини  $x$  у вершину  $y$ , що не проходить через корінь. Якщо розглядати кореневе дерево як частково впорядковану множину, то, очевидно, кожне кореневе піддере-



во визначає порядковий ідеал. У свою чергу, кожний ідемпотент однозначно визначається деяким кореневим піддеревом дерева  $T$ , і навпаки, кожне кореневе піддерево однозначно визначає ідемпотент. На множині ідемпотентів відношення порядку  $\omega$  задається наступним чином:  $e\omega f \Leftrightarrow ef = e$ . Нехай  $\Gamma_1, \Gamma_2$  — кореневі піддерева дерева  $T$ ,  $e_{\Gamma_1}, e_{\Gamma_2}$  — ідемпотенти з областями визначення  $\Gamma_1, \Gamma_2$  відповідно і нехай  $e_{\Gamma_1}\omega e_{\Gamma_2}$ . Тоді  $e_{\Gamma_1}\omega e_{\Gamma_2} \Leftrightarrow e_{\Gamma_1}e_{\Gamma_2} = e_{\Gamma_1}$ , тобто  $e_{\Gamma_1\cap\Gamma_2} = e_{\Gamma_1}$ , тому  $\Gamma_1\cap\Gamma_2 = \Gamma_1$ , отже  $\Gamma_1 \subset \Gamma_2$ . З іншого боку, з того, що  $\Gamma_1 \subset \Gamma_2$  випливає, що  $e_{\Gamma_1}\omega e_{\Gamma_2}$ . Отже,  $(E(\text{ConPAut } T), \omega) \cong J(T)$  як частково впорядковані множини.

**Твердження 2.** Нехай  $T_1, T_2$  — скінченні кореневі дерева. Тоді

$$E(\text{ConPAut } T_1) \cong E(\text{ConPAut } T_2)$$

тоді і лише тоді, коли  $T_1 \cong T_2$ .

*Доведення.* Нехай

$$\varphi: E(\text{ConPAut } T_1) \rightarrow E(\text{ConPAut } T_2)$$

— ізоморфізм. Оскільки  $e\omega f \Leftrightarrow ef = e$ , тоді  $\varphi(ef) = \varphi(e)\varphi(f) = \varphi(e)$ , отже,  $\varphi(e)\omega\varphi(f)$ . Оскільки  $\varphi^{-1}$  — також ізоморфізм, то з аналогічних міркувань отримуємо, що з  $\varphi(e)\omega\varphi(f)$  випливає  $e\omega f$ . Тоді решітки  $(E(\text{ConPAut } T_1), \omega)$  і  $(E(\text{ConPAut } T_2), \omega)$  ізоморфні.

З іншого боку,

$$(E(\text{ConPAut } T_i), \omega) \cong (J(T_i), \tilde{\omega}), \quad i=1,2.$$

Оскільки  $E(\text{ConPAut } T_i)$  — дистрибутивна решітка, то з теореми 1 випливає, що  $T_1 \cong T_2$ .

Нехай  $\Theta: T_1 \rightarrow T_2$  — ізоморфізм, тоді відображення  $\varphi(e_i) = \Theta^{-1}e_i\Theta$  задає ізоморфізм між  $E(\text{ConPAut } T_1)$  та  $E(\text{ConPAut } T_2)$ .  $\square$

**Твердження 3.**  $\text{ConPAut } T_1 \cong \text{ConPAut } T_2$  тоді і лише тоді, коли  $T_1 \cong T_2$ .

*Доведення.* З ізоморфізму напівгруп  $\text{ConPAut } T_1$  і  $\text{ConPAut } T_2$  випливає ізоморфізм множин ідемпотентів  $E(\text{ConPAut } T_1)$  та  $E(\text{ConPAut } T_2)$ . Застосувавши твердження 2, отримаємо  $T_1 \cong T_2$ .

Зворотне твердження очевидне.  $\square$

*Означення.* Елемент  $x$  решітки  $L$  називається нерозкладним в об'єднання, якщо його не можна записати у вигляді  $x = y \vee z$ , де  $y < x, z < x$ .

**Твердження 4.** [6, Твердження 3.4.2] Множина нерозкладних в об'єднання елементів мно-

жини  $J(P)$  ізоморфна  $P$ . Отже,

$$J(P) \cong J(Q) \Leftrightarrow P \cong Q.$$

**Теорема 2.** Нехай  $S$  — скінченна інверсна напівгрупа,  $L$  — решітка ідемпотентів напівгрупи  $S$  відносно природного часткового порядку,  $P$  — множина нерозкладних в об'єднання елементів решітки  $L$ ,  $\text{PAut } P$  — напівгрупа часткових автоморфізмів частково впорядкованої множини  $P$ . Нехай відображення  $\varphi: S \rightarrow \text{PAut } P$  задане наступним чином:  $p^{\varphi(s)} = s^{-1}ps$ , де  $s \in S, p \in P$ . Тоді  $S$  є напівгрупою часткових автоморфізмів деякого дерева тоді і лише тоді, коли решітка  $E(S)$  ідемпотентів напівгрупи  $S$  дистрибутивна,  $P$  — порядковий ідеал решітки  $L$  і  $\varphi$  — ізоморфізм.

*Доведення.* Розглянемо напівгрупу  $\text{ConPAut } T$ . За твердженням 1 решітка ідемпотентів цієї напівгрупи дистрибутивна. Для кожної вершини  $v \in VT$  через  $I_v$  позначимо шлях з кореневої вершини у вершину  $v$ , через  $e_{I_v}$  — ідемпотент, областю визначення якого є шлях  $I_v$ . Тоді  $\{e_{I_v} \mid v \in VT\}$  — множина нерозкладних в об'єднання елементів решітки  $E(\text{ConPAut } T)$ . Дійсно, якщо припустити, що деякий ідемпотент, областю визначення якого є деякий шлях  $I$ , можна подати у вигляді  $e_I = x \vee y$ , де  $x\omega e_I, y\omega e_I$ , то області визначення  $x$  і  $y$  є підшляхами шляху  $I$ . Але тоді рівність  $e_I = x \vee y$  можлива лише тоді, коли або  $\text{dom}(x) = I$ , або  $\text{dom}(y) = I$ , тобто або  $x = e_I$ , або  $y = e_I$ . З іншого боку, будь-який інший ідемпотент, областю визначення якого є кореневе піддерево, відмінне від шляху, можна зобразити у вигляді об'єднання ідемпотентів, областями визначення яких є деякі шляхи. Неважко перевірити, що множина нерозкладних в об'єднання елементів решітки  $(E(\text{ConPAut } T), \omega)$  є порядковим ідеалом цієї решітки, причому цей порядковий ідеал є деревом.

Нехай  $S$  — інверсна напівгрупа з дистрибутивною решіткою  $(E(S), \omega)$  ідемпотентів,  $P$  — множина нерозкладних в об'єднання елементів решітки  $(E(S), \omega)$ . За теоремою 1 і твердженням 4  $(E(S), \omega) \cong J(P)$ . З того, що  $P$  — порядковий ідеал, елементами якого є нерозкладні в об'єднання елементи, випливає, що  $P$  — дерево. Задамо тепер часткову дію  $S$  на  $P$ . Нехай  $s \in S, p \in P$ . Область визначення визначимо наступним чином:  $p \in \text{dom}(\varphi(s)) \Leftrightarrow p\omega ss^{-1}$ . Тоді часткову



дію  $\varphi(s)$  на  $P$  визначимо як  $p^{\varphi(s)} = s^{-1}ps$ .

Елемент  $s^{-1}ps$  є нерозкладним в об'єднання, бо коли  $s^{-1}ps = a \vee b$ , то  $a\omega s^{-1}ps\omega s^{-1}s$ ,  $b\omega s^{-1}ps\omega s^{-1}s$ ,  $sas^{-1}\omega p, sbs^{-1}\omega p$ . Отже, або  $sas^{-1}\omega sbs^{-1}$ , або  $sbs^{-1}\omega sas^{-1}$ , тому або  $s^{-1}sas^{-1}s\omega s^{-1}sbs^{-1}s$ ,  $a\omega b$ , і  $a \vee b = b$ , або (з тих самих міркувань)  $a \vee b = a$ , отже, або  $a \vee b = b = s^{-1}ps$ , або  $a \vee b = b = s^{-1}ps$ , і  $s^{-1}ps$  — нерозкладний в об'єднання. Таким чином, перетворення  $\varphi(s)$  задає часткову дію на множині  $P$ . Це перетворення є гомоморфізмом, оскільки  $(p_1p_2)^{\varphi(s)} = s^{-1}p_1p_2s = s^{-1}p_1ss^{-1}p_2s = p_1^{\varphi(s)}p_2^{\varphi(s)}$ , бо  $p\omega ss^{-1}$ . Також  $\varphi(s)$  є ін'єктивним. Дійсно, припустимо, що  $p_1^{\varphi(s)} = p_2^{\varphi(s)}$ , згідно визначення дії маємо, що  $s^{-1}p_1s = s^{-1}p_2s$ , оскільки  $p_1\omega ss^{-1}$ ,  $p_2\omega ss^{-1}$ , то, домноживши на  $s$  зліва, а на  $s^{-1}$  справа, отримаємо  $p_1 = p_2$ . З того, що  $p_1\omega p_2$  випливає, що  $p_1^{\varphi(s)}\omega p_2^{\varphi(s)}$ , бо

$$p_1^{\varphi(s)}p_2^{\varphi(s)} = s^{-1}p_1ss^{-1}p_2s = s^{-1}p_1s = p_1^{\varphi(s)},$$

тобто відображення  $\varphi(s)$  зберігає відношення порядку. Нехай  $e_0$  — нульовий ідемпотент, тоді  $e_0^{\varphi(s)} = e_0$ , отже, відображення  $\varphi(s)$  зберігає корінь.

Лишилося перевірити, що відображення зберігає відношення "бути сусідніми вершинами". Нехай  $p_1, p_2$  — сусідні вершини і  $p_1\omega p_2$ . Припустимо, що під дією відображення  $\varphi(s)$  вони перейшли у вершини  $q_1 = s^{-1}p_1s$  і  $q_2 = s^{-1}p_2s$  відповідно, але так, що існує деяка вершина  $p$  така, що  $q_1\omega p\omega q_2$ ,  $p \neq q_1$ ,  $p \neq q_2$ . Розглянемо відображення  $\psi(s)$ , яке задане наступним чином:  $q^{\psi(s)} = sqs^{-1}$ . Аналогічно, як це було для  $\varphi(s)$ , перевіряється, що  $\psi(s)$  зберігає операцію та зберігає порядок. Тоді  $q_1^{\psi(s)}\omega p^{\psi(s)}\omega q_2^{\psi(s)}$ , тобто  $p_1\omega p^{\psi(s)}p_2$ ,  $p_1 \neq p^{\psi(s)}$ ,  $p_2 \neq p^{\psi(s)}$ . Оскільки  $P$  —

порядковий ідеал і  $p^{\psi(s)}\omega p_2$ , то  $p^{\psi(s)} \in \text{dom}(\varphi(s))$  є нерозкладним в об'єднання. За припущенням вершини  $p_1$  та  $p_2$  — сусідні. Отримали протиріччя. Отже, відношення "бути сусідніми вершинами" зберігається. Таким чином, перетворення  $\varphi(s)$  є частковим автоморфізмом множини  $P$ . За умовою відображення  $\varphi$  (яке елементу  $s \in S$  співставляє перетворення  $\varphi(s)$  множини  $P$ ) є ізоморфізмом. Оскільки  $P$  — дерево, то теорему доведено.

### 3 Висновки

У роботі розглянуто напівгрупу  $\text{ConPAut } T$  часткових автоморфізмів кореневого дерева, область визначення яких є зв'язним графом та містить кореневу вершину. Доведено, що напівгрупи  $\text{ConPAut } T_1$  та  $\text{ConPAut } T_2$  ізоморфні тоді і лише тоді, коли ізоморфні дерева  $T_1$  та  $T_2$ , а також отримано абстрактну характеристику напівгрупи  $\text{ConPAut } T$ .

### Список використаних джерел

1. Frucht R. Herstellung von Graphen mit vorgegebenen Abstrakter Gruppen // *Compositio Math.* – 1938 – 6 – P. 239–250
2. Maxson C.J. Semigroups of order-preserving partial endomorphisms on trees // *Colloquium Mathematicum* – 1974 – 32 – P.25–37
3. Molchanov V.A. Semigroups of mappings on graphs // *Semigroup Forum* – 1983 – 27 – P.155–199.
4. Molchanov V.A. Concrete characterization of partial endomorphisms semigroups on graphs // *Acta Sci. Math.* – 1987 – 51 – P.349–363
5. Stanley R.P. Enumerative Combinatorics. – Vol. 1, Wadsworth, 1986
6. Vernitskii A. Semigroups of order-decreasing graph endomorphisms // *Semigroup Forum* – 1999 – 58 – P.222–240.

Надійшла до редколегії 28.03.2006



УДК 519.21

Анастасія Є. Лодатко, аспірант

## Робастне оцінювання по спостереженнях з домішкою

У статті розглядається задача оцінки невідомого параметра вибірки, спостереження якої містять домішку. Концентрації вважаються повністю відомими. Запропонована оцінка на основі медіани, доведена її консистентність та асимптотична нормальність.

Ключові слова: суміш зі змінними концентраціями, медіана.

E-mail: lodatko@yandex.ru

### 1. Вступ і огляд літератури

У даній роботі продовжується розгляд задач оцінювання по спостереженнях з домішкою, розпочатий в [1,2]. Розглядається випадок, коли розподіл основної компоненти  $H_1$  відомий з точністю до параметра  $\theta \in \Theta \subseteq R$  (тобто заданий параметрично), а розподіл домішки  $H_2$  повністю невідомий. Концентрації компонент  $w_{iN}$  у суміші змінюються з кожним новим спостереженням, і вважаються відомими. Нашою метою буде побудова робастної оцінки невідомого параметру функції розподілу основної компоненти. Для цього ми використовуємо зважену вибірккову медіану.

$(\xi_{iN}, i=1 \dots N)$  - вибірка з незалежних випадкових величин і

$P\{\xi_{iN} < x\} = w_{iN}H_1(x, \theta) + (1 - w_{iN})H_2(x)$ , де

$\theta \in \Theta \subseteq R, x \in R$ .

Нехай

$$w_{iN}^1 = w_{iN}, w_{iN}^2 = 1 - w_{iN}, W = \begin{pmatrix} w_{1N}^1 & w_{1N}^2 \\ \vdots & \vdots \\ w_{N,N}^1 & w_{N,N}^2 \end{pmatrix} -$$

матриця концентрацій.

$$a_{iN}^k = \frac{N}{\sum_{i=1}^N (w_{iN} - \bar{w})^2} \sum_{m=1}^2 (-1)^{m+k} \gamma_{km,N} w_{iN}^m - \text{ набір}$$

мінімаксних вагових коефіцієнтів, де  $\gamma_{km,N}$  -

Anastasiya Y. Lodatko, PhD student

## Robust estimation by observations with admixture

This paper deals with the problem of estimation of unknown parameter by observations from a mixture with varying concentrations. The concentrations are supposed to be known. The construction of the estimate by median is described. Their consistent and asymptotic normality are investigated.

Key Words: mixture with varying concentrations, median.

$km$ -мінор матриці  $\Gamma_N = \frac{1}{N} W^T W$ ,

$$\bar{w} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_{iN}. \text{ Для трикутних масивів}$$

$a = (a_{iN}, i=1, \dots, N; N=1, 2, \dots)$  позначатимемо

$$\langle a \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_{iN}, \quad \langle ab \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_{iN} b_{iN},$$

$$\langle a \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle a \rangle_N \text{ (якщо границя існує).}$$

$$\text{При } M=2 \quad \det \Gamma_N = \Delta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (w_{iN} - \bar{w})^2,$$

$$a_{iN}^1 = \frac{(1 - \bar{w}) w_{iN}^1 + (\langle (w)^2 \rangle_N - \bar{w})}{\Delta},$$

$$a_{iN}^2 = \frac{\langle (w)^2 \rangle_N - \bar{w} w_{iN}^1}{\Delta}.$$

У [2] запропоновано оцінку методу відсіяної вірогідності для  $\theta$ , але вона не є робастною.

### 2. Побудова оцінок та їх асимптотична поведінка

Щоб оцінити  $\theta$ , розглянемо теоретичну медіану:

$$M(\theta) = \text{med } H_1(x, \theta) = \sup \{t : H_1(t, \theta) \leq \frac{1}{2}\}.$$

Згідно з [3], хорошою оцінкою  $H_1$  є зважена емпірична функція розподілу



$\hat{H}_1(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_{i,N}^1 I\{\xi_i \leq x\}$ . На роль оцінки для

медіани  $H_1$  використаємо медіану  $\hat{H}_1(x)$ :

$$y_N = \text{med } \hat{H}_1(x) = \sup \{t : \hat{H}_1(t) \leq \frac{1}{2}\}.$$

Прирівнюючи теоретичну та емпіричну медіани, отримуємо медіанну оцінку параметру  $\hat{\theta}^{\text{мед}} = M^{-1}(y_N)$ .

Позначимо

$\text{med } H_1(x) = y_0$ ,  $\text{med } \hat{H}_1(x) = y_N$ . У теоремах 1, 2  $H_1(y) = H_1(y, \theta)$  - параметрична модель не використовується.

**Теорема 1.** Нехай

1.  $\exists c > 0 : \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (w_{i,N} - \bar{w})^2 > c$ ,
2.  $\{a_{i,N}\}$  - мінімаксий набір вагових коефіцієнтів,
3.  $\forall m = 1, 2$  існують границі  $\langle a_{\cdot} w^m I\{a_{\cdot} < 0\} \rangle$  і  $\langle a_{\cdot} w^m I\{a_{\cdot} > 0\} \rangle$ ,
4.  $H_1$  - неперервна і строго зростає в точці  $y_0$ .

Тоді  $y_N$  є консистентною оцінкою  $y_0$ , тобто  $y_N \rightarrow y_0$  м.н.,  $N \rightarrow \infty$ .

**Доведення.** Скористаємося теоремою 4.1.1 з [3]. Для мінімаксного набору вагових коефіцієнтів виконується умова незміщеності і

$$\sup_{i,N} |a_{i,N}^k| \leq \frac{8}{c} \quad (\text{оскільки } |w_{i,N}^k| < 1, |\gamma_{km,N}| \leq 4).$$

Нехай для будь-якого  $A > 0$   $Z_A(R)$  - клас усіх знакозмінних мір (зарядів) на  $R$ , варіація яких не перевищує  $A$ .  $Z_A^* = Z_A^*(R)$  - клас функцій розподілу для мір з  $Z_A(R)$ . Якщо  $A > 1$ , то функція розподілу будь-якої компоненти  $H_m$  належить  $Z_A^*(R)$ . У [4], стор. 49, показано, що медіана - неперервний функціонал у точці  $H_1$  у просторі функцій розподілу знакозмінних мір з рівномірною нормою  $(Z_A^*, |\cdot|_{\infty})$ . Тому  $y_N \rightarrow y_0$  м.н.,  $N \rightarrow \infty$ .

**Теорема 2.** Нехай виконуються умови теореми 1 і

$$1. \exists H_1'(y_0) = \left. \frac{dH_1}{dy} \right|_{y=y_0} \neq 0,$$

$$2. \exists \langle (w^l)^k \rangle, k = 1, \dots, 4.$$

Тоді  $\sqrt{N}(y_N - y_0) \Rightarrow N(0, \sigma^2)$ , де дисперсія

$$\sigma^2 = \frac{1}{(H_1'(y_0))^2} \left[ \langle (a^1)^2 \rangle (H_2(y_0) - H_2^2(y_0)) + \langle (a^1)^2 w^1 \rangle \left( \frac{1}{2} - 2H_2(y_0) + 2H_2^2(y_0) \right) + \langle (a^1)^2 (w^1)^2 \rangle \left( H_2(y_0) - \frac{1}{4} - H_2^2(y_0) \right) \right]$$

(Коефіцієнти  $a^1$  можна виразити через  $w^1$ , але вираз досить громіздкий, і в статті він не наводиться).

**Доведення.** Позначимо

$\delta_N(\cdot) = \sqrt{N}(\hat{H}_1(\cdot) - H_1(\cdot))$ . Для доведення теореми знадобиться допоміжна лема.

**Лема.** В умовах теореми 2

$$\sup_N P\{\sup_{|y-x|<l} |\delta_N(y) - \delta_N(x)| > \lambda\} \rightarrow 0, l \rightarrow 0.$$

**Доведення.** За наслідком 2.5.1 з [3]  $\delta_N(\cdot)$  збігається до  $\delta(\cdot)$  за Скороходом, тобто існує такий імовірнісний простір, на якому можна побудувати послідовність випадкових елементів  $\{\delta_N'\}$  та випадковий елемент  $\delta'$  такі, що  $\delta_N', \delta'$  мають такі ж самі розподіли, що і  $\delta_N, \delta$  відповідно:  $\delta_N' \rightarrow \delta'$  у  $S$  м.н.  $N \rightarrow \infty$ .

$\delta(\cdot)$  є гауссовим випадковим процесом з неперервними траєкторіями, нульовим середнім і коваріаційною функцією

$$E\delta(x)\delta(y) = \sum_{m=1}^2 \langle (a^1)^2 w^m \rangle H_m(\min(x, y)) - \sum_{m,l=1}^2 \langle (a^1)^2 w^m w^l \rangle H_m(y) H_l(x).$$

$\delta(\cdot)$  є вибірково неперервним (тобто є випадковим елементом простору  $C(R)$ ).

$$|\delta_N(y) - \delta_N(x)| = |\delta_N(y) - \delta(y) + \delta(y) - \delta(x) + \delta(x) - \delta_N(x)| \leq |\delta_N(y) - \delta(y)| + |\delta_N(x) - \delta(x)| + |\delta(y) - \delta(x)|$$

Враховуючи вибірково неперервність  $\delta(\cdot) \forall \varepsilon > 0$  можна обрати достатньо мале



1:  $P\{\sup_{|y-x|<l} |\delta(y) - \delta(x)| > \frac{\lambda}{3}\} \leq \frac{\varepsilon}{3}$ . Зі збіжності за

Скорихом для достатньо великих  $N$

$P\{\sup_{|y-x|<l} |\delta_N(x) - \delta(x)| > \frac{\lambda}{3}\} \leq \frac{\varepsilon}{3}$ . Тому

$P\{\sup_{|y-x|<l} |\delta_N(y) - \delta_N(x)| > \lambda\} \leq \varepsilon$ .

Доведення. За позначенням  
 $\sqrt{N}(\text{med } \hat{H}_1(x) - \text{med } H_1(x)) = \sqrt{N}(y_N - y_0)$ .

$$\hat{H}_1(y_N) = H_1(y_N) + \frac{\delta_N(y_N)}{\sqrt{N}}$$

За теоремою 1  
 $H_1(y_N) = H_1(y_0) + H'_1(\zeta_N)(y_N - y_0)$ ,  
 $\zeta_N \in (y_0, y_N)$ .

$$H_1(y_0) + H'_1(\zeta_N)(y_N - y_0) + \frac{\delta_N(y_0)}{\sqrt{N}} + \frac{\delta_N(y_N) - \delta_N(y_0)}{\sqrt{N}} = \hat{H}_1(y_N).$$

За означенням вибіркової медіани

$$\frac{1}{2} - \frac{\sup_{i:N} a_{i:N}}{N} \leq \hat{H}_1(y_N) \leq \frac{1}{2} + \frac{\sup_{i:N} a_{i:N}}{N}.$$

$$\sqrt{N}(y_N - y_0) \leq \frac{\delta_N(y_0) - \delta_N(y_N)}{H'_1(\zeta_N)} - \frac{\delta_N(y_0)}{H'_1(\zeta_N)} +$$

$$\frac{\sup_{i:N} a_{i:N}}{N}.$$

$\delta_N$  є асимптотично нормальною з середнім 0 і коваріаційною функцією

$$E\delta_N(x)\delta_N(y) = \sum_{m=1}^2 \langle (a^1)^2 w^m \rangle H_m(\min(x, y)) - \sum_{m,j=1}^2 \langle (a^1)^2 w^m w^j \rangle H_m(y) H_j(x).$$

Отже,  $\sqrt{N}(y_N - y_0)$  слабо збігається до гауссівського випадкового процесу з нульовим середнім і дисперсією

$$\frac{1}{(H'_1(y_0))^2} \left[ \sum_{m=1}^2 \langle (a^1)^2 w^m \rangle H_m(y_0) - \sum_{m,j=1}^2 \langle (a^1)^2 w^m w^j \rangle H_m(y_0) H_j(y_0) \right].$$

Враховуючи, що  $H_1(y_0) = \frac{1}{2}$ , отримуємо твердження теореми.

**Теорема 3.** Нехай виконуються умови теореми 1,  $H_1(\cdot)$  строго зростає на  $[a, b]$ ,  $\exists M^{-1}$ , яка є неперервною та диференційованою в точці  $y_0$ , тоді  $\exists \hat{\theta}^{\text{мед}} = M^{-1}(y_N)$  і є консистентною оцінкою  $\theta$ .

Доведення.  $y_N \rightarrow y_0$  м.н.,  $N \rightarrow \infty$ , то за означенням неперервної функції  $\hat{\theta}^{\text{мед}} = M^{-1}(y_N) \rightarrow M^{-1}(y_0) = \theta$  м.н.,  $N \rightarrow \infty$ .

**Теорема 4.** В умовах теореми 3  $\hat{\theta}^{\text{мед}}$  асимптотично нормальна з середнім 0 і дисперсією

$$\sigma_{\text{мед}}^2 = \left[ \frac{dM^{-1}}{dy} \Big|_{y=y_0} \right]^2 \left[ \langle (a^1)^2 \rangle (H_2(y_0) - H_2^2(y_0)) + \langle (a^1)^2 w^1 \rangle \left( \frac{1}{2} - 2H_2(y_0) + 2H_2^2(y_0) \right) + \langle (a^1)^2 (w^1)^2 \rangle \left( H_2(y_0) - \frac{1}{4} - H_2^2(y_0) \right) \right],$$

тобто  $\sqrt{N}(\hat{\theta}^{\text{мед}} - \theta) \Rightarrow N(0, \sigma_{\text{мед}}^2)$ .

Доведення.  $\delta_N$  слабо збігається до  $\delta$  - гауссівського процесу з середнім 0 і дисперсією

$$\sigma^2 = \langle (a^1)^2 \rangle (H_2(y_0) - H_2^2(y_0)) + \langle (a^1)^2 w^1 \rangle \left( \frac{1}{2} - 2H_2(y_0) + 2H_2^2(y_0) \right) + \langle (a^1)^2 (w^1)^2 \rangle \left( H_2(y_0) - \frac{1}{4} - H_2^2(y_0) \right).$$

За виконання умов теореми виконані всі умови теореми неперервності 3А з [4], то

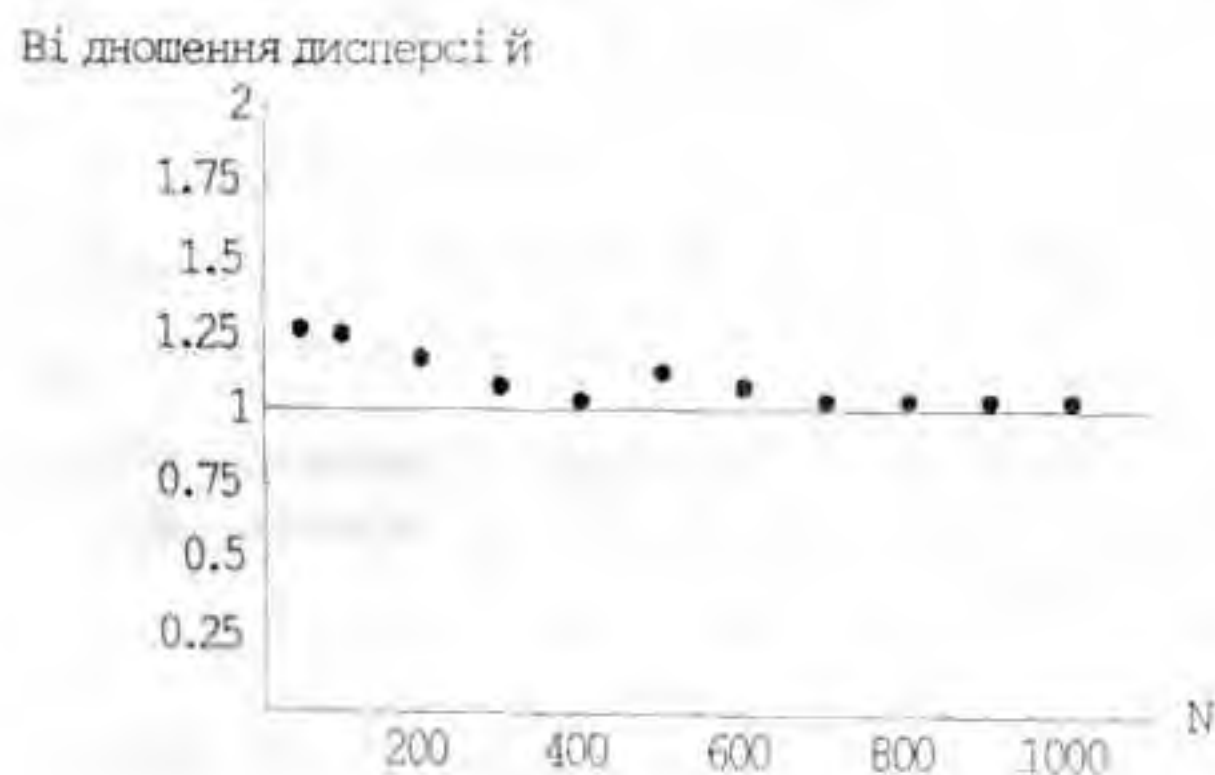
$$\sqrt{N}(\hat{\theta}^{\text{мед}} - \theta) \Rightarrow \delta \frac{dM^{-1}}{dy} \Big|_{y=y_0}.$$

**Приклад.** Розглянемо випадок, коли основна компонента і домішка мають зрізаний експоненційний розподіл:

$$H_1(x, \theta) = \begin{cases} \frac{1 - e^{-\theta x}}{1 - e^{-\theta T}}, & x \in (0, T) \\ 1, & x \notin (0, T) \end{cases} = \frac{1 - e^{-\theta x}}{1 - e^{-\theta T}} 1\{x \in (0, T)\} + 1\{x \notin (0, T)\}, \theta \in (0, +\infty) = \Theta, T - \text{відоме.}$$



Було змодельовано по 1000 вибірок обсягом від 50 до 1000 (50, 100, 200, 300, 400 і т.д.). На графіку представлене відношення вибіркової дисперсії медіанної оцінки параметру до асимптотичної дисперсії в залежності від обсягу вибірки. По осі абсцис відкладено обсяг вибірки, по осі ординат – відношення дисперсій:



### Список використаних джерел

1. Майборода Р.Є., Лодатко А.Є. Адаптивна моментна оцінка параметру розподілу по спостереженнях з домішкою. – Київ: Теорія ймовірностей та математична статистика (прийнято до друку).
2. Майборода Р.Є., Лодатко А.Є. Оцінювання щільності розподілу по спостереженнях з домішкою. – Київ: Теорія ймовірностей та математична статистика, вип.71, 2005. – 56 с.
3. Майборода Р.Є. Статистичний аналіз сумішей. – Київ: ВПЦ „Київський університет”, 2003. – 176 с.
4. Боровков А.А. Математическая статистика. Оценка параметров. Проверка гипотез. – М.: Наука, 1984. – 472 с.

Надійшла до редакції 12.04.2006



УДК 512.54

Оксана О.Одінцова, к.фіз.-м.н., в.о.доцента

## Про групи з сепаруючими підгрупами відносно систем примарних циклічних підгруп

Подано характеристику груп, в яких нормальною є кожна примарна циклічна підгрупа, що не належить деякій власній підгрупі групи. Також встановлено, які з класів груп еквівалентні підкласу розглядуваних груп

Ключові слова: сепаруюча підгрупа, сепаратор, опис груп.

E-mail: oincube@yahoo.com

### 1 Вступ

Вивчення груп з сепаруючими підгрупами було розпочато у 70-х роках ХХ століття роботами Д.Кеппіта [4], С.М.Чернікова [3], А.Ф.Баранніка [1] та є одним із напрямків досліджень груп, у яких ті чи інші системи підгруп задовольняють заздалегідь задані умови.

Група  $G$  називається групою з сепаруючими підгрупами відносно системи підгруп  $\Sigma$ , якщо в  $G$  існує така підгрупа  $S$  (сепаруюча підгрупа), що кожна підгрупа з системи підгруп  $\Sigma$  є нормальною в  $G$  при умові, що вона не належить до  $S$ . Систему підгруп  $\Sigma$  складають ті підгрупи групи  $G$ , які мають певну теоретико-групову властивість. Будь-яка підгрупа  $S_1$  групи  $G$ , яка містить сепаруючу підгрупу  $S$ , буде теж сепаруючою підгрупою у групі  $G$  відносно системи підгруп  $\Sigma$ . Перетин  $M$  сепаруючих підгруп групи  $G$  називається сепаратором цієї групи. Означення сепаруючої підгрупи, сепаратора групи було дане С.М.Черніковим у роботі [3]. Там же встановлено, що сепаратор  $M$  збігається з підгрупою, породженою всіма ненормальними підгрупами системи  $\Sigma$ , у разі відсутності таких  $M=1$ . С.М.Черніков ([3]) поставив загальну задачу опису груп з сепаруючими підгрупами.

У даній роботі охарактеризовано групи з сепаруючими підгрупами відносно системи примарних циклічних підгруп (їх позначено  $H(PC'S)$ -групами), а також встановлено, які класи груп з сепаруючими підгрупами відносно різних систем підгруп еквівалентні між собою та ізоморфні підкласу класу  $H(PC'S)$ -груп.

$H(S)$ -групами позначено групи з сепаруючими підгрупами, у яких система підгруп  $\Sigma$  складається з власних підгруп групи [2]. Вони вивчалися в

Oksana A. Odintsova, Cand.Sci(Phys.-Math.),  
Associate Professor

## On groups with separating subgroups relativity systems of prime cyclic subgroups

There is description of the groups in which all prime cyclic subgroups are normal in group when they don't belong to some proper subgroup of the group in this article. It's obtained the classes of groups which are equivalent to groups under study.

Key words: separating subgroup, separator, description of group.

роботах [4], [1], а повний опис цих груп дано в роботі М.Ф.Кузенного та М.М.Семка [2].

### 2 Характеризація груп з сепаруючими підгрупами відносно систем примарними циклічними підгрупами

**Лема 1.** Нехай  $G$  – група,  $S$  – її власна підгрупа і  $G \setminus S$  містить елементи скінченного неодиначного порядку. Якщо в групі  $G$  нормальні всі примарні циклічні підгрупи, які не містяться в  $S$ , то  $G$  – група одного з типів:

1)  $G$  – група, у якій періодична частина  $T(G)$  – неодиначна квазіцентральна підгрупа групи  $G$ ;

2)  $G$  – група, що має нормальну підгрупу  $D = B \cdot A$ , яка містить всі елементи скінченного порядку, де  $B$  – нормальна в групі  $G$  підгрупа, породжена деякою множиною ненормальних в  $G$  примарних циклічних підгруп,  $B < D$ ,  $A$  – прямий добуток нормальних в  $G$  силовських  $p_i$ -підгруп  $P_i$ , кожна з яких містить власну підгрупу  $S_i < G_i$  і в групі  $G$  нормальні всі підгрупи з  $P_i$ , що не містяться в  $S_i$ , де  $i \in I$ ,  $|I| > 0$ ,  $p_i \in \pi(G)$ ,  $[B, A] = 1$ .

**Доведення.** Нехай  $G$  – досліджувана група. Тоді  $G \setminus S$  містить елемент  $a_i$ ,  $|a_i| = p_i^{\alpha_i}$ ,  $\alpha_i > 0$ ,  $p_i \in \pi(G)$ ,  $i \in I$ ,  $|I| > 0$ .

Якщо в групі  $G$  нормальні всі примарні циклічні підгрупи, то  $G$  має періодичну частину  $T(G)$ ,  $T(G)$  – неодиначна квазіцентральна підгрупа, і  $G$  – група типу 1 леми.

Нехай  $G$  містить ненормальні примарні циклічні підгрупи. Тоді вони породжують нормальну в  $G$  підгрупу  $K$ , яка є неодиначним сепаратором та  $K < S$ .

За означенням  $\langle a_i \rangle < G$ . Припустимо, що  $b_i$  – довільний  $p_i$ -елемент групи  $G$ . Покажемо, що



$\langle a_i \rangle \cdot \langle b_i \rangle = D_i \triangleleft G$ . Якщо  $D_i = \langle a_i \rangle$ , то  $D_i \triangleleft G$ . Нехай  $\langle a_i \rangle \neq D_i$ . Тоді  $b_i \notin \langle a_i \rangle$ . При умові не належності  $b_i$  до  $K$  маємо, що  $\langle b_i \rangle \triangleleft G$ ,  $D_i \triangleleft G$ . Припустимо, що  $b_i \in K$ . Тоді  $D_i = \langle c_i \rangle \cdot \langle a_i \rangle$ , де  $c_i = a_i b_i$ . Оскільки  $b_i \in K$ ,  $a_i \in K$ , то  $\langle c_i \rangle$  —  $p_i$ -група, яка не міститься в  $K$ . За умовою леми  $\langle c_i \rangle \triangleleft G$ , значить,  $D_i \triangleleft G$ . Отже, всі  $p_i$ -елементи групи  $G$  породжують нормальну в  $G$  силовську  $p_i$ -підгрупу  $P_i$ ,  $i \in I$ ,  $|I| > 0$ ,  $p_i \in \pi(G)$ .

Покладемо  $S_i = P_i \cap K$ . Тоді  $S_i \triangleleft G$ . Оскільки  $P_i \not\leq K$ , то  $S_i < P_i$ . Нехай далі  $g \in P_i \setminus S_i$ . Тоді  $g \notin K$ , а значить,  $\langle g \rangle \triangleleft G$ . Зрозуміло тепер, що будь-яка підгрупа  $X \leq P_i$ , яка не міститься в  $S_i$ , породжується множиною елементів  $X \setminus S_i$ , значить, за попереднім  $X \triangleleft G$ . Зрозуміло також, що  $G$  містить підгрупу  $A$ , яка розкладається в прямий добуток усіх  $P_i$ ,  $i \in I$ ,  $|I| > 0$ . Очевидно, що  $A$  — хвилівська підгрупа групи  $G$ .

Нехай  $g$  — довільний  $q$ -елемент групи  $G$  для деякого простого числа  $q$ , яке не належить  $\pi(A)$ . Покажемо, що  $[\langle g \rangle, P_i] = 1$ . Справді, у групі  $G$  існує скінченна підгрупа  $U_i = D_i \rtimes \langle g \rangle$  з нормальною силовською  $p_i$ -підгрупою  $D_i$ . Покажемо, що  $U_i$  — нільпотентна підгрупа. Для цього досить встановити, що  $\langle g \rangle \triangleleft U_i$ . Дійсно, якщо  $g \notin K$ , то за означенням  $\langle g \rangle \triangleleft G$ , а значить,  $\langle g \rangle \triangleleft U_i$ . Далі нехай  $\langle g \rangle \leq K$  і  $B_i = \langle a_i \rangle \rtimes \langle g \rangle$ ,  $d_i = a_i g$ . Покажемо, що  $[a_i, g] = 1$ . Нехай це не так. Тоді  $|d_i| = |g|$ , де  $d_i \notin K$  і за означенням підгрупа  $\langle d_i \rangle$  є нормальною в підгрупі  $\langle a_i \rangle \rtimes \langle g \rangle$  та  $\langle d_i \rangle$  — силовська  $q$ -підгрупа з  $U_i$ . За умовою леми  $\langle d_i \rangle \triangleleft G$ ,  $B_i = \langle a_i \rangle \rtimes \langle d_i \rangle = \langle a_i \rangle \rtimes \langle g \rangle$ ,  $B_i' = 1$ , що суперечить припущенню. Значить,  $[a_i, g] = 1$ . Отже, завжди  $[a_i, g] = 1$ .

За попереднім  $\langle c_i \rangle$  — нормальна підгрупа в групі  $G$ , де  $c_i = a_i b_i$ . Тепер як і для  $a_i$  встановлюємо, що  $[c_i, g] = 1$ . Але тоді  $[c_i, g] = [a_i b_i, g] = [b_i, g] = 1$ . Звідси,  $[D_i, \langle g \rangle] = 1$  та  $U_i$  — нільпотентна група.

Оскільки  $b_i$  — довільний елемент з  $P_i \setminus \langle a_i \rangle$ , то  $[P_i, \langle g \rangle] = 1$ . З цього випливає, що  $C_G(A)$  містить будь-який  $q$ -елемент групи  $G$  для якого простого числа  $q$ , що не належить  $\pi(A)$ .

Нехай  $D = K \cdot A$ . Тоді  $D \triangleleft G$ . Зрозуміло, що всі примарні елементи групи  $G$  належать  $D$ .

Нехай  $B$  — підгрупа, що породжується  $q$ -елементами  $g$  для всіх простих чисел  $q \in \pi(G)$ ,  $q \notin \pi(A)$  та для яких підгрупа  $\langle g \rangle$  не є нормальною в групі  $G$ . Тоді за попереднім  $B \leq K$ ,  $B \triangleleft G$ ,  $[A, B] = 1$ ,  $D = B \cdot A$  і  $G$  — група типу 2 леми.

Лему доведено.

**Теорема 1.** Група  $G \in H(PC \setminus S)$ -групою

тоді і тільки тоді, коли  $G$  — група одного з типів:

1)  $G$  — неодиначна група з періодичною частиною  $T(G)$ ,  $T(G)$  — квазіцентральна підгрупа групи  $G$  і сепаруюча підгрупа  $S = 1$ ;

2)  $G$  — група з нормальною підгрупою  $D = B \cdot A$ , яка містить всі елементи скінченного порядку, де  $B$  — нормальна підгрупа в  $G$ , породжена деякою множиною ненормальних в  $G$  примарних циклічних підгруп,  $B < D$ ,  $A$  — прямий добуток нормальних в  $G$  силовських  $p_i$ -підгруп  $P_i$ , кожна з яких містить власну підгрупу  $S_i \triangleleft G$  і в групі  $G$  нормальні всі підгрупи  $P_i$ , що не містяться в  $S_i$ , де  $i \in I$ ,  $|I| > 0$ ,  $p_i \in \pi(G)$ ,  $[A, B] = 1$ , і сепаруюча підгрупа  $S$  у цьому випадку має вигляд  $S = B \cdot \prod_{i \in I} S_i$ ;

3)  $G$  — група, в якій всі ненормальні примарні циклічні підгрупи породжують власну неодиначну нормальну підгрупу  $K$ , і  $K$  містить всі елементи скінченного порядку групи  $G$ , як сепаруючу підгрупу можна взяти  $S = K$ .

**Доведення. Необхідність.** Нехай  $G$  — досліджувана група. Якщо всі примарні циклічні підгрупи нормальні в  $G$ , то як при доведенні леми 1 група  $G$  має періодичну частину  $T(G)$ , де  $T(G)$  — неодиначна квазіцентральна підгрупа групи. Отже у цьому випадку  $G$  — група типу 1 теореми.

Якщо  $G$  має ненормальні примарні циклічні підгрупи, то всі вони породжують власну неодиначну нормальну підгрупу  $K$ , яка збігається з сепаратором групи  $G$ . У випадку, коли всі елементи скінченного порядку групи  $G$  належать  $K$ , то  $G$  — група типу 3 теореми.

Нехай  $G \setminus K$  містить елементи скінченного порядку. Тоді  $G$  задовольняє умову леми 1 і може бути групою типів 1 або 2 цієї леми, але тоді  $G$  є групою типу 1 або 2 теореми відповідно.

Необхідність доведено.

**Достатність.** Нехай  $G$  — група одного з типів 1-3 теореми. Покажемо, що  $G$  містить таку власну підгрупу  $S$ , для якої в  $G$  нормальною є будь-яка примарна циклічна підгрупа групи  $G$ , що не міститься в  $S$ .

Дійсно, у групі  $G$  типу 1 нормальні всі примарні циклічні підгрупи, тому можна вважати, що  $S = 1$ . У групі  $G$  типу 3 можна вважати, що  $S = K$ .

Нехай, нарешті,  $G$  — група типу 2 теореми.  $G \geq D$ ,  $D = B \cdot A$ ,  $A \triangleleft G$ ,  $B \triangleleft G$ ,  $B < D$ ,  $[A, B] = 1$ . Усі примарні циклічні підгрупи належать  $D$ ,  $A$  — це прямий добуток неодиначних силовських  $p_i$ -підгруп  $P_i$  групи  $G$ ,  $P_i \triangleleft G$ ,  $p_i$  — просте число. Кожна з підгруп  $P_i$  групи  $A$  є  $H(S)$ -групою з сепаратором  $S_i < P_i$ . При цьому для довільного елемента  $g \in P_i \setminus S_i$  справедливо  $\langle g \rangle \triangleleft G$ .

Очевидно, що  $G$  містить власну підгрупу  $S =$



$$B \cdot (\prod_{i \in I} S_i), S \triangleleft D.$$

Нехай  $g$ — примарний елемент, який не міститься в  $S$ . Тоді за властивостями групи  $G$  маємо, що  $g \in D$ . Зрозуміло, що елемент  $g \in A$ , але тоді  $g \in P_i \setminus S_i$  та за властивостями групи розглядуваного типу справедливо, що  $\langle g \rangle \triangleleft G$ . Усі випадки розглянуті, достатність доведено.

Теорему доведено повністю.

**Теорема 2.** Нижче наведені властивості групи  $G$  рівносильні між собою:

- 1) у групі  $G$  нормальні всі періодичні підгрупи, які не містяться в деякій власній підгрупі  $S$  групи  $G$ ;
- 2) у групі  $G$  нормальні всі скінченні підгрупи, які не містяться в деякій власній підгрупі  $S$  групи  $G$ ;
- 3) у групі  $G$  нормальні всі скінченні циклічні підгрупи, що не містяться в деякій власній підгрупі  $S$  групи  $G$ ;
- 4)  $G$ — група одного з типів:
  - а) неединична група з періодичною частиною  $T(G)$ , де  $T(G)$ — квазіцентральна підгрупа групи  $G$ ;
  - б) неединична група з неквазіцентральною в  $G$  періодичною частиною  $T(G)$ , яку можна подати у вигляді  $T(G) = P \times H$ , де  $H$ — квазіцентральна холлівська підгрупа групи  $G$ ,  $P$ — силовська  $p$ -підгрупа групи  $G$ , що є  $H(S)$ -групою з сепаратором  $M \triangleleft P$ ,  $M \triangleleft G$  та для довільного елемента  $g \in P \setminus M$  виконується, що  $\langle g \rangle \triangleleft G$ ;
  - в) група, всі ненормальні примарні циклічні підгрупи якої породжують неединичну власну нормальну підгрупу  $K$  та всі неединичні підгрупи скінченного порядку належать  $K$ .

**Доведення.** Зрозуміло, що з властивості 1 випливає властивість 2, а з 2—3. Покажемо, що група, визначена властивістю 3, є групою одного з типів а—в властивості 4.

Якщо у групі  $G$  нормальні всі скінченні циклічні підгрупи, то  $G$ — група типу а властивості 4 теорему.

Нехай група  $G$  має ненормальні примарні циклічні підгрупи. Зрозуміло, що вони у групі  $G$  породжують власну неединичну нормальну підгрупу  $K$  та  $\langle g \rangle \triangleleft G$  для довільного елемента  $g \in G \setminus K$ . Якщо всі елементи скінченного порядку належать  $K$ , то  $G$ — група типу в властивості 4 теорему.

Нехай  $G \setminus K$  містить елементи скінченного порядку. Зрозуміло, що  $G$  задовольняє умову теореми 1 і може бути групою типів 1, 2 цієї теореми. За попереднім залишається розглянути випадок, коли  $G$ — група типу 2 вище згаданої теореми.

Очевидно, що  $G$ — недедекіндова група.

Припустимо, що  $G$ — періодична група. Тоді всі її циклічні підгрупи, що не містяться в  $S$ , є нормальними в групі  $G$  за умовою даної теореми та за лемою 1.4.1 роботи [2]  $G$  є  $H(S)$ -групою, яка збігається з періодичною частиною  $T(G)$  групи типу б властивості 4 даної теореми.

Нехай  $G$ — неперіодична група. У групі  $G$  типу 2 теореми 1 існує підгрупа  $D = A \cdot B$ , яка містить усі елементи скінченного порядку групи  $G$ , де  $A$ — група, що розкладається в прямий добуток своїх силовських  $p$ -підгруп  $P_i$ , кожна з  $P_i$ — це  $H(S)$ -група з сепаратором  $S_i$ . При цьому для довільного елемента  $g \in P_i \setminus S_i$  справедливо  $\langle g \rangle \triangleleft G$ ,  $B \triangleleft G$  і підгрупа  $B$  породжена деякою множиною ненормальних у  $G$  примарних циклічних підгруп,  $B \triangleleft D$ ,  $[A, B] = 1$ . Отже,  $G$  має неединичний сепаратор  $K$ , породжений всіма ненормальними скінченними циклічними підгрупами, та для довільної підгрупи  $\langle g \rangle \leq G \setminus K$  виконується, що  $\langle g \rangle \triangleleft G$ . Оскільки, всі скінченні елементи групи  $G$  належать  $D$ , то  $K \triangleleft D$ . Якщо всі елементи скінченного порядку належать  $K$ , то  $G$ — група типу в властивості 4 теорему.

Нехай  $G \setminus K$  містить елемент  $g$  скінченного порядку. Зрозуміло, що підгрупа  $A$  групи  $D$ , яка розкладається в прямий добуток своїх силовських підгруп  $P_i$  (де кожна  $P_i$ — це  $H(S)$ -група з сепаратором  $S_i$ ), не міститься в  $K$ . Позначимо  $S = A \cap K$ . Тоді  $S \triangleleft G$ ,  $S \triangleleft A$  і в  $G$  нормальна будь-яка скінченна підгрупа  $\langle g \rangle$  групи  $A$ , що не міститься в  $S$ .

Нехай  $b \in B$ ,  $|b| < \infty$ ,  $b$ —  $q$ -елемент для деякого простого числа  $q$ , що  $q \notin \pi(A)$ . Покажемо, що  $\langle b \rangle \triangleleft B$ . Дійсно, з властивостей підгрупи  $D$  випливає, що  $\pi(A) \cap \pi(B) = \emptyset$ ,  $[g, b] = 1$ ,  $\langle g, b \rangle = \langle x \rangle$ ,  $\langle b \rangle$ — холлівська підгрупа з  $\langle x \rangle$ . Зрозуміло, що  $x \notin K$ , а значить,  $\langle x \rangle \triangleleft G$ ,  $\langle b \rangle \triangleleft G$ . З цього випливає, що скінченна циклічна підгрупа групи  $B$  є нормальною підгрупою в  $G$ . За властивостями  $B$  маємо, що  $B = 1$ ,  $D = A = T(G)$ . За теоремою 1.4.2 роботи [4]  $T(G) = P \times H$ ,  $P$ —  $H(S)$ -група.

Якщо  $D$ — квазіцентральна підгрупа групи  $G$ , то  $G$ — група типу а властивості 4 теорему.

Нехай  $D$ — неквазіцентральна підгрупа  $G$ . Тоді  $1 < K < D$ . За теоремою 1.4.2 роботи [2]  $P$ — силовська  $p$ -підгрупа з  $D$  і  $H$ — її холлівське дедекіндове доповнення в  $D$ . При цьому  $P \not\subseteq K$  і  $K = H \rtimes M$ , де  $M = K \cap P$ . Зрозуміло, що  $M < P$ ,  $M \triangleleft G$  і в  $G$  нормальна всяка підгрупа  $X \leq P$ , що не міститься в  $M$ .

Нехай  $g \in P \setminus M$ ,  $h \in H$ . Тоді  $\langle g, h \rangle = \langle x \rangle$ , де  $\langle h \rangle$ — холлівська підгрупа з  $\langle x \rangle$  і  $x \notin K$ . За умовою  $\langle x \rangle \triangleleft G$  і, значить,  $\langle h \rangle \triangleleft G$ . Звідси,  $H$ — квазіцентральна підгрупа групи  $G$ , а  $G$ — група типу б властивості 4 теорему. Очевидно, що тоді  $D$ —  $H(S)$ -



група.

Отже, одержали, що з властивості 3 випливає властивість 4.

Покажемо далі, що з властивості 4 випливає властивість 1. Іншими словами, що група  $G$  одного з типів  $a$ – $b$  властивості 4 має таку власну підгрупу  $S$ , що в групі  $G$  нормальні всі власні періодичні підгрупи, якщо вони не містяться в  $S$ .

У групі  $G$  типу  $a$  властивості 4 можна вважати, що  $S=1$ .

У групі  $G$  типу  $b$  властивості 4 можна вважати, що  $S=K$ .

Нехай  $G$ – група типу  $b$  властивості 4. Покладемо  $S=M \times H$ . Тоді  $S$  належить періодичній частині  $T(G)$  групи  $G$ , яку можна подати у вигляді  $T(G)=P \times H$ . Нехай  $X$ – довільна періодична підгрупа групи  $G$ , яка не міститься в  $S$ . Покажемо, що  $X \triangleleft G$ . Дійсно,  $X=P_1 \times H_1$ , де  $P_1=X \cap P$ ,  $H_1=H \cap X$ . За властивостями групи  $G$  маємо, що  $H_1 \triangleleft G$ . Оскільки  $H_1 \leq S$ ,  $X \not\leq S$ ,  $P_1 \not\leq M$ , то зрозуміло, що  $P_1$  породжується такими елементами  $g$ , які не містяться в  $P \setminus M$ . За властивостями групи  $G$  типу  $b$  властивості 4  $\langle g \rangle \triangleleft G$ , а значить,  $P_1 \triangleleft G$ . Звідси  $X \triangleleft G$ . Отримали, що з властивості 4 випливає властивість 1.

Теорему доведено.

### 3 Висновки

Теорема 2 показує, що обмеження норма-

льності на різні системи періодичних підгруп групи  $G$ , які не містяться в деякій власній підгрупі  $S$  групи  $G$ , теж визначає один й той же клас груп. Цей клас груп значно вужчий від класу  $H(PC \setminus S)$ -груп. Кожен зі згаданих вище класів містить групу  $G=K \rtimes \langle x \rangle$ ,  $x$ – елемент нескінченного порядку, де  $K$ – нескінченна періодична проста неабелева група з циклічними власними підгрупами.

### Список використаних джерел

1. Баранник А.Ф. Обобщение метамгильтоновых групп // Исследование групп по заданным свойствам подгрупп: Сб.научн.тр.– К.: Ин-т математики АН УССР.– 1974.– С.167-198.
2. Кузенний М.Ф., Семко М.М. Метамгильтонові групи та їх узагальнення.– К.: Ін-т математики НАН України, 1996.–232 с.
3. Черников С.Н. Группы, имеющие сепарирующие подгруппы// Группы с заданными свойствами подгрупп: Сб.научн.тр.– К.: Ин-т математики АН УССР.– 1973.– С.6-14.

Надійшла до редколегії 15.12.2006



УДК 512.552

Макар В. Плахотник, аспірант

### Кільцеві нерівності для матриць Кириченка, цикловий тип яких складається з двох чисел

Описано вигляд кільцевих співвідношень для матриць Кириченка в термінах параметрів, введених таким чином, що дозволяє підрахувати їх кількість для випадку, коли відповідна перестановка є добутком двох циклів.

Ці співвідношення уточнено для випадку, коли довжини циклів взаємнопрості.

Ключові слова: горештейнова матриця, черетичні порядки, кільцеві нерівності.

E-mail: Makar\_plakhotnyk@ukr.net

#### 1. Вступ.

Нагадаємо, що напівдосконале напівпервинне нетерове справа кільце  $A$  називається напівмаксимальним, якщо кільця ендоморфізмів усіх нерозкладних проєктивних  $A$ -модулів є дискретно нормованими кільцями.

Відомо [2], що напівдосконале напівпервинне кільце  $A$  є напівмаксимальним тоді і лише тоді, коли воно ізоморфне скінченному прямому добутку первинних максимальних кілець вигляду  $\Lambda = (\pi^0, \mathcal{G})$ , де  $\mathcal{G}$  - дискретно нормоване кільце з простим елементом  $\pi$ , та  $A = (a_{ij})$  - цілочислова матриця з  $M_n(Z)$  (для деякого  $n$ ), для елементів якої виконується нерівність

$$a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} \geq 0 \quad (1)$$

для всіх  $i, j, k, 1 \leq i, j, k \leq n$ . Ця нерівність називається кільцевою, а матриця  $A$  називається матрицею показників. Первинне напівмаксимальне кільце також записують у вигляді  $(\mathcal{G}, A)$ .

Не обмежуючи загальності, можемо вважати, що перший рядок матриці  $A$  нульовий [4]. Помітимо, що якщо  $i = j = k$ , то з (1) випливає, що  $\forall i, a_{ii} \geq 0$ . Крім того, якщо розглянемо нерівність (1) для  $i = k$ , то отримаємо  $a_{ij} + a_{ji} \geq a_{ii} = 0$ . Напівдосконале кільце  $A$  з радикалом Джекобеона  $R$  називається зведеним, якщо фактор кільце  $A/R$  є прямим добутком тіл. Напівмаксимальне кільце є зведеним тоді і лише тоді, коли матриця  $A$  не має симетричних нулів.

Якщо для зведеної матриці показників існує така перестановка  $\sigma$  множини  $\{1, 2, \dots, n\}$  без

Makar.V. Plakhotnyk, PhD student

### Ring inequalities for Kirichenko matrices, whose cyclic type consists of two numbers

Ring inequalities for Kirichenko matrix, whose correspond permutation consists of two cycles in terms of parameters, which make possible to count the number of independent parameters have been described.

These inequalities are specified for the case when lengths of cycles are mutually prime.

Key Words: Gorenstein matrix, tiled orders, ring inequalities.

нерухомих елементів, то  $a_{ij} + a_{j\sigma(i)} = a_{i\sigma(i)}$  для всіх  $i, j, 1 \leq i, j \leq n$ , то ця матриця називається горештейнковою, а відповідні співвідношення називаються горештейновими.

Напівмаксимальне кільце  $(\mathcal{G}, A)$  називається горештейновим, якщо воно є бієктивним модулем [3].

В роботі [3] вперше доведено, що зведене напівмаксимальне первинне кільце є горештейновим тоді лише тоді, коли матриця  $A$  є горештейнковою.

Цілочислова матриця з нульовим першим рядком, для якої виконуються горештейнові співвідношення, називається матрицею Кириченка.

В роботі [5] для кожної матриці Кириченка вибрано множину параметрів, через які виражено всі елементи матриці, та знайдено співвідношення між цими параметрами, що дозволяють підрахувати розмірність простору матриць Кириченка.

Втім, отримані в [5] формули не дозволяють легко відповісти на питання про виконання чи невиконання кільцевих нерівностей. Відомо [1], що якщо перестановка є циклічною, то невід'ємності параметрів достатньо для виконання кільцевих нерівностей. В цій статті ми розглядаємо кільцеві нерівності для матриць Кириченка, відповідна перестановка якої розкладається в добуток двох циклів.

Нашою метою є зрозуміти, на скільки складші вирази утворюються при підстановці елементів Матриць, виражених через параметри, у нерівності (1).



## 2. Основна частина.

Нехай перестановка є добутком двох циклів і має вигляд  $\sigma = (1, 2, \dots, n_1)(n_1 + 1, \dots, n)$ , де  $2n_1 \leq n$ . Введемо параметри  $x_k = a_{k,1}$  для кожного  $k$ ,  $2 \leq k \leq n$  та  $z_p = a_{n_1+1,p}$  для кожного  $p$ ,  $n_1 + 2 \leq p \leq n$ . Змінні  $x_k$  та  $z_p$  називатимемо параметрами. Згідно з [5], виконання горенштейнових рівностей рівносильно виконанню рівностей (2 – 19), які подані нижче:

$$a_{2,n_1+1} = x_n \text{ та } a_{2,k} = x_{k-1} \text{ при } k \neq n_1 + 1; \quad (2)$$

Для кожного  $m$ ,  $3 \leq m \leq n_1$ , та кожного  $k$ ,  $m + 1 \leq k \leq n_1$  мають місце співвідношення (3 – 14):

$$a_{n_1+1,m} = \sum_{i=2}^{m-1} x_i - \sum_{i=0}^{m-3} x_{n-i} \quad (3)$$

$$a_{k,m} = \sum_{i=1}^{m-1} x_i - \sum_{i=0}^{l-1} x_{k-i} - \sum_{i=0}^{m-l-2} x_{n-i}, \text{ при } k = n_1 + l, \quad 2 \leq l \leq m-2; \quad (4)$$

$$a_{k,m} = \sum_{i=2}^{m-1} x_i - \sum_{i=1}^{m-2} x_{k-i}, \text{ при } n_1 + m < k, \text{ або } m < k \leq n_1; \quad (5)$$

$$a_{m,n_1+1} = \sum_{i=0}^{m-2} x_{n-i} - \sum_{i=2}^{m-1} x_i \quad (6)$$

$$a_{k,m} = \sum_{i=1}^{m-1} x_i - \sum_{i=0}^{l-1} x_{k-i} = \sum_{i=0}^{m-l-2} x_{n-i} \text{ при } k = n_1 + l, \quad 2 \leq l \leq m-1; \quad (7)$$

$$a_{m,k} = \sum_{i=1}^{m-1} x_{k-i} - \sum_{i=2}^{m-1} x_i, \text{ при } n_1 + m \leq k, \text{ або } m < k \leq n_1; \quad (8)$$

Випишуючи співвідношення для решти елементів матриці  $A$ , позначатимемо через  $k$  індекс більшої координати. При цьому для всіх  $m$ ,  $3 \leq m \leq n - n_1$  мають місце співвідношення (9 – 14):

$$a_{n_1+1,k} = z_k \quad (9)$$

$$a_{k,n_1+1} = \begin{cases} x_k & \text{якщо } k = n \\ x_k - z_{k+1} & \text{якщо } n_1 + 1 < k < n \end{cases} \quad (10)$$

$$a_{k,n_1+2} = x_{n_1+1} - z_k \quad (11)$$

$$a_{n_1+2,k} = x_{k-1} - x_{n_1+1} + z_{k-1} \quad (12)$$

$$a_{k,n_1+m} = -z_{k-m+2} + \sum_{i=1}^{m-1} x_{n_1+i} - \sum_{i=1}^{m-2} x_{k-i} \quad (13)$$

$$a_{n_1+m,k} = z_{k-m+1} - \sum_{i=1}^{m-1} x_{n_1+i} + \sum_{i=1}^{m-1} x_{k-i} \quad (14)$$

Для довільного  $m$ ,  $1 \leq m \leq n_1 - 1$ , мають місце рівності (15):

$$x_{n_1+1} = x_{n_1-m+1} \quad (15)$$

$$x_{n_1+1} + \sum_{i=0}^{n_1-2} x_{n-i} = \sum_{i=2}^{n_1} x_i \quad (16)$$

$$\begin{cases} x_{n_1+p} = x_{n-n_1+p} & \text{якщо } 1 \leq p \leq n_1 \\ x_{n_1+p} = x_p & \text{якщо } n_1 < p \leq n - n_1 \end{cases} \quad (17)$$

$$z_{n_1+2} = x_{n_1+1} \quad (18)$$

Для кожного  $m$ ,  $2 \leq m \leq n - n_1 - 1$ , має місце рівність (19):

$$\sum_{i=1}^m x_{n_1+i} - \sum_{i=0}^{m-2} x_{n-i} = z_{n-m+2} + z_{n_1+m+1} \quad (19)$$

Наступна теорема містить вичерпний список співвідношень, накладених на параметри кільцевими нерівностями.

**Теорема 1.** Нехай для горенштейнкової матриці  $A$  з перестановкою Кириченка  $\sigma$  виконуються нерівності (1) для всіх можливих індексів. Нехай  $i \in [3, n_1]$ . Тоді для елементів цієї матриці виконуються нерівності

$$a_{i,k} \geq 0 \text{ для всіх } i, k \quad (20)$$

$$\sum_{i=1}^{l-1} x_{n-i+l+1-i} + z_{n_1+l} - \sum_{i=1}^{l-1} x_{n_1+i} = f(i, l) \geq 0 \text{ для } l \in [2, i-1]. \quad (21)$$

$$\sum_{i=0}^{l-2} x_{n-i} + z_{n_1+l} - \sum_{i=l-i+1}^{l-1} x_{n_1+i} = g(i, l) \geq 0 \text{ для } l \in [i, n - n_1] \quad (22)$$

$$z_{n_1+s+1} - \sum_{i=1}^l x_{n_1+i} + \sum_{i=s+1}^{l+s} x_{n_1+i} = h(l, s) \geq 0 \text{ для } l \in [1, n - n_1], s \in [1, n - n_1 - l]; \quad (23)$$

$$\sum_{i=1}^l x_{n_1+i} - z_{n_1+l+1} - \sum_{i=1}^{l-1} x_{n-i+l+1-i} = f_2(i, l) \geq 0 \text{ для } l \in [2, i-1] \text{ та } i \in [3, n_1] \quad (24)$$

$$\sum_{i=l-i+1}^l x_{n_1+i} - z_{n_1+l+1} - \sum_{i=0}^{l-2} x_{n-i} = g_2(i, l) \geq 0 \text{ для } l \in [i, n - n_1] \quad (25)$$

$$\sum_{i=1}^l x_{n_1+i} - z_{n_1+s+2} - \sum_{i=s+2}^{l+s} x_{n_1+i} = h_2(l, s) \geq 0 \text{ для } l \in [1, n - n_1], s \in [1, n - n_1 - l]; \quad (26)$$

$$z_{n_1+l} + z_{n_1+l+2} + \sum_{i=1}^{l-1} x_{n_1+i} - \sum_{i=1}^{l-1} x_{n_1+l+s+1-i} - z_{n_1+l+s} = \tilde{f}(l, s) \geq 0, l \in [3, n - n_1]; s \in [1, n - n_1 - l] \quad (27)$$



$$\begin{aligned} z_{n_1+l+s} - z_{n_1+l+2} + \sum_{t=1}^{l-1} x_{n_1+t} - \sum_{t=1}^{l-2} x_{n_1+l+s-1} - z_{n_1+l} = \\ =: \tilde{g}(l, s) \geq 0, \quad l \in [3, n - n_1]; s \in [1, n - n_1 - l] \quad (28) \end{aligned}$$

Доведення.

1. Розглянемо нерівність (1) для  $i=1$  та отримаємо  $a_{1,j} + a_{j,k} \geq a_{1,k}$ , що в силу того, що перший рядок матриці  $A$  нульовий, дає (20).

2. Нехай  $i \in [3, n_1]$ , та  $j = n_1 + 1$ . Тоді згідно з (6)  $a_{i,j} = a_{i,n_1+1} = \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t$  та згідно з (9)

$$\begin{aligned} a_{j,k} = a_{n_1+1,k} = z_k. \quad \text{Нехай} \quad k = n_1 + l \quad \text{для} \\ l \in [2, i-1]. \quad \text{Тоді згідно (7)} \quad a_{i,k} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-t} + \\ + \sum_{t=0}^{i-j-1} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t. \quad \text{В цьому разі} \quad a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = \\ = \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t + z_k - \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-t} - \sum_{t=0}^{i-j-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=2}^{i-1} x_t = \\ = \sum_{t=1+l}^{i-2} x_{n_1+t} + z_k - \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-t} = \sum_{t=i-l}^{i-2} x_{n_1+l+1-t} + z_{n_1+l} - \\ - \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+t} = f(i, l) \geq 0, \quad \text{звідси випливає (21).} \end{aligned}$$

3. Нехай  $i \in [3, n_1]$ , та  $j = n_1 + 1$ . Тоді згідно з (6)  $a_{ij} = a_{i,n_1+1} = \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t$  та згідно з (9)

$$\begin{aligned} a_{j,k} = a_{n_1+1,k} = z_k. \quad \text{Нехай} \quad k = n_1 + l \quad \text{для} \\ l \in [i, n - n_1]. \quad \text{Тоді згідно з (8)} \quad a_{i,k} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-t} - \\ - \sum_{t=2}^{i-1} x_t. \quad \text{В цьому разі} \quad a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} - \\ - \sum_{t=2}^{i-1} x_t + z_k - \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-t} + \sum_{t=2}^{i-1} x_t = \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} + z_{n_1+l} - \\ - \sum_{t=i-l+1}^{i-1} x_{n_1+t} = g(i, l) \geq 0, \quad \text{і звідси випливає} \\ \text{нерівність (22).} \end{aligned}$$

4. Нехай  $i \in [3, n_1]$ ;  $j = n_1 + l$ ,  $l \in (i, n - n_1)$  та  $k = n_1 + l + s$ ,  $s \in [1, n - n_1 - l]$ . Тоді згідно з

$$(8) \quad a_{i,j} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{j-t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t, \quad \text{також згідно з (14)}$$

$$a_{i,k} = z_{k-j+1} = - \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-j+t} \quad \text{та згідно з (8)}$$

$$\begin{aligned} a_{jk} = \sum_{t=1}^{j-1} x_{k-t} - \sum_{t=2}^{j-1} x_t. \quad \text{В цьому разі} \quad a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = \\ = \sum_{t=0}^{i-1} x_{j-t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t + z_{k-j+1} - \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=1}^{i-1} x_{k-t} - \\ - \sum_{t=1}^{j-1} x_{k-t} + \sum_{t=2}^{j-1} x_t = z_{n_1+s+1} - \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=i+s+1}^{i-1} x_{n_1+t} = \\ = h(i-l, s), \quad \text{і звідси випливає нерівність (23).} \end{aligned}$$

5. Нехай  $i \in [3, n_1]$ , та  $k = n_1 + 1$ . Тоді згідно з (6),  $a_{jk} = \sum_{t=0}^{j-2} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{j-1} x_t$ . Нехай  $j = n_1 + l$  для  $l \in [2, i-1]$ . Оскільки  $j < n$ , то згідно з (10)

$$\begin{aligned} a_{ik} = x_i - z_{j+1}. \quad \text{Також згідно з (7)} \quad a_{ij} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{i-t} + \\ + \sum_{t=0}^{i-j-1} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t. \quad \text{В цьому разі} \quad a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = \\ = \sum_{t=1}^{i-1} x_{i-t} + \sum_{t=0}^{i-j-1} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t + x_j - z_{j+1} - \left( \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} - \right. \\ \left. - \sum_{t=2}^{i-1} x_t \right) = \sum_{t=1}^{i-1} x_{i-t} + x_j - z_{j+1} - \sum_{t=i+1}^{i-2} x_{n_1+t} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+t} - \\ - z_{n_1+l+1} - \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+l+1-t} = f_2(i, l) \geq 0 \quad \text{і звідси} \\ \text{випливає нерівність (24).} \end{aligned}$$

6. Нехай  $i \in [3, n_1]$ , та  $k = n_1 + 1$ . Тоді згідно з (6)  $a_{jk} = \sum_{t=0}^{j-2} x_{n_1+t} - \sum_{t=2}^{j-1} x_t$ . Нехай  $j = n_1 + l$  для  $l \in [i, n - n_1]$ . Оскільки  $j < n$ , то згідно з (10)

$$\begin{aligned} a_{ik} = x_i - z_{j+1}. \quad \text{Також згідно з (8)} \quad a_{ij} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{i-t} - \\ - \sum_{t=2}^{i-1} x_t. \quad \text{В цьому разі} \quad a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = \\ = \sum_{t=0}^{i-1} x_{j-t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t + x_j - z_{j+1} - \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} + \sum_{t=2}^{i-1} x_t = \\ = \sum_{t=i-s+1}^{i-1} x_{n_1+t} - z_{n_1+s+1} - \sum_{t=0}^{i-2} x_{n_1+t} = g_2(i, l) \geq 0, \quad \text{і} \\ \text{звідси випливає нерівність (25).} \end{aligned}$$

7. Нехай  $i \in [3, n_1]$ ,  $k = n_1 + l$  для  $l \in (i+1, n - n_1)$  та  $j = n_1 + l + s$ . Тоді згідно з (8)



$$a_{ij} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{j-t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t \text{ та } a_{jk} = \sum_{t=1}^{j-1} x_{k-t} - \sum_{t=2}^{j-1} x_t. \text{ Також}$$

$$\text{згідно з (13)} \quad a_{jk} = \sum_{t=1}^{j-1} x_{n_1+t} - z_{j-t+2} - \sum_{t=1}^{j-1} x_{j-t}. \text{ В}$$

$$\text{цьому разі} \quad a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = \sum_{t=1}^{i-1} x_{j-t} - \sum_{t=2}^{i-1} x_t +$$

$$+ \sum_{t=1}^{j-1} x_{n_1+t} - z_{j-t+2} - \sum_{t=1}^{j-1} x_{j-t} - \sum_{t=1}^{k-1} x_{k-t} + \sum_{t=2}^{k-1} x_t =$$

$$= \sum_{t=1}^{i-1} x_{n_1+t} - z_{j-t+2} + \sum_{t=i+2}^{(i-1)+j} x_{n_1+t} = h_2(l-i, s) \geq 0,$$

і звідси випливає нерівність (26).

8. Розглянемо нерівність (1) для  $i \in [3, n_1]$ ,  $j = n_1 + l$ ,  $l \in [3, n - n_1]$  та  $k = n_1 + l + s$ ,  $s \in [1, n - n_1 - l]$ . Згідно з (14),  $a_{jk} = z_{k-l+1} -$

$$- \sum_{t=1}^{j-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=1}^{j-1} x_{k-t}. \text{ В цьому разі } a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} =$$

$$= z_{n_1+l} + z_{n_1+l+1} - \sum_{t=1}^{j-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=1}^{j-1} x_{k-t} - z_{n_1+l+s} = z_{n_1+l} +$$

$$+ z_{n_1+l+1} - \sum_{t=1}^{j-1} x_{n_1+t} + \sum_{t=1}^{j-1} x_{n_1+l+s-t} = \tilde{f}(l, s), \text{ звідки ви-}$$

пливає нерівність (27).

9. Розглянемо нерівність (1) для  $i = n_1 + 1$ ,  $k = n_1 + l$ ,  $l \in [3, n - n_1]$  та  $n_1 + l + s$ ,  $s \in [1, n - n_1 - l]$ . За умовою (9),  $a_{ij} = a_{n_1+1, n_1+l+s} = z_{n_1+l+s}$  та  $a_{jk} = z_{n_1+l}$ . Крім того

$$\text{згідно з (13)} \quad a_{jk} = a_{n_1+l, n_1+l+s} = -z_{l-l+2} + \sum_{t=1}^{l-1} x_{n_1+t} -$$

$$- \sum_{t=1}^{l-1} x_{l-t}. \text{ В цьому разі } a_{ij} + a_{jk} - a_{ik} = z_{n_1+l+s} -$$

$$- z_{n_1+l+2} + \sum_{t=1}^{l-1} x_{n_1+t} - \sum_{t=1}^{l-1} x_{n_1+l-s-t} - z_{n_1+l} = \tilde{g}(l, s),$$

$$\text{звідки випливає (28).}$$

*Лема доведена.*

Головним результатом роботи є те що наведені необхідні умови того, що для матриці Кириченка виконуються кільцеві нерівності, є також достатніми. Доведення цього факту цілком аналогічне доведенню доведеної теореми, і полягає в тому, щоб для всіх трійок чисел  $i, j, k$  скористатись формулами (2 – 14), виписати і підставити в ліву частину нерівності (1) потрібні вирази, а потім спростити отриманий вираз до лівої частини однієї з нерівностей (20 – 28).

Тому ми не наводитимемо доведення потрібних тверджень, а лише вкажемо, які з нерів-

ностей (20 – 28) використовуються для доведення невід'ємності правої частини нерівності (1) для різних інтервалів для чисел  $i, j, k$ .

**Лема 1.** Нехай  $A$  – матриця Кириченка. Якщо серед чисел  $i, j, k$  є однакові, то нерівності (1) є наслідками нерівностей (20).

Надалі в формулюваннях лем вважатимемо, що числа  $i, j, k$  є різними.

**Лема 2.** Нехай  $A$  – матриця Кириченка, для якої виконуються нерівності (20). Тоді для всіх чисел  $i, j, k$ , для яких  $\min\{i, j, k\} \leq 2$ , виконуються нерівності (1).

**Лема 3.** Нехай  $A$  – матриця Кириченка, для якої виконуються нерівності (20). Тоді для всіх  $i, j, k$ , для яких  $\{i, j, k\} \subset [3, n_1]$  виконуються нерівності (1). [1]

**Лема 4.** Нехай  $A$  – матриця Кириченка, для якої виконуються нерівності (20). Тоді для всіх чисел  $i, j, k$ , два з яких належать до множини  $[3, n_1]$ , а третє – до множини  $[n_1 + 1, n]$ , виконуються нерівності (1).

**Лема 5.** Нехай  $A$  – матриця Кириченка, для якої виконуються нерівності (20 – 26). Тоді для всіх  $i, j, k$ , одне з яких належить до множини  $[3, n_1]$ , а два інші – до множини  $[n_1 + 1, n]$ , виконуються нерівності (1).

**Лема 6.** Нехай  $A$  – матриця Кириченка, для якої виконуються нерівності (20, 27 – 28). Тоді для всіх  $i, j, k \subset [n_1 + 1, n]$  (1).

### 3. Взаємнопрості довжини циклів

Зауважимо, що якщо довжини циклів перестановки  $\sigma$  взаємнопрості, то згідно з (17)  $x_{n_1+1} = x_{n_1+2} = \dots = x_n$ . Позначимо  $x_{n_1+1} = y$ . Тоді рівності (10)–(19) переписуються у вигляді

$$a_{k, n_1+1} = \begin{cases} y & \text{якщо } k = n \\ y - z_{k+1} & \text{якщо } n_1 + 1 < k < n \end{cases} \quad (10^*)$$

$$a_{k, n_1+2} = y - z_k \quad (11^*)$$

$$a_{n_1+2, k} = z_{k-1} \quad (12^*)$$

$$a_{k, n_1+m} = y - z_{k-m+2} \quad (13^*)$$

$$a_{n_1+m, k} = z_{k-m+1} \quad (14^*)$$

$$x_{m+1} = x_{n_1-m+1} \quad (15^*)$$

$$y \cdot n_1 = \sum_{i=2}^{n_1} x_i \quad (16^*)$$

$$0 = 0 \quad (17^*)$$

$$z_{n_1+2} = y \quad (18^*)$$



$$y = z_{n-m+2} + z_{n_1+m+1} \quad (19')$$

Нерівності (21 – 28) набувають вигляду

$$z_{n_1+l} \geq 0 \text{ для } l \in [2, i-1]. \quad (21')$$

$$z_{n_1+l} \geq 0 \text{ для } l \in [i, n-n_1] \quad (22')$$

$$z_{n_1+s+1} \geq 0 \text{ для } l+s \in [2, n-n_1]; \quad (23')$$

$$y - z_{n_1+l+1} \geq 0 \text{ для } l \in [2, n_1-1] \quad (24')$$

$$y - z_{n_1+l+1} \geq 0 \text{ для } l \in [i, n-n_1] \quad (25')$$

$$y - z_{n_1+s+2} \geq 0 \text{ для } s \in [1, n-n_1-1]; \quad (26')$$

$$z_{n_1+l} + z_{n_1+s+2} - z_{n_1+l+s} \geq 0, \\ l \in [3, n-n_1]; s \in [1, n-n_1-l] \quad (27')$$

$$z_{n_1+l+s} - z_{n_1+s+2} + y - z_{n_1+l} \geq 0, \\ l \in [3, n-n_1]; s \in [1, n-n_1-l] \quad (28')$$

Бачимо, що нерівності (21' – 26') випливають зі співвідношення (12') і умови невід'ємності елементів матриці. Крім того бачимо, що для перестановки, що є добутком двох взаємнопростих циклів, нетривіальних наслідків з кільцевих нерівностей не буде лише для циклових типів (2, 3), та (3, 4).

# Список використаних джерел

1. Журавльов В.М., Черноусова Ж.Т Циклічні Горенштейнові порядки з малим числом вершин // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки.– 2002.– №2. – С.33–40.
2. Завадский А.Г., Кириченко В.В, Модули без кручения над первичными кольцами // Зап. науч. Семинаров Ленингр. отд. Мат. инст АН СССР, 1976, – 57, с. 100-116.
3. Кириченко В.В. О квазифробениусовых кольцах и горенштейновых порядках, Тр. Мат. ин-та, АН СССР, 1978, – 148, с. 168-174.
4. Dokuchaev M.A., Kirichenko V.V., Zelensky A.V., Zhuravlev V.N. Gorenstein Matrices // Algebra and diskrete mathematics №1, Jan/Mar 2005. – P. 8-29
5. Plakhotnyk M. On the dimension of Kirichenko space. // Algebra and Discrete mathematics №2, 2006. – P. 87-126

Надійшла до редколегії 01.03.2007



УДК 519.2

Антон Ю. Рижов, асистент

### Інтервальна оцінка ймовірності виживання для компонент суміші.

Розглянуто застосування адаптивних оцінок функцій розподілу компонент суміші зі змінними концентраціями до побудови довірчих інтервалів для невідомих ймовірностей виживання. Наведено приклад для суміші з експоненційно розподіленими компонентами.

Ключові слова: аналіз виживання, цензурування, суміші зі змінними концентраціями, оцінка Каплана-Мєєра.

E-mail: ryzhov@univ.kiev.ua

Однією з основних задач аналізу виживання є отримання оцінок для значень ймовірностей виживання, як точкових, так і за допомогою довірчих інтервалів. Якщо прийнято певну параметричну модель, наприклад, що моменти відмови приладів у вибірці є експоненційно розподіленими, то можна використати модифікований метод максимуму вірогідності для оцінки параметрів розподілу. Цей метод дозволяє враховувати наявність у вибірці цензурованих спостережень [1].

У непараметричному випадку найпоширенішою оцінкою для ймовірностей виживання є оцінка Каплана-Мєєра [5]. За відсутності цензурування ця оцінка збігається з емпіричною функцією розподілу. Користуючись оцінками Каплана-Мєєра функції виживання  $S(t) = P\{X > t\}, t \geq 0$  випадкової величини  $X$  (наприклад, тривалості життя пацієнта, моменту відмови приладу тощо), можна, зокрема, перевіряти гіпотези типу  $H_0: S(t_*) = p_*$  для обраних  $t_* \geq 0$  та  $0 \leq p_* \leq 1$ . Огляд основних результатів з цієї проблеми наведено в [4].

В даній роботі розглядається питання про побудову довірчих інтервалів для невідомих ймовірностей виживання у випадку коли спостереження утворені відбором з сумішей зі змінними концентраціями [2,3]. Припустимо, що є  $m$  популяцій (компонент сумішей) з функціями розподілу моменту відмови  $G_1(t), \dots, G_m(t), t \geq 0$  відповідно. Спостерігається  $N \geq m$  вибірок, причому кожна вибірка є сумішшю об'єктів з розглядуваних популяцій. Для вибірок задано послідовності величин  $\{w_l^{(j)}, l = 1, \dots, m\}, j = 1, \dots, N$ , де  $w_l^{(j)}$  позначає ймовірність того, що об'єкт з  $j$ -ї

Anton Yu. Ryzhov, Assistant Professor

### Interval estimator of the survival probability of mixture's components.

We study application of adaptive estimators of the component's distribution function to construct confidence bands for unknown survival probabilities. An example of mixtures with varying concentrations and exponentially distributed components is considered.

Key Words: survival analysis, censoring, mixtures with varying concentrations, Kaplan-Meier estimator.

вибірки належить до  $l$ -ї популяції, тобто задано значення концентрацій компонент у сумішах. В результаті функція розподілу часу життя об'єктів з  $j$ -ї вибірки має вигляд

$$F_j(t) = w_1^{(j)}G_1(t) + \dots + w_m^{(j)}G_m(t), \quad (1)$$

причому  $\sum_{l=1}^m w_l^{(j)} = 1, 0 \leq w_l^{(j)} \leq 1$ . Суміші такого типу називаються сумішами зі змінними концентраціями. За допомогою адаптивних оцінок для функцій  $G_1(t), \dots, G_m(t), t \geq 0$  на основі цензурованих вибірок з сумішей знаходяться довірчі інтервали для величини  $G_l^*(t) = 1 - G_l(t), l = 1, \dots, m$ . Отримані результати застосовано до перевірки гіпотези  $H_0: G_l^*(t_*) = p_*$  для фіксованого  $l = 1, \dots, m$  і різних (наперед заданих) значень  $t_*$  та  $p_*$ .

### Основні визначення та результати

Нехай обсяг  $j$ -ї вибірки є  $n_j$ , послідовність незалежних однаково розподілених випадкових величин  $x_{1j}, \dots, x_{n_jj}$  позначає моменти відмови об'єктів з  $j$ -ї вибірки, а послідовність н.о.р.в.  $y_{1j}, \dots, y_{n_jj}$  – відповідні моменти (можливого) цензурування. При цьому для фіксованого  $j$  всі величини  $x_{ij}$  мають розподіл (1), а моменти цензурування розподілені з функцією розподілу  $C_j(t), t \geq 0$ . Спостереження у вибірці являють собою послідовності впорядкованих пар  $\{(t_{ij}, \delta_{ij}), i = 1, \dots, n_j\}$ , де  $t_{ij} = \min(x_{ij}, y_{ij})$  і



$\delta_{ij} = 1(t_{ij} = x_{ij})$  – індикатор того, що спостерігалася відмова  $i$ -го об'єкта. Нехай  $r_j$  позначає кількість різних моментів відмови, впорядкованих за зростанням:  $t_{(1,j)} < \dots < t_{(r_j,j)}$ . Тоді оцінкою Каплана-Меєра функції виживання  $S_j(t) = 1 - F_j(t)$  є величина

$$\hat{S}_j(t) = \prod_{t_{(ij)} \leq t} \frac{l_{ij} - d_{ij}}{l_{ij}}, \quad 0 \leq t \leq \max_i \{t_{ij}\}$$

Тут  $l_{ij}$  позначає кількість об'єктів, що не відмовили до моменту  $t_{(ij)}$  включно,  $d_{ij}$  – кількість об'єктів, що відмовили в момент  $t_{(ij)}$ . За допомогою оцінок Каплана-Меєра визначаються адаптивні оцінки функцій  $G_j(t), t \geq 0$  у вигляді

$$\hat{G}_j(t) = \hat{G}_j(t, \hat{a}^{(j)}(t)) = \sum_{j=1}^N \hat{a}_j^{(j)}(t) \hat{F}_j(t),$$

де  $\hat{F}_j(t) = 1 - \hat{S}_j(t)$ ,  $\hat{a}^{(j)}(t) = (\hat{a}_1^{(j)}(t), \dots, \hat{a}_N^{(j)}(t))^T$  – вектор (випадкових) адаптивних вагових коефіцієнтів, які обчислюються наступним чином. Припустимо, що виконуються умови:

а) величини  $x_{ij}$  та  $y_{ij}$  є незалежними в сукупності;

б) для всіх  $j$  функції  $F_j(t)$  та  $C_j(t)$  є неперервними і існують границі  $\frac{n_j}{n} \rightarrow h_j > 0, n \rightarrow \infty$ ,

де  $n = n_1 + \dots + n_m$  – загальний обсяг вибірок;

в) стовпчики матриці

$$X = \begin{pmatrix} w_1^{(1)} & \dots & w_m^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_1^{(N)} & \dots & w_m^{(N)} \end{pmatrix}$$

є лінійно незалежними.

Позначимо  $\hat{\varphi}_j(t) = n_j \sum_{t_{(ij)} \leq t} \frac{d_{ij}}{l_{ij}(l_{ij} - d_{ij})}$  та

$$\hat{Q}(t) = \text{diag} \left( \frac{h_1}{\hat{S}_1^2(t) \hat{v}_1(t)}, \dots, \frac{h_N}{\hat{S}_N^2(t) \hat{v}_N(t)} \right) - \text{діагональна матриця. Тоді [3] вектор } \hat{a}^{(j)}(t) \text{ знаходиться як } j\text{-ий стовпчик матриці}$$

$$\bar{A}(t) = \left( \hat{Q}(t) X (X^T \hat{Q}(t) X)^{-1} \right)^T$$

і адаптивні оцінки визначені на скінченному проміжку  $[0, \tau]$ , де

$$\tau \in \Pi = \left\{ t \geq 0 : \prod_{j=1}^N (1 - F_j(t))(1 - C_j(t)) > 0 \right\}$$

– деяке (фіксоване) число.

Зауваження. Вважимо  $\hat{G}_j(t) \equiv 1$  для тих  $t$ , що задовольняють умову  $0 \leq t < \min(t_{(11)}, \dots, t_{(1,N)})$ , оскільки тоді існує таке  $j$ , що  $\hat{v}_j(t) = 0$ .

Для всіх  $l = 1, \dots, m$  позначимо

$$\hat{s}_l^2(t) = \sum_{j=1}^N \left( \hat{S}_j(t) \hat{a}_l^{(j)}(t) \right)^2 \hat{v}_j(t)$$

**Теорема.** Нехай виконуються умови а)-в). Тоді для кожного  $t \in (0, \tau]$  має місце збіжність

$$\left( \hat{s}_l^2(t)/n \right)^{1/2} \left( \hat{G}_l(t) - G_l(t) \right) \Rightarrow N(0,1), n \rightarrow \infty$$

**Доведення.** За теоремою 3 [3] випадкова величина  $\sqrt{n}(\hat{G}_l(t) - G_l(t)), t \in [0, \tau]$  є асимптотично нормальною з середнім 0 та дисперсією

$$\sigma_l^2(t, \bar{a}^{(l)}(t)) = \sum_{j=1}^N \left( (1 - F_j(t)) \hat{a}_l^{(j)}(t) \right)^2 v_j(t),$$

де

$$v_j(t) = \int_0^1 (1 - F_j(t))^2 (1 - C_j(t))^{-1} dF_j(t)$$

і вектор вагових коефіцієнтів  $\bar{a}^{(l)}(t) = (\bar{a}_1^{(l)}(t), \dots, \bar{a}_N^{(l)}(t))^T$  такий, що значення  $\sigma_l^2(t, \bar{a}^{(l)}(t))$  є найменшим серед усіх можливих наборів вагових коефіцієнтів. При цьому показано, що  $\hat{s}_l^2(t) \rightarrow \sigma_l^2(t, \bar{a}^{(l)}(t)), n \rightarrow \infty$  за ймовірністю. Звідси випливає твердження теореми.  $\square$

З теореми випливає, що для фіксованого  $t_* \in (0, \tau]$  нерівність

$$\hat{G}_l(t_*) - z_{\alpha/2} \left( \hat{s}_l^2(t_*)/n \right)^{1/2} < G_l(t_*) < \hat{G}_l(t_*) + z_{\alpha/2} \left( \hat{s}_l^2(t_*)/n \right)^{1/2}$$

де  $z_{\alpha/2}$  – квантиль рівня  $1 - \alpha/2$  стандартного нормального розподілу, задає довірчий інтервал для величини  $G_l(t_*)$  з довірчою ймовірністю  $1 - \alpha$ . Довірчий інтервал для ймовірності виживання  $G_l^*(t_*) = 1 - G_l(t_*)$  знаходиться аналогічно.

**Приклад.** Розглянемо застосування отриманих результатів до перевірки гіпотези  $H_0: G_l^*(t_*) = p_*$  для фіксованого  $l = 1, \dots, m$  і різних (наперед заданих) значень  $t_*$  та  $p_*$ . Без обмеження загаль-



ності покладемо  $I = 1$ .

Моделювання проводилося для суміші зі змінними концентраціями з двох компонент ( $m = 2$ ): моменти відмови для першої компоненти суміші мали експоненційний розподіл з параметром  $\lambda_1 = 0.1$ , для другої – з параметром  $\lambda_2 = 0.05$ . На кожному кроці розглядалося  $N = 9$  вибірок зі значеннями концентрацій для першої компоненти  $w_1 = 0.1, \dots, w_9 = 0.9$  відповідно. Моменти цензурування вважалися розподіленими експоненційно з параметром  $\lambda_3 = 0.02$  для всіх 9 вибірок. Кожна вибірка складалася з  $n_1 = \dots = n_9 = 500$  спостережень.

Критерій перевірки гіпотези  $H_0: G_1^*(t_*) = p_*$  мав наступний вигляд: гіпотеза  $H_0$  відхиляється якщо

$$\hat{G}_1^*(t_*) \notin \left\{ p_* \pm z_{\alpha/2} \left( \hat{s}_1^2(t_*) / n \right)^{1/2} \right\}.$$

На рис.1 наведено оцінки величини помилки I роду в результаті 5000 моделювань для значень  $p_*$  від 0.1 до 0.9, які змінювалися з кроком 0.05; відповідне значення  $t_*$  знаходилося з рівності  $G_1^*(t_*) = p_*$ . Пунктирними лініями зображено діапазон  $\alpha = 0.05 \pm 0.006$ , де з ймовірністю 95% повинно знаходитися спостережуване значення помилки I роду, якщо її справжнє значення дорівнює 0.05.

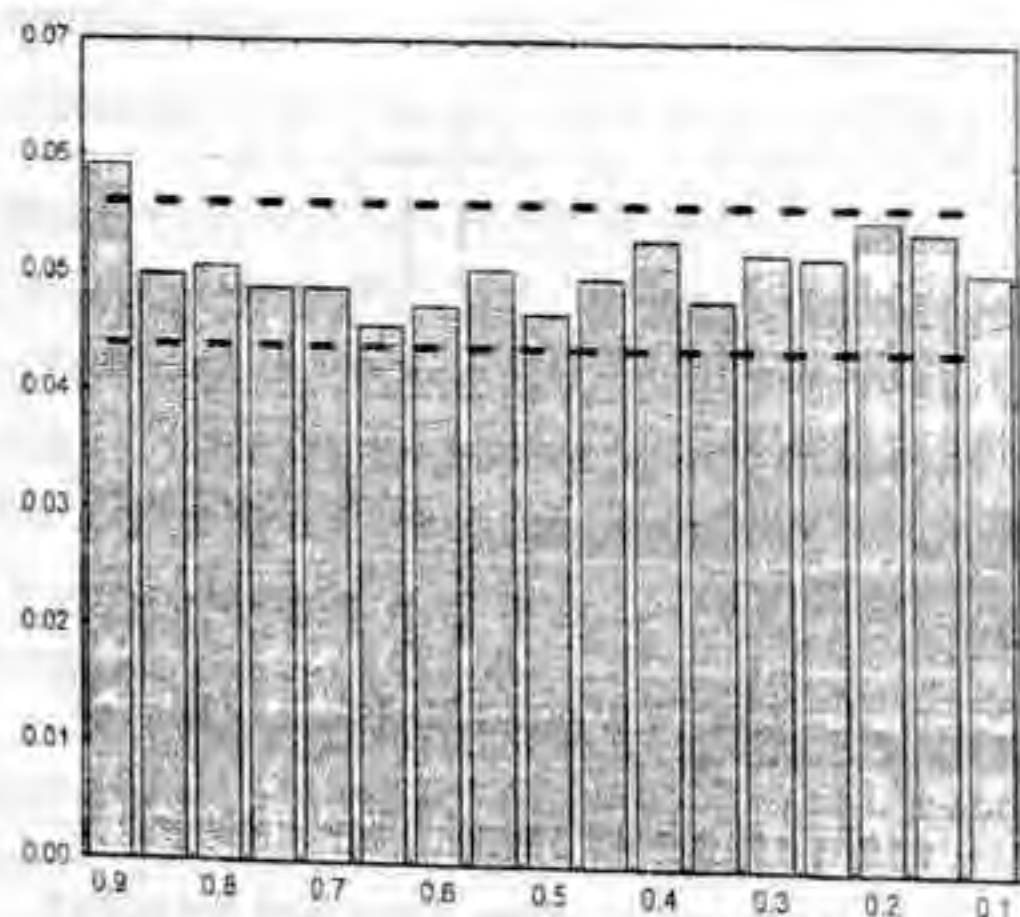


Рис. 1. Значення емпіричної помилки I роду в залежності від ймовірності виживання  $p_*$ .

Рисунок 1 свідчить, що при перевірці гіпотези для значення  $p_* = 0.9$  відсоток невірно відхилених гіпотез значно перевищує рівень  $\alpha = 0.05$ . В той же час для решти значень ймовірності виживання отримано цілком задовільні результати. Пояснити таку розбіжність можна наступним

чином. Величина помилки I роду для  $p_* = 0.9$  становить 0.0592. При цьому частота випадків, коли мало місце співвідношення  $\hat{G}_1^*(t_{0.9}) < 0.9 - z_{\alpha/2} \left( \hat{s}_1^2(t_{0.9}) / n \right)^{1/2}$ , складала 0.0164, в той час як для співвідношення  $\hat{G}_1^*(t_{0.9}) > 0.9 + z_{\alpha/2} \left( \hat{s}_1^2(t_{0.9}) / n \right)^{1/2}$  ця величина дорівнювала 0.0428, тобто гіпотеза  $H_0$  частіше відхилялася через занадто велике значення оцінки  $\hat{G}_1^*(t_{0.9})$ . На діаграмі розсіювання (рис.2) помітно обернену залежність між значеннями величини  $\hat{G}_1^*(t_{0.9})$  (відкладеної по вісі абсцис) та  $\hat{s}_1(0.9)$  (відкладеної по вісі ординат).

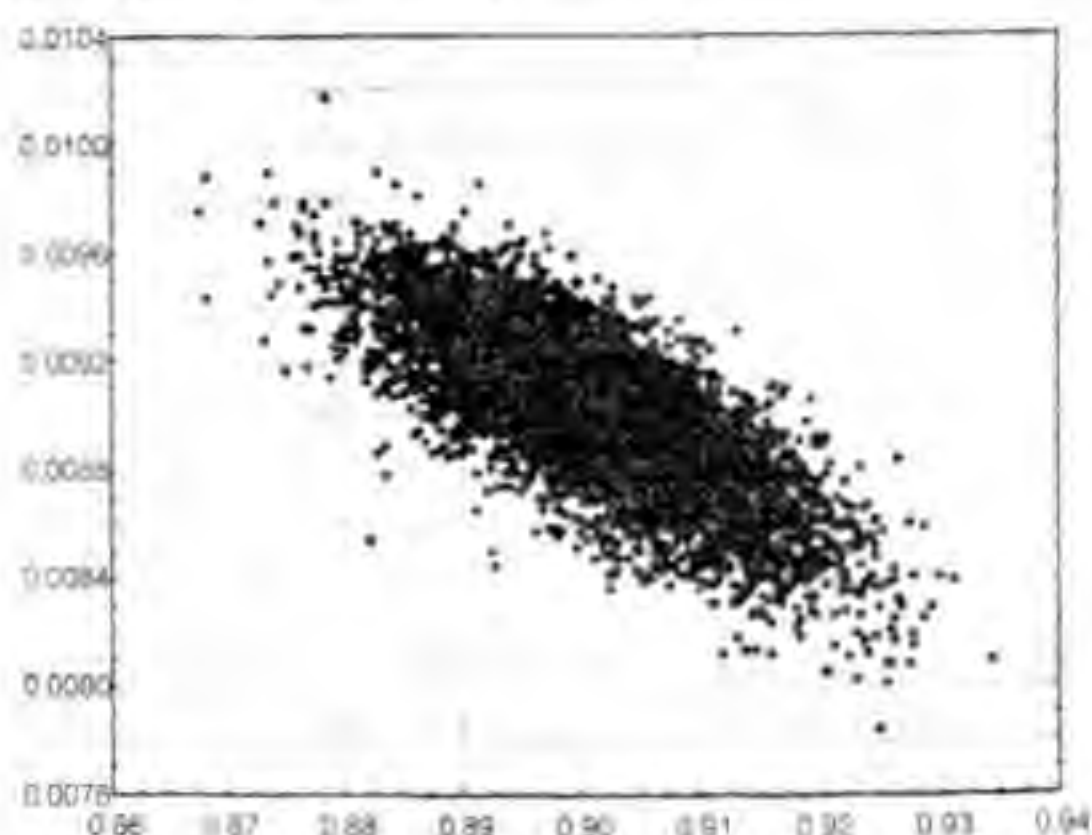


Рис. 2 Діаграма розсіювання пари величин  $(\hat{G}_1^*(0.9), \hat{s}_1(0.9))$ .

В результаті для великих значень  $\hat{G}_1^*(0.9)$  довірчі інтервали були вузькими, що призводило до частішого відхилення гіпотези  $H_0$ .

#### Список використаних джерел

1. Кокс, Д.Р., Оукс Д. Анализ данных типа времени жизни. – Москва: Финансы и статистика, 1988. – 191 с.
2. Майборода Р.Є. Статистичний аналіз сумішей. – Київ: ВПЦ «Київський університет», 2002. – 137 с.
3. Рижов А.Ю. Оцінки розподілів компонент суміші по цензурованим даним // Теорія ймовірностей та Математична статистика. – 2003. – 69. – С. 140-147.
4. Barber, S., Jennison, C. Symmetric tests and confidence intervals for survival probabilities and quantiles of censored survival data // Biometrics. – 1999. – 55. – P. 430-436.
5. Kaplan E.L., Meier P. Non-parametric estimation from incomplete observations // Journal American Statistical Association. – 1958. – 53. – С. 457-481.

Надійшла до редакції 18.05.2006



УДК 51(091) Єрмаков

Олена М. Рябухо, к.ф.-м.н., доцент

## Алгебраїчні праці професора Василя Єрмакова

Наводиться коротка характеристика всіх праць професора Київського університету і Київського політехнічного інституту Василя Єрмакова (1845-1922) з алгебраїчного і діофантового аналізу.

Ключові слова: Єрмаков, розв'язність у радикалах, теорія Галуа.

E-mail: [renelena@gmail.com](mailto:renelena@gmail.com)

### 1 Вступ

Нещодавно виповнилося 160 років від дня народження відомого київського математика і педагога професора Київського університету Св. Володимира і Київського політехнічного інституту Василя Петровича Єрмакова.

Ім'я В.П. Єрмакова відоме в математиці. Він є автором глибоких результатів теорії рядів (ознаки збіжності і розбіжності Єрмакова), теорії спеціальних функцій, теорії диференціальних рівнянь і варіаційному численні. Член-кореспондент Петербурзької Академії наук, автор багатьох підручників для вищої школи, засновник відомої математичної школи, він був добре відомий також своїми працями з педагогіки, математики та своєю діяльністю в галузі популяризації і поширення математичних знань. Життєвий шлях і науково-педагогічна діяльність Єрмакова у свій час висвітлювалась у цілому ряді публікацій журнального характеру. Йому була присвячена окрема монографія добре знаного історика математики, професора Київського політехнічного інституту В.А. Добровольського [2]. У даній роботі ми хочемо освітити куди менш знайому сторінку науково-педагогічної діяльності Єрмакова – його праці з алгебри. До них відноситься, у першу чергу, мемуар з теорії Галуа [3], [4]. Сюди ж можна віднести ще одну велику працю В.П.Єрмакова [4], в якій досліджується загальний вигляд радикального виразу, що набуває мале число значень при перестановках змінних. Ми включили до огляду також праці [7] – [10], в яких розглядаються конкретні алгебраїчні питання щодо рівнянь і многочленів. Дуже стислий огляд усіх вище наведених праць В.П.Єрмакова можна знайти у великій праці професора А.К.Сушкєвича [11].

O.M. Ryabukho, Cand.Sci (Phys.-Math.), Associate Professor

## Algebraic works of professor Vasil Ermakov

All mathematical works by professor of Kyiv University and Kyiv Polytechnic Institute Vasil Ermakov (1845-1922), concerned with algebraic and diofantive analysis, are analyzed in our work.

Key Words: Ermakov, solution by radicals, Galois theory.

### 2 Біографічні відомості про В.П.Єрмакова

Народився Василь Петрович Єрмаков 27 лютого 1845 року (13 березня за сучасним календарем) у селі Терюха Могильовської губернії (нині Гомельська область Білорусії). Його батько, Петро Іванович Єрмаков, працював учителем церковно-приходської школи. Усі його сини закінчили Київський університет Св. Володимира: старший – медичний факультет, а середній та молодший – фізико-математичний. Після закінчення Чернігівської гімназії в 1864 р. В.П. Єрмаков поступив на математичне відділення фізико-математичного факультету Київського університету. Серед його вчителів найбільш знайомими були ординарний професор по кафедрі чистої математики М.А. Дяченко, ординарний професор по кафедрі прикладної математики І.І. Рахманінов, доцент по кафедрі чистої математики (згодом професор кафедри) П.Е. Ромер, екстраординарний професор цієї ж кафедри М.С. Ващенко-Захарченко. Математичний талант В.П. Єрмакова розкрився під час навчання в університеті. У 1868 р. він закінчив повний курс навчання, отримавши ступінь кандидата за дипломну роботу "Статика, викладена за допомогою методу кватерніонів". Після цього, враховуючи успіхи в навчання і великі математичні здібності, його було залишено при університеті на два роки для підготовки до отримання професорського звання. У 1870 р. Василь Петрович склав екзамени на ступінь магістра. Особливо вдалим для нього був 1871 рік, коли в Києві відбувся III Всеросійський з'їзд природознавців і лікарів. В.П. Єрмаков виступив на ньому з доповіддю "Нова ознака збіжності і розбіжності знакосталих рядів". На з'їзді були присутні найвидатніші російські математики, зокрема, академіки Петербурзької Академії наук П.Л. Чебишев,



А.І. Савіч, професори Н.В. Бугаєв, В.Ч. Імшенецький та ін. Вони високо оцінили доповідь В.П. Єрмакова і отриманий ним результат, що відразу зробило його ім'я добре відомим. Ознака Єрмакова є одним з потужних засобів дослідження рядів, її широко використовували в своїх працях багато математиків. Сама ознака та інші результати, пов'язані з нею, і понині є предметом зацікавлень математиків, причому інтерес до цього результату постійно залишається на високому рівні.

У 1871 р. В.П. Єрмаков відбув у дворічне закордонне наукове відрядження. Він відвідав Берлінський університет, слухав лекції Кронекера, Вейерштраса, Гельмгольца, Квінке, Варбурга. Потім семестр провів у Гейдельберзькому університеті, а третім містом, яке він відвідав згідно з планом відряджень, був Париж. Тут В.П. Єрмаков ознайомився з поточними дослідженнями багатьох французьких математиків та підготував до друку кілька невеликих робіт. Крім цього саме в Парижі він розпочав власні дослідження з теорії диференціальних рівнянь.

Повернувшись з-за кордону В.П. Єрмаков подає до Університетських Відомостей велику працю "Загальна теорія інтегрування лінійних диференціальних рівнянь вищих порядків з частинними похідними і сталими коефіцієнтами". У 1873 р. він представив її як дисертацію на здобуття наукового ступеня магістра на фізико-математичний факультет Санкт-Петербурзького університету. В січні 1874 року Вчена Рада Санкт-Петербурзького університету надала В.П. Єрмакову науковий ступінь магістра математичних наук. У цьому ж році він обирається доцентом по кафедрі чистої математики Київського університету Св. Володимира. Розпочинається плідний період викладацької роботи. Йому було доручено читати лекції з теорії чисел, теорії ймовірностей, різницевого числення і тригонометрії. У 1877 р. Василь Петрович захистив на Вченій Раді фізико-математичного факультету університету Св. Володимира дисертацію на здобуття ступеня доктора математичних наук на тему "Інтегрування диференціальних рівнянь механіки". Одразу після цього він отримав звання екстраординарного професора по кафедрі чистої математики. Протягом наступних років вийшла друком найбільш відома праця В.П. Єрмакова [5]. У другій половині ХХ століття ця робота знайшла широке застосування в різних галузях теоретичної фізики, таких як теорія гравітації, теорія узагальненої симетрії, теорія узагальнених осциляторів. Її використовують у дискретному моделюванні фізичних і не тільки фізичних процесів. Нині ця

праця В.П. Єрмакова є, мабуть, найбільш цитованою серед усіх робіт фізико-математичного циклу, надрукованих в Університетських Відомостях у ХІХ столітті. Введені в цій роботі поняття і сформульовані в ній твердження і нині широко використовуються: системи диференціальних рівнянь Єрмакова-Кеплера, процедура Єрмакова-Левіса, інваріанти Єрмакова-Левіса, кути Єрмакова, тощо.

Активно займався В.П. Єрмаков і популяризацією математики. Він заснував у Києві "Журнал елементарної математики", що видавався в 1884 – 1886 рр. Е.К. Шпачинським, а пізніше (у 1887 – 1915 рр.) цей журнал під назвою "Вісник дослідницької фізики та елементарної математики" видавався в Одесі спочатку Е.К. Шпачинським, а потім В.Ф. Каганом.

У 1884 р. В.П. Єрмакова було обрано членом-кореспондентом Петербурзької Академії наук. Через чотири роки він отримав звання ординарного професора по кафедрі чистої математики і працював на цій посаді до 1899 року.

У 1899 р. виповнилося 25 років його педагогічної діяльності в Київському університеті Св. Володимира. В.П. Єрмаков одержав звання заслуженого професора і його було переведено (за існуючим положенням) на позаштатну посаду. Сталося так, що саме в 1899 р. в Києві було відкрито новий навчальний заклад – Політехнічний інститут. Професора В.П. Єрмакова було запрошено на посаду завідувача кафедри вищої математики новоствореного інституту. Спеціальна комісія з питань організації інституту визнала його кандидатуру найбільш достойною на цю посаду, враховуючи не лише його заслуги в математиці, а й те, що він був на той час дуже відомим педагогом і організатором. У Політехнічному інституті Василь Петрович пропрацював більше 20 років. За перші роки своєї діяльності він уклав основні курси по кафедрі вищої математики, а пізніше видав кілька підручників з вищої математики для технічних вузів: "Аналітична геометрія" (витримав 5 видань), "Аналіз нескінченно малих величин і диференціали, інтегральні рівняння" (2 видання), "Збірник задач з аналітичної геометрії".

Помер Василь Петрович Єрмаков 16 березня 1922 року.

### 3 Мемуар В.П.Єрмакова "Алгебраїчні рівняння, що розв'язуються в радикалах"

У передмові автор характеризує основний об'єкт дослідження, – говорить, що основними в ньому є три початкові поняття: корінь рівняння, незвідність рівняння і радикал. "Вимагається на підставі цих понять дати відповідь на питання: за



яких умов корені алгебраїчного рівняння виражаються в радикалах.” Далі автор пише, що “ця задача є складною, тому що для свого розв’язання вимагає впровадження багатьох нових понять і визначень”. Коротко згадується історія розв’язування рівнянь у радикалах, особливо підкреслюється видатна роль Еваришта Галуа в цих дослідженнях. В.П. Єрмаков пише, що з 1846 р. — часу виходу в світ посмертних мемуарів Галуа (їх було надруковано в “Journal de mathématique”), дослідження Галуа були предметом захоплення і багато математиків працювало в цій області. “Проте в ясні ідеї Галуа пізніші дослідники внесли багато плутанини, багато непотрібного, так що питання до цього часу залишається в тумані і далеко не повністю розв’язане”. А саме, автор виділяє такі шість питань, які є головними для загальної теорії розв’язування рівнянь у радикалах:

1 Які умови є необхідними і достатніми для розв’язності алгебраїчних рівнянь у радикалах?

2 Пересвідчитись, що ці умови виконуються для рівнянь степеня  $\leq 4$ .

3 Довести, що загальне рівняння степеня  $> 4$  не може бути розв’язане в радикалах.

4 Як встановити, чи розв’язується дане рівняння в радикалах, чи ні?

5 Як знаходити корені розв’язаних у радикалах рівнянь?

6 Як охарактеризувати загальний вигляд рівняння даного степеня, яке розв’язується в радикалах? Іншими словами: як скласти загальний радикальний вираз, що набуває заданого числа значень при перестановках змінних?

Автор пише, що на час написання статті на перші три питання вже були дані задовільні відповіді. Що стосується останніх трьох питань, то задовільні відповіді на них було дано тільки для рівнянь простого степеня. Виходячи з цього В.П. Єрмаков метою свого дослідження вважає висвітлення цих питань в якомога простішій, короткій і ясній формі, причому так, щоб по можливості менше використовувати теоретико-групові підходи: “Я задався ціллю викласти питання у самій простій, короткій та ясній формі. Композиція груп виявилася зовсім лишньою. Але цього мало: із теорії підстановок знадобилися лише деякі початкові теореми... Я вказую правила, як знаходити найпростішу форму кореня рівняння, що розв’язується в радикалах. Вважаю, що мені вдалося знайти простий розв’язок усіх вказаних вище шести питань... Залишилося лише розв’язати питання: як підібрати числа, що стоять під радикалами, щоб весь вираз дійсно мав дане

число значень.”

Зупинимось коротко на характеристиці змісту мемуару. Основний текст праці Єрмакова (не рахуючи два вступні параграфи) розбито на 53 параграфи.

У §3 розв’язується комбінаторна задача про число різних значень алгебраїчного виразу, складеного з символів змінних, арифметичних дій і дій добування коренів, які дістаємо при перестановках змінних. У §4-8 розглядається елементарна теорія підстановок і розклад на цикли, порядок підстановки, спряженість підстановки, централізатор підстановки. У §9-11 наводиться визначення групи підстановок, вводиться поняття підгрупи, доводиться теорема Лагранжа про порядок підгрупи, визначаються симетрична і циклічна група та групи симетрій раціональних функцій.

У §12, 13 вводиться до розгляду резольвент Галуа (незвідне рівняння найвищого степеня, якому задовольняє раціональна функція коренів даного рівняння), наводяться її властивості, характеризується група підстановок, що відповідає резольвенті Галуа. §14 є одним з центральних. У ньому формулюються і доводяться необхідні умови розв’язності алгебраїчних рівнянь у радикалах у термінах резольвент Галуа і груп підстановок цих груп. Формулювання, взагалі кажучи, складне, але воно зводиться до розв’язності певної групи. Тут же впроваджується ця група як група підстановок, що задана твірними підстановками, і яку автор називає групою Галуа. Доводиться, що сформульовані необхідні умови розв’язності рівняння в радикалах є і достатніми. У §15 результати попереднього параграфа ілюструються на конкретних прикладах. Наступні шість параграфів присвячуються докладному дослідженню раціональних функцій від коренів даного рівняння та пов’язаними з цим можливостями пониження степеня резольвенти, що застосовуються до рівнянь третього і четвертого степенів.

У §22 розглядаються питання побудови нових систем твірних у групах Галуа. У §23 ці результати застосовуються до систем твірних, порядки яких є простими числами. У §24 розглядаються знакозмінні функції та знакозмінні групи. У §25 впроваджено спеціальне зображення симетричних і знакозмінних груп, за допомогою якого встановлено, що симетрична група степеня  $> 4$  не може бути зведена до так званої форми Галуа. Звідси природно робиться висновок, що загальне рівняння степеня  $> 4$  не може бути розв’язане в радикалах. Підхід Єрмакова до доведення цієї теореми відрізняється від загальноприйнятого



тим, що замість розгляду нормальних рядів у групах він працює з спеціальними системами твірних. Тобто техніка доведень зводиться до техніки побудови таких спеціальних систем твірних або встановлення факту їх неіснування.

У §26-28 обговорюються властивості рівнянь і їх груп Галуа, пов'язані з поняттями транзитивності та інтранзитивності груп підстановок. Доводиться, що група підстановок, що відповідає резольвенті Галуа, транзитивна. У двох останніх параграфах першої частини досліджуються циклічні групи підстановок простого порядку.

§31-37 містять результати, які дають відповідь на питання: за яких умов довільні алгебраїчні рівняння розв'язуються в радикалах, як розв'язуються в радикалах рівняння простого степеня, який загальний вигляд має рівняння четвертого степеня з циклічною групою Галуа.

У §38-39 розглядаються рівняння з імпримітивною групою Галуа. Встановлено, що розв'язування таких рівнянь зводиться до випадку, коли група Галуа є примітивною. Будову імпримітивних груп підстановок розглянуто в §40. §41-43 мають технічний характер і присвячені дослідженню радикальних виразів (залежні і незалежні радикали, правильні і неправильні радикальні вирази). §44-46 є підготовчими до доведення теореми (§47) про розв'язування в радикалах рівнянь, степені яких є вільними від квадратів. У §48-49 розглядаються рівняння з циклічною групою Галуа простого порядку. У §50 вводиться поняття повної лінійної групи  $GL_n(Z_p)$  над полем із  $p$  елементів, обчислюється її порядок. У §51-52 розглянуто рівняння з метациклічними групами Галуа, степеня виду  $p^k$  ( $p$  – просте). В останніх трьох параграфах обговорюється, який вигляд може мати рівняння, що розв'язується в радикалах. Охарактеризовано таке рівняння четвертого степеня.

#### 4 Інші праці

Найбільшою і найцікавішою серед інших праць алгебраїчного характеру є стаття В.П. Єрмакова [6]. За своїм змістом вона тісно пов'язана з надрукованим раніше мемуаром [3], [4]. У цій праці робиться спроба охарактеризувати радикальні вирази, які при перестановках змінних набувають "малу кількість значень – від двох до дев'яти". На підставі такої характеристики далі пропонується доведення теорем про розв'язність загальних рівнянь відповідних степенів у радикалах. Зокрема, виходячи із загальної форми радикального виразу, що має 3 значення, виводиться формула для розв'язування кубічного рівняння у радикалах; розглядаються циклічні

рівняння 3-го та 4-го степеня, встановлюється необхідна і достатня умови розв'язності рівнянь 5-го степеня у радикалах (теорема Галуа). Наводиться загальна форма незвідного рівняння 5-го степеня, що розв'язується у радикалах. Розглянуто циклічні рівняння 5-го степеня, трьохчленні рівняння 5-го степеня, циклічні рівняння 6-го, 7-го і 8-го степенів. Охарактеризовано загальний вигляд радикального виразу, який набуває 9 значень при перестановках змінних. Доводиться, що циклічне рівняння довільного степеня розв'язується в радикалах. Запропоновано доведення таких фактів:

– якщо степінь рівняння є добутком різних простих множників, то примітивне рівняння такого степеня не розв'язується у радикалах;

– якщо степінь рівняння – просте число або степінь простого числа, причому рівняння розв'язується у радикалах, то підкореневі вирази є коренями циклічних рівнянь степеня на одиницю меншого, ніж степінь даного рівняння. Виявляється, що рівняння 4-го степеня, бо відповідне кубічне рівняння може і не бути циклічним.

Особливістю цієї роботи є те, що автор свідомо уникає використання звичних понять теорії Галуа. Як і в попередньому мемуарі, це пов'язано з намаганнями обмежитись при побудові теорії якомога меншою кількістю нових понять.

Перейдемо тепер до характеристики робіт [7] – [10]. Три з них, а саме [7], [8], [10], носять цілком елементарний характер. У роботі [8] запропоновано розклад коренів квадратного рівняння у неперервні дробі. Обговорюються також можливості такого розкладу для коренів незвідних рівнянь вищих степенів. У статті [10] наводиться повний опис усіх розв'язків діофантового рівняння  $x + 2y + 3z = m$  в натуральних числах, а в статті [7] розглядаються многочлени, які на даному інтервалі не змінюють свого знаку і найменше відхилення на ньому від нуля. Досить цікавою є невелика стаття [9]. У ній розглядається така задача: побудувати три цілі раціональні функції  $u$ ,  $v$ ,  $w$  однієї змінної (многочлени) так, щоб між ними виконувалося співвідношення

$$u^m + v^n = w^k,$$

де  $m$ ,  $n$ ,  $k$  – певні цілі числа, що більші від одиниці. При цьому многочлени  $u$ ,  $v$ ,  $w$  повинні бути взаємно простими. Встановлено, що вказаний числовий вектор  $(m, n, k)$  може набувати лише чотирьох значень:  $(2, 2, 2)$ ,  $(3, 3, 2)$ ,  $(4, 3, 2)$ ,  $(5, 3, 2)$ . Кожен з чотирьох випадків розглядається окремо. Найскладнішим з них є останній, який відповідає вектору  $(5, 3, 2)$ . Розгляду цього випадку присвячено останні двадцять сторінок статті,



наводяться деякі вказівки, що могли би бути використані при розв'язуванні поставленої задачі. Зазначимо, що дещо пізніше ця задача була повністю розв'язана представником Київської алгебраїчної школи В.П.Вельміним [1].

### 5 Висновки

Алгебраїчні праці професора В.П.Єрмакова не належать до його основних напрямків математичної діяльності. Проте в трьох із них, а саме [3], [4], [6], які присвячено розгляду різних аспектів теорії Галуа, отримано змістовні результати, які мають наукове значення і на сьогоднішній день. У них розроблено конструктивні підходи до обчислення і дослідження груп Галуа алгебраїчних рівнянь, описано різного типу редукційні процеси, які дозволяють зводити питання розв'язності у радикалах одних рівнянь до вивчення інших, у певному сенсі простіших, рівнянь. Такий напрямок теорії Галуа нині активно розвивається і дістав назву алгоритмічної теорії Галуа. Задачу, поставлену в праці [9], можна розглядати як поширення великої теореми Ферма на кільце многочленів. Причому постановка цієї задачі ширша, ніж аналог великої теореми Ферма для многочленів. Як виявилось, задачу було сформульовано дуже вдало, адже невдовзі її вдалося повністю розв'язати.

Таким чином, в алгебраїчному циклі праць професора Василя Єрмакова досліджувалися важливі проблеми тогочасної алгебри і отримано ряд значимих результатів, що свідчить про не випадковість його зацікавлень алгебраїчною проблематикою.

### Список використаних джерел

1. Вельмін В.П. Решение неопределенного уравнения  $u^m + v^n = w^k$  // Матем. сб. – 1903-904. – 24. – С.633-661.
2. Добровольський В.А. Василий Петрович

Ермаков, 1845-1922. – М.: Наука, 1981. – 165 с.

3. Ермаков В.П. Алгебраические уравнения, решаемые в радикалах // Университетские Известия. – 1901. – № 5. – С.1-65.
4. Ермаков В.П. Алгебраические уравнения, решаемые в радикалах // Университетские Известия. – 1901. – № 6. – С.65-101.
5. Ермаков В.П. Дифференциальные уравнения второго порядка. Условия интегрируемости в конечном виде // Университетские Известия, Сер. III. – 1880. – № 9. – С.1-25.
6. Ермаков В.П. Общая форма радикального выражения, имеющего 3, 4, 5, 6, 7, 8 и 9 значений // Университетские Известия. – 1904. – № 10. – С.1-36.
7. Ермаков В.П. Полином, сохраняющий между данными пределами постоянный знак и наименее уклоняющийся от нуля // Вестник опытной физики и элементарной математики. – 1914. – № 5-6. – С.121-128.
8. Ермаков В.П. Разложение корней квадратного уравнения в непрерывную дробь // Вестник опытной физики и элементарной математики. – 1887. – № 15. – С.61-63.
9. Ермаков В.П. Трехчленные неопределенные уравнения (математическая задача) // Матем. сб. – 1897. – 20. – С.193-198.
10. Ермаков ИВ.П. Число целых положительных решений уравнения  $x + 2y + 3z = m$  // Вестник опытной физики и элементарной математики. – 1914. – № 3. – С.57-59.
11. Сушкевич А.К. Материалы к истории алгебры в России в XIX в. и в начале XX в. // Историко-математические исследования. – 1951. – IV – С.237-451.



УДК 517.98

Сухтаева А.М., к.ф.-м. н., Хаджиев Дж.,  
д. ф.-м. н., професор

### О классах полугрупп, определяемых с помощью инвариантных линейных функционалов.

*Досліджуються кілька різних алгебраїчних властивостей, що використовуються при визначенні лінійно-редуктивних алгебраїчних напівгруп. Розглядаються топологічні аналоги цих властивостей, виділяються класи топологічних напівгруп.*

E-mail: [suhtaeva@ukr.net](mailto:suhtaeva@ukr.net)

Теория линейных алгебраических полугрупп была заложена в работах М. Путча за 1980-82 годы. Эти исследования в дальнейшем были продолжены в работах самого Путча, Окнинского Ж., Реннера Л. и других. Для классификации полупростых многообразий оказалось необходимым построение теории полупростых и редуктивных алгебраических моноидов, которая была развита в серии работ Путча и Реннера.

В предлагаемой работе развивается другой подход к теории полупростых и редуктивных алгебраических полугрупп (называемых в работе линейно редуктивными), основанный на идеях и методах теории инвариантов. Вводятся и исследуются несколько различных алгебраических свойств, используемых при определении линейно-редуктивных алгебраических полугрупп. Вводятся и исследуются топологические аналоги этих свойств, выделяются и исследуются возникшие при этом классы топологических полугрупп.

Ранее к изучению линейно-редуктивных алгебраических групп аналогичный подход был развит в работах Арипова Р.Г., Муминова К.К., Хаджиева Дж.

Пусть  $\Lambda$  - поле произвольной характеристики,  $V$  - векторное пространство над  $\Lambda$ ,  $L(V)$  - множество всех линейных отображений  $V$  в себя.  $L(V)$  превращается в полугруппу, если в нем в качестве бинарной

Sukhtayeva A.M., PhD, Khadjiev Dj.,  
PhD, professor

### On semigroup classes determined by invariant linear functionals

*Some different algebraic properties used in the process of algebraic reductive semigroups determination are explored. Topological analogues of these properties and consequently emerged classes of topological semigroups are also analyzed.*

операции ввести операцию произведения линейных отображений (последовательного выполнения линейных отображений).

Гомоморфизм  $K \rightarrow L(V)$  (то есть отображение  $\rho: K \rightarrow L(V)$ , обладающее свойством  $\rho(k_1 \cdot k_2) = \rho(k_1) \cdot \rho(k_2)$  или антигомоморфизм (то есть отображение  $\rho: K \rightarrow L(V)$ , обладающее свойством  $\rho(k_1 \cdot k_2) = \rho(k_2) \cdot \rho(k_1)$ ) назовем линейным представлением полугруппы  $K$  в векторном пространстве. Далее везде  $K$ -полугруппа с единицей.

Пусть дано линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(V)$  полугруппы  $K$  в векторном пространстве  $V$ . Через  $V^K$  обозначим подпространство в  $V$ , состоящее из  $K$ -инвариантных элементов:  
$$V^K = \{v \mid \rho(v)v = v, \forall k \in K\}.$$

**Определение 1.** Линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(V)$  полугруппы  $K$  в векторном пространстве  $V$  назовем  $\alpha$ -представлением, если каковы бы ни были  $K$ -инвариантное подпространство  $W \subset V$  и  $K$ -инвариантный ненулевой линейный функционал  $f$  на  $W$  существует элемент  $v \in W^K$  такой, что  $f(v) \neq 0$ . В случае, когда в  $V$  отсутствуют такие подпространство  $W$  и функционал  $f$ , линейное

Сухтаева А.М., Хаджиев Дж.



представление  $\rho$  также считаем  $\alpha$  – представлением.

*Определение 2.* Линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(V)$  полугруппы  $K$  назовем  $\beta$  – представлением, если для любого  $v \in V^K, v \neq 0$  существует  $K$  – инвариантный линейный функционал  $f$ , удовлетворяющий условию  $f(v) \neq 0$ . В случае, когда  $V^K = \{0\}$  линейное представление  $\rho$  также считаем  $\beta$  – представлением.

*Определение 3.* Линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(V)$  полугруппы  $K$  назовем  $\gamma_1$  – представлением ( $\gamma_2$  – представлением), если для подпространства  $V^K$  (для всякого  $K$  – инвариантного подпространства) в  $V$  существует  $K$  – инвариантное дополнение.  $\gamma_2$  – представление называется также полупростым.

*Определение 4.* Полугруппу  $K$  назовем класса  $\alpha$  (соответственно класса  $\beta, \gamma_1, \gamma_2$ ), если всякое ее линейное представление является  $\alpha$  – представлением (соответственно  $\beta$  –  $\gamma_1$  –  $\gamma_2$  – представлением).

Полугруппу  $K$  класса  $\gamma_2$  назовем также абсолютно полупростой.

*Определение 5.* Полугруппу  $K$  назовем класса  $f\alpha$  (соответственно класса  $f\beta, f\gamma_1, f\gamma_2$ ), если всякое ее конечномерное линейное представление является  $\alpha$  – представлением (соответственно  $\beta$  –  $\gamma_1$  –  $\gamma_2$  – представлением).

Полугруппу  $K$  класса  $f\gamma_2$  назовем полупростой.

В  $L(V)$  рассмотрим топологию Зарисского.

*Определение 6.* Полугруппа  $K \subset L(V)$  называется алгебраической полугруппой, если  $K$  является замкнутым подмножеством в  $L(V)$  и отображение  $K \times K \rightarrow K$ , определяемое операцией умножения в  $K$ , непрерывно.

*Определение 7.* Алгебраическую полугруппу  $K$  назовем класса  $a\alpha$  (соответственно класса  $a\beta, a\gamma_1, a\gamma_2$ ), если всякое ее рациональное представление является  $\alpha$  – представлением (соответственно  $\beta$  –  $\gamma_1$  –  $\gamma_2$  – представлением).

Введем топологические аналоги введенных выше понятий.

Пусть  $E$  – отделимое топологическое векторное пространство (о.т.в.п.) над полем действительных (или комплексных) чисел,  $L(E)$  – полугруппа всех непрерывных линейных преобразований  $E$ .

*Определение 8.* Гомоморфизм (или антигомоморфизм)  $\rho: K \rightarrow L(E)$  полугруппы  $K$  в полугруппу  $L(E)$  назовем линейным представлением полугруппы  $K$  в о.т.в.п.  $E$ . Легко видеть, что  $E^K$  является замкнутым подпространством в  $E$ .

*Определение 9.* Линейное представление топологической полугруппы  $(K, t)$  с топологией  $t$  назовем непрерывным, если отображение  $(K, t, E, \tau) \rightarrow (E, \tau)$ , где  $\tau$  – топология в  $E$ , определенное как  $(k, x) \rightarrow \rho(k)x, k \in K, x \in E$ , раздельно непрерывно.

*Определение 10.* Линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(E)$  назовем  $t\alpha$  – представлением, если каковы бы ни были замкнутое  $K$  – инвариантное подпространство  $W$  и  $K$  – инвариантный ненулевой линейный непрерывный функционал  $f$  на  $W$  существует элемент  $x \in W^K$  такой, что  $f(x) \neq 0$ . В случае, когда отсутствуют такие подпространство  $W$  и функционал  $f$ , линейное представление  $\rho$  также считаем  $t\alpha$  – представлением.

*Определение 11.* Линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(E)$  назовем  $t\beta$  – представлением, если для любого  $x \in E^K, x \neq 0$ , существует  $K$  – инвариантный линейный непрерывный функционал  $f$  такой, что  $f(x) \neq 0$ .

В случае, когда  $E^K = \{0\}$  линейное представление  $\rho$  также считаем  $t\beta$  – представлением.

*Определение 12.* Линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(E)$  назовем  $t\gamma_1$  – представлением ( $t\gamma_2$  – представлением), если для топологически дополняемого подпространства  $E_1 = E^K$  в  $E$  (для всякого  $K$  – инвариантного замкнутого подпространства  $E_1$  в  $E$ ) существует  $K$  – инвариантное замкнутое подпространство  $E_2$ , топологически дополнительное к  $E_1$ , то есть



такое, что  $E_1 \cap E_2 = \{0\}$  и  $E$  есть прямая сумма подпространств  $E_1$  и  $E_2$ .

Аналогичным образом вводятся топологические полугруппы класса  $t\alpha, t\beta, t\gamma, t\gamma_2$ .

Предполагая, что условия  $t\alpha, t\beta, t\gamma, t\gamma_2$  выполнены для конечномерных линейных представлений, вводим классы  $f\alpha, f\beta, f\gamma, f\gamma_2$ .

Рассмотрим линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(V)$  полугруппы  $K$  в векторном пространстве  $V$  над полем  $\Lambda$ . Для  $a \in V$  через  $[Ka]$  обозначим векторное подпространство в  $V$ , состоящее из конечных линейных комбинаций векторов  $ka, k \in K$ . Через  $[Ka]_0$  обозначим векторное подпространство в  $V$ , состоящее из конечных линейных комбинаций векторов вида  $ka - a, k \in K$ . Ясно, что  $[Ka]_0 \subset [Ka]$ .

**Предложение 1.** Подпространство  $[Ka]_0$  является  $K$ -инвариантным.

**Доказательство.** Действительно,  $k_1(ka - a) = (k_1k)a - k_1a = ((k_1k)a - a) - (k_1a - a) \in [Ka]_0$ .

**Предложение 2.** Подпространства  $[Ka]$  и  $[Ka]_0$  совпадают тогда и только тогда, когда  $a \in [Ka]_0$ .

**Доказательство.** Если  $[Ka] = [Ka]_0$ , то  $a \in [Ka]_0$ . Пусть  $a \in [Ka]_0$ , тогда

$ka = (ka - a) + a \in [Ka]_0$  для любого  $k \in K$ , отсюда  $[Ka] = [Ka]_0$ .

**Предложение 3.** Предположим, что  $[Ka] \neq [Ka]_0$ , тогда любой элемент  $v \in [Ka]$  однозначно выражается в виде  $v = \lambda a + b, \lambda \in \Lambda, b \in [Ka]_0$ . (1)

**Доказательство.** По определению векторного подпространства  $[Ka]$  всякий элемент  $v \in [Ka]$  может быть выражен в виде конечной линейной комбинации

$$v = \sum \lambda_i (k_i a)$$

Из этого выражения получаем следующее представление

$$v = (\sum \lambda_i) a + \sum \lambda_i (k_i a - a).$$

Это доказывает существование представления вида (1). Докажем единственность такого представления.

Предположим  $v = \lambda_1 a + b_1 = \lambda_2 a + b_2$ , тогда  $(\lambda_1 - \lambda_2)a = b_2 - b_1$ . В случае  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  имеем  $a \in [Ka]_0$ . Но это в силу предложения 2 противоречит предположению  $[Ka] \neq [Ka]_0$ . Следовательно,  $\lambda_1 = \lambda_2$ . Тогда  $b_1 = b_2$ .

**Предложение 4.** Предположим, что  $[Ka] \neq [Ka]_0$ . Тогда для всякого  $k \in K$  существует однозначно определенный элемент  $b(k) \in [Ka]_0$  такой, что  $ka = a + b(k)$ .

**Доказательство.** По предыдущему предложению для всякого  $k \in K$  существует однозначно определенный элемент  $\lambda(k) \in \Lambda$  и  $b(k) \in [Ka]_0$  такие,

что  $ka = \lambda(k)a + b(k)$ . Докажем, что  $\lambda(k) = 1$  для всех  $k \in K$ . Предположим, что существует  $k_0 \in K$  такое, что  $\lambda(k_0) \neq 1$ . В этом случае имеем

$$k_0 a - a = (\lambda(k_0) - 1)a + b(k_0)$$

Если  $(\lambda(k_0) - 1) \neq 0$ , то отсюда получаем  $a \in [Ka]_0$ , что противоречит в силу предложения 2 предположению  $[Ka] \neq [Ka]_0$ . Поэтому  $\lambda(k) = 1$  для всех  $k \in K$ .

**Определение 13.** Элемент  $a \in V$  назовем почти  $K$ -инвариантным, если  $a \in [Ka]_0$ .

В частности,  $K$ -инвариантный элемент является почти  $K$ -инвариантным.

**Определение 14.** Почти  $K$ -инвариантный элемент  $a \in V$  назовем подправимым, если существует  $b \in [Ka]_0$  такой, что  $a + b$  является  $K$ -инвариантным.

Легко построить пример, показывающий существование неподправимых элементов.

**Замечание 1.** Ясно, что если представление  $K$  в  $[Kv]$  полупросто, то элемент  $v$  является подправимым. Легко построить пример не полупростого представления, в котором всякий почти  $K$ -инвариантный элемент является подправимым.

**Определение 15.** Пусть  $\rho_1: K \rightarrow L(V_1)$  и  $\rho_2: K \rightarrow L(V_2)$  - два линейных представления полугруппы  $K$ . Гомоморфизм  $F: V_1 \rightarrow V_2$  назовем  $K$ -гомоморфизмом ( $K$ -эквивариантным



гомоморфизмом), если для всякого  $k \in K$  коммутативна диаграмма:

$$\begin{array}{ccc} V_1 & \xrightarrow{F} & V_2 \\ \rho_1(k) \downarrow & & \downarrow \rho_2(k) \\ V_1 & \xrightarrow{F} & V_2 \end{array}$$

Для  $K$ -гомоморфизма  $F: V_1 \rightarrow V_2$  через  $F^K$  обозначим сужение  $K$ -гомоморфизма на подпространство  $V_1^K$ :

$$F^K = F|_{V_1^K}: V_1^K \rightarrow V_2^K$$

**Теорема 1.** Для линейного представления  $\rho: K \rightarrow L(V)$  следующие условия эквивалентны:

- ( $a_1$ )  $\rho$  является  $\alpha$ -представлением;
- ( $a_2$ ) всякий почти  $K$ -инвариантный элемент в  $V$  является подправимым;
- ( $a_3$ ) для всякого сюръективного  $K$ -гомоморфизма  $F: V \rightarrow W$ , где в  $W$  задано некоторое линейное представление полугруппы  $K$ , гомоморфизм  $F^K: V^K \rightarrow W^K$  сужения на подпространство  $V^K$  также является сюръективным.

**Доказательство.** ( $a_1$ )  $\rightarrow$  ( $a_2$ ). Пусть  $x$  является почти  $K$ -инвариантным. Тогда  $[Kx]_0 \neq [Kx]$ . Рассмотрим линейный функционал в  $[Kx]$ , определенный следующим образом.

В силу предложения 3 всякий элемент  $v \in [Kx]$  однозначно определяется в виде

$$v = \lambda x + y, \quad \lambda \in \Lambda, y \in [Kx]_0.$$

Положим  $f(v) = \lambda$ . Тогда  $f$  является линейным функционалом на  $[Kx]$ . В силу предложения 4 имеем

$$f(kv) = f(k(\lambda x + y)) = \lambda f(kx) + f(ky) = \lambda f(x) + f(ky)$$

Это показывает  $K$ -инвариантность  $f$ . Тогда в

силу условия ( $a_1$ ) существует  $v \in [Kx]^K$  такой, что  $f(v) \neq 0$ . Элемент  $v$  представим в виде  $v = \lambda x + y$ ,  $\lambda \in \Lambda, y \in [Kx]_0$ . Отсюда получаем,

что  $x + \frac{1}{\lambda}y$  является  $K$ -инвариантным, т.е.

элемент  $x$  является подправимым.

( $a_2$ )  $\rightarrow$  ( $a_3$ ). Пусть линейное представление  $\rho$  удовлетворяет условию ( $a_2$ ). Рассмотрим произвольный элемент

$w \in W^K, w \neq 0$ . Ввиду сюръективности  $F$  существует  $v \in V$  такой, что  $F(v) = w$ . Ввиду  $K$ -инвариантности  $w$  и того, что  $F$  есть  $K$ -гомоморфизм, имеем:  $F(kv) = w$ . Отсюда  $F([Kv]) = w$ . Докажем, что  $v$  является почти  $K$ -инвариантным, т.е.  $[Kv] \neq [Kv]_0$ .

Действительно из  $F(v) = w$  и  $F(kv) = w$  имеем  $F(kv - v) = 0$ . Отсюда  $F(\sum \lambda_i(k_i v - v)) = 0$  т.е.  $F([Kv]_0) = 0$ . Так как  $F(v) = w$ , то  $v \notin [Kv]_0$ . Следовательно,  $v$  является почти  $K$ -инвариантным. Ввиду условия ( $a_2$ ) элемент  $v$  является подправимым, т.е. существует  $b \in [Kv]_0$  такой, что  $v + b$  является  $K$ -инвариантным. Имеем

$$F(v + b) = F(v) + F(b) = w,$$

так как  $b \in [Kv]_0$  и  $F([Kv]_0) = 0$ .

Следовательно,  $F: V^K \rightarrow W^K$  является сюръективным.

( $a_3$ )  $\rightarrow$  ( $a_1$ ). Пусть для любого сюръективного  $K$ -гомоморфизма  $F: V \rightarrow W$  гомоморфизм  $F^K: V^K \rightarrow W^K$  также является сюръективным. Пусть  $W$  является  $K$ -инвариантным подпространством и  $f$  является  $K$ -инвариантным ненулевым линейным функционалом над  $W$ . Рассмотрим подпространство  $H = \{x | f(x) = 0\}$ . Ввиду того, что  $f$  является  $K$ -инвариантным, подпространство  $H$  является  $K$ -инвариантным. Рассмотрим фактор-пространство  $V/H$  и в нем фактор-представление  $\rho$ . Тогда естественный  $K$ -гомоморфизм  $F: V \rightarrow V/H$  является сюръективным. Рассмотрим элемент

$$kv = \lambda v + y, \quad \lambda \in \Lambda, y \in H.$$

Ввиду того, что  $f$  является  $K$ -инвариантным, имеем  $f(kv) = f(v)$ . Отсюда  $kv = v + y$ . Поэтому образ элемента  $v$  при  $K$ -гомоморфизме  $F$  является  $K$ -инвариантным. Поэтому в силу условия ( $a_3$ ) существует элемент  $v + y$ , где  $y \in H$  такой, что  $v + y$  является  $K$ -инвариантным и  $F(v + y) = F(v)$ . Отсюда следует, что  $f(v + y) \neq 0$ . Теорема доказана.

**Следствие 1.** Фактор-представление  $\alpha$ -представления является



$\alpha$  – представлением, причем, если  $\rho: K \rightarrow L(V)$  есть  $\alpha$  – представление и  $\nu: K \rightarrow L(W)$  – его фактор-представление по  $K$  – инвариантному подпространству  $H$ , то  $(FV)^K = (V/H)^K = V^K/H^K = F^K V^K$ .

**Доказательство.** Пусть  $\rho: K \rightarrow L(V)$  заданное  $\alpha$  – представление,  $\nu: K \rightarrow L(W)$  – некоторое его фактор-представление. Пусть  $F_1: V \rightarrow W$  – естественный сюръективный  $K$  – гомоморфизм и  $F: W \rightarrow W_1$  – произвольный сюръективный  $K$  – гомоморфизм. Тогда  $FF_1: V \rightarrow W_1$  также является сюръективным гомоморфизмом. Ввиду того, что есть  $\alpha$  – представление гомоморфизмы  $F_1^K: V^K \rightarrow W^K$  и  $(FF_1)^K: V^K \rightarrow W_1^K$  являются сюръективными. Отсюда следует, что  $F^K: W^K \rightarrow W_1^K$  является сюръективным. Следствие доказано.

**Следствие 2.** Пусть  $K$  есть полугруппа класса  $(\alpha)$  и полугруппа  $P$  есть ее гомоморфный образ. Тогда полугруппа  $P$  также является полугруппой класса  $(\alpha)$ .

**Доказательство.** Пусть  $\varphi: K \rightarrow P$  гомоморфизм полугруппы  $K$  на полугруппу  $P$ ,  $\rho: P \rightarrow L(V)$  – произвольное линейное представление и  $\nu: P \rightarrow L(W)$  – некоторое фактор-представление представления  $\rho$  и  $F: V \rightarrow W$  – естественный  $P$  – гомоморфизм. Тогда  $\rho\varphi: K \rightarrow L(V)$  является линейным представлением и ввиду того, что  $K$  является полугруппой класса  $(\alpha)$ , отображение  $F^K: V^K \rightarrow W^K$  – сюръективно. С другой стороны,  $F^P = F^K: V^P = V^K \rightarrow W^P = W^K$ . Следовательно,  $\rho$  является  $\alpha$  – представлением. Следствие доказано.

**Замечание 2.** Отметим, что теорема 1 и следствия 1 и 2 с соответствующими изменениями в формулировках остаются верными для  $(f\alpha)$ –,  $(a\alpha)$ –,  $(t\alpha)$ –,  $(ft\alpha)$  – представлений и полугрупп класса  $(f\alpha)$ ,  $(a\alpha)$ ,  $(t\alpha)$  и  $(ft\alpha)$ . Группы класса  $(\alpha)$  описаны [4]. Группы класса  $(a\alpha)$  глубоко изучаются в теории алгебраических групп и достаточно подробно исследованы [7, 8].

Мало исследованы группы класса  $(t\alpha)$  и  $(ft\alpha)$  [1, 2, 5, 6].

**Теорема 2.** Пусть  $G$  – топологическая группа,  $H$  – ее замкнутый нормальный делитель,  $Q = G/H$  – ее фактор-группа. Если  $H$  и  $Q$  являются топологическими группами класса  $(t\alpha)$  (или класса  $(ft\alpha)$ ), то группа  $G$  также является топологической группой класса  $(t\alpha)$  (соответственно класса  $(ft\alpha)$ ).

**Доказательство.** Докажем сначала следующую лемму.

**Лемма.** Пусть  $\rho: G \rightarrow GL(V)$  – представление группы  $G$  в векторном пространстве  $V$ , тогда  $H$  – нормальный делитель группы  $G$ ,  $Q = G/H$  – ее фактор-группа. Тогда  $V^H$  является  $G$  инвариантным, действие  $G$  в  $V^H$  сводится к действию группы  $Q$  и  $V^G = (V^H)^Q$ .

**Доказательство леммы.** Пусть  $v \in V^H$  и  $g \in G$ . Тогда для  $h \in H$  имеем  $h(gv) = g(hv) = gv$ , то есть  $gv \in V^H$ . Таким образом, пространство  $V^H$  является  $G$  – инвариантным.

Пусть  $h_1, h_2 \in H$ ,  $g \in G$ ,  $v \in V^H$ . Имеем  $gh_1v = gh_2v = gv$ . Это показывает, что действие группы  $G$  в  $V^H$  сводится к действию фактор-группы  $G/H$ .

Докажем, что  $V^G = (V^H)^{G/H}$ . Из включения  $V^G \subset V^H$  следует  $V^G \subset (V^H)^G = (V^H)^{G/H}$ . С другой стороны,  $(V^H)^{G/H} = (V^H)^G \subset V^G$ . Следовательно,  $V^G = (V^H)^{G/H}$ . Лемма доказана.

**Докажем теорему.** Пусть  $\rho: G \rightarrow GL(V)$  – произвольное линейное непрерывное представление,  $\nu: G \rightarrow GL(W)$  – ее фактор-представление и  $F: V \rightarrow W$  – естественный сюръективный  $G$  – гомоморфизм. Тогда ввиду того, что  $H$  – группа класса  $(t\alpha)$  отображение  $F^H: V^H \rightarrow W^H$  – сюръективно. По доказанному в лемме действие группы  $G$  в пространствах  $V^H$  и  $W^H$  сводится к действию фактор-группы  $G/H$ . Ввиду того, что  $G/H$



есть группа класса  $(I\alpha)$ , получаем, что из сюръективности отображения  $F^H: V^H \rightarrow W^H$  следует сюръективность отображения  $(F^H)^{G/H}: (V^H)^{G/H} \rightarrow (W^H)^{G/H}$ . Из доказанной леммы получаем сюръективность отображения

$$F^G = (F^H)^{G/H}: V^G = (V^H)^{G/H} \rightarrow W^G = (W^H)^{G/H}.$$

**Теорема 3.** Пусть задано  $\alpha$  – представление полугруппы  $K$  в векторном пространстве  $V$  такое, что в каждом  $V_{\tau\alpha}$  оно является  $\alpha$  – представлением, где  $\{V_{\tau}, \tau \in \Delta\}$  – система  $K$  – инвариантных векторных подпространств в  $V$  и  $\sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau}$  обозначаем сумму векторных подпространств  $V_{\tau}$ . Тогда

$$\left( \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau} \right)^K = \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau}^K.$$

*Доказательство.* Так как  $V_{\tau}^K \subset V_{\tau}$ , то

$$\sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau}^K \subset \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau} \text{ и } \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau}^K \subset \left( \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau} \right)^K.$$

Докажем обратное включение. Рассмотрим произвольный элемент  $v \in \left( \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau} \right)^K$ . Отсюда следует существование

конечного числа подпространств  $V_{\tau_1}, \dots, V_{\tau_m}$ , сумме которых принадлежит этот элемент. Поэтому для доказательства обратного включения для всего семейства подпространств достаточно доказать выполнение обратного включения для любого конечного подсемейства подпространств.

Если обратное включение будет доказано для двух подпространств, то по индукции оно будет доказано для любого конечного подсемейства.

Докажем включение  $(V_1 + V_2)^K \subset V_1^K + V_2^K$  для двух подпространств.

Рассмотрим элемент  $v \in (V_1 + V_2)^K$ . Тогда существуют элементы  $v_1 \in V_1$  и  $v_2 \in V_2$  такие, что  $v_1 + v_2 = v$ . В случае, если  $v \in V_1 \cup V_2$ , то утверждение доказано (например, если  $v \in V_1$ , то  $v = v_1, v_2 = 0$  и  $v = v_1 \in V_1^K$ ). Предположим, что  $v \notin V_1 \cup V_2$ .

Для элемента  $v_1$  рассмотрим  $[Kv_1]_0$  и  $[Kv_1]$ . Предположим, что  $[Kv_1]_0 = [Kv_1]$ . Тогда в силу предложения 2  $v_1 \in [Kv_1]_0$ , т.е. существуют  $\lambda_1, \dots, \lambda_r \in \Lambda$  и  $k_1, \dots, k_r \in K$ , такие что

$$v_1 = \lambda_1(k_1 v_1 - v_1) + \dots + \lambda_r(k_r v_1 - v_1) \quad (2)$$

С другой стороны, в силу  $K$  – инвариантности  $v$  имеем  $v = k_i v_1 + k_i v_2$ . Отсюда и из равенства  $v = v_1 + v_2$  имеем

$$(k_i v_1 - v_1) = -(k_i v_2 - v_2) \quad (3)$$

В силу (2) далее получаем

$$v = v_1 + v_2 = -\sum_{i=1}^r \lambda_i(k_i v_2 - v_2) + v_2 \in V_2.$$

Но это противоречит предположению  $v \notin V_1 \cup V_2$ . Это противоречие показывает, что  $v_1$  является почти  $K$  – инвариантным. В силу того, что представление в  $V_1$  линейно редуцировано, существует  $b \in [Kv_1]_0$  такой, что  $v_1 + b$  является  $K$  – инвариантным. Отсюда следует, что  $v_2 - b = v - (v_1 + b)$  также является  $K$  – инвариантным. Докажем, что  $b \in [Kv_2]_0$ . Так как  $b \in [Kv_1]_0$ , то существуют  $\mu_1, \dots, \mu_s \in \Lambda$  и  $k_1, \dots, k_s \in K$  такие, что

$$b = \sum_{j=1}^s \mu_j(k_j v_1 - v_1)$$

Отсюда, используя соотношение (3) получаем

$$b = -\sum_{j=1}^s \mu_j(k_j v_2 - v_2) \in [Kv_2]_0$$

В результате получаем, что

$$v = (v_1 + b) + (v_2 - b)$$

есть сумма  $K$  – инвариантных элементов, принадлежащих соответственно пространствам  $V_1^K$  и  $V_2^K$ . Теорема доказана.

**Следствие 3.** Пусть  $\rho: K \rightarrow L(V)$   $\alpha$  – представление полугруппы  $K$  в векторном пространстве  $V$ .  $1: K \rightarrow L(W)$  – единичное представление в векторном пространстве  $W$ ,  $\rho \times 1: K \rightarrow L(V \otimes W)$  – тензорное произведение представлений  $\rho$  и  $1$ . Тогда

$$(V \otimes W)^K = V^K \otimes W^K$$

*Доказательство.* Пусть  $\{w_{\tau}, \tau \in \Delta\}$  обозначает линейный базис в  $W$ . Тогда  $V \otimes W$  можно представить как прямую сумму  $\sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau}$



пространств  $V_\tau = V \otimes w_\tau$ , изоморфных пространству  $V$ . В силу предыдущей теоремы имеем

$$\left( \sum_{\tau \in \Delta} V_\tau \right)^K = \sum_{\tau \in \Delta} V_\tau^K = V^K \otimes W$$

Следствие доказано.

**Теорема 4.** Сумма любого семейства  $\alpha$  – представлений полу группы  $K$  является  $\alpha$  – представлением.

*Доказательство.* Пусть задано линейное представление  $\rho: K \rightarrow L(V)$ ,

$\{V_\tau, \tau \in \Delta\}$  – система подпространств  $V_\tau$ ,  $V = \sum_{\tau \in \Delta} V_\tau$  и сужение  $\rho$  на подпространство  $V_\tau$  есть  $\alpha$  – представление.

Пусть  $F: V \rightarrow W$  – сюръективный  $K$  – гомоморфизм. Тогда  $W = FV = \sum_{\tau \in \Delta} (FV_\tau)$ .

В силу теоремы 2 имеем

$$V^K = \left( \sum_{\tau \in \Delta} V_\tau \right)^K = \sum_{\tau \in \Delta} V_\tau^K,$$

$$W^K = (FV)^K = \left( \sum_{\tau \in \Delta} (FV_\tau) \right)^K = \sum_{\tau \in \Delta} (FV_\tau)^K.$$

Отсюда в силу следствия 1 имеем

$$W^K = (FV)^K = \sum_{\tau \in \Delta} F^K V_\tau^K.$$

Это показывает сюръективность отображения  $F^K: V^K \rightarrow W^K$ . Теорема доказана.

Ясно, что всякая полу группа класса  $(\gamma_2)$  (соответственно  $(f\gamma_2)$ ) есть полу группа класса  $(\alpha)$  (соответственно  $(f\alpha)$ ). Важным является ответ на вопрос верно ли обратное?

Для случая групп в характеристике ноль ответ на этот вопрос положителен [7].

**Теорема 5.** Всякая инверсная полу группа класса  $(\alpha)$  (соответственно  $(f\alpha)$ ) является полу группой класса  $(\gamma_2)$  (соответственно  $(f\gamma_2)$ ).

*Доказательство.* Отметим ([3], теорема 7.36), что образ  $\rho(K)$  инверсной полу группы  $K$  является инверсной полу группой. Через  $\rho(k)$  будем обозначать элемент  $\rho(K)$ , инверсный к  $\rho(k)$ . Пусть  $\rho: K \rightarrow L(V)$  – произвольное линейное представление полу группы  $K$ ,  $W$  – произвольное  $K$  – инвариантное подпространство. Докажем, что  $W$  имеет  $K$  – инвариантное дополнение.

Через  $H_1$  обозначим  $\text{Hom}_\Lambda(V, W)$  пространство всех  $\Lambda$  – линейных отображений из  $V$  в  $W$ . Через  $H_2$  обозначим пространство  $L(W)$ . В  $H_1$  определим действие полу группы  $K$  по следующей формуле:

$$(T_k u)(x) = \rho(k)u(\overline{\rho(k)}(x)),$$

где  $x \in V, u \in H_1, \overline{\rho(k)}$  обозначает элемент инверсный к  $\rho(k)$  в инверсной полу группе  $\rho(K)$ . Пусть  $F$  обозначает сюръективный  $K$  – гомоморфизм, определенной формулой  $F(u) = u/W$ ,

т.е. сужение отображения  $u$  на  $W$ .

Тогда ввиду того, что представление  $\rho$  является  $\alpha$  – представлением, гомоморфизм

$F^K: H_1^K \rightarrow H_2^K$  также является сюръективным. В частности, для единичного отображения  $1_W/W$  в себя существует

$u_1 \in H_1^K$  такой, что  $F(u_1) = 1_W$ . Таким образом,  $u_1$  удовлетворяет условию:

$$\rho(k)u_1\overline{\rho(k)} = u_1.$$

Докажем, что из соотношения

$$\rho(k)u_1\overline{\rho(k)} = u_1, \quad (4)$$

следует соотношение  $\rho(k)u_1 = u_1\rho(k)$ .

Пусть  $\bar{k}k = e$  обозначает правую единицу элемента  $k$  в инверсной полу группе  $K$ . Как известно, элемент  $e$  является идемпотентным и  $\bar{e} = e$ .

Отсюда следует, что  $\rho(e)$  также удовлетворяет следующим условиям:

$$\overline{\rho(e)} = \rho(e),$$

$$\overline{\rho(k)}\rho(k) = \rho(e).$$

Из соотношения (4), верного для любого  $k \in K$ , получаем при  $k = e$   $\rho(e)u_1\overline{\rho(e)} = u_1$ .

Отсюда, используя соотношение  $\rho(e)\rho(e) = \rho(e)$ , получаем

$$u_1 = \rho(e)u_1\rho(e)\rho(e) = u_1\rho(e) \quad (5)$$

С другой стороны, из соотношения (4), умножая обе его стороны справа на  $\rho(k)$ , получаем

$$\rho(k)u_1\overline{\rho(k)}\rho(k) = u_1\rho(k),$$

$$\rho(k)u_1\rho(e) = u_1\rho(k).$$

Отсюда, используя соотношение (5), имеем

$$\rho(k)u_1 = u_1\rho(k) \quad (6)$$



Рассмотрим ядро  $\text{Ker } u_1$  отображения  $u_1$ . Ясно, что  $\text{Ker } u_1$  является подпространством в  $V$ , дополнительным к  $W$ . Докажем, что  $\text{Ker } u_1$  является  $\rho(k)$ -инвариантным. Пусть  $x \in \text{Ker } u_1$ . Из (6) имеем  $\rho(k)x \in \text{Ker } u_1$ . Это показывает  $\rho(k)$ -инвариантность подпространства  $\text{Ker } u_1$ .

Теорема доказана.

**Теорема 6.** Для полугруппы  $K$  следующие три условия эквивалентны:

- ( $T_1$ )  $K$  является полугруппой класса  $(f\alpha)$ ;
- ( $T_2$ )  $K$  является полугруппой класса  $(f\beta)$ ;
- ( $T_3$ )  $K$  является полугруппой класса  $(f\gamma_1)$ .

**Доказательство.** ( $T_1$ )  $\rightarrow$  ( $T_2$ ). Пусть  $\rho: K \rightarrow L(V)$  - конечномерное линейное представление  $v \in V^K, v \neq 0$ . Рассмотрим линейное представление  $\rho^*: K \rightarrow L(V^*)$  в сопряженном пространстве  $V^*$ . Заметим, что если  $\rho: K \rightarrow L(V)$  является гомоморфизмом, то  $\rho^*: K \rightarrow L(V^*)$  является антигомоморфизмом и наоборот. Тогда  $v$  является  $K$ -инвариантным ненулевым линейным функционалом на  $V^*$ . В силу условия ( $T_1$ ) существует  $f \in (V^*)^K$  такой, что  $v(f) \neq 0$ . Элемент  $f$  является ненулевым линейным  $K$ -инвариантным функционалом на  $V$ , для которого  $f(v) \neq 0$ .

Аналогично доказывается импликация ( $T_2$ )  $\rightarrow$  ( $T_1$ ).

( $T_3$ )  $\rightarrow$  ( $T_2$ ). Пусть  $\rho: K \rightarrow L(V)$  - конечномерное линейное представление и  $v \in V^K, v \neq 0$ . Тогда из условия ( $T_3$ ) вытекает существование  $K$ -инвариантного подпространства  $W$ , дополнительного к  $\{\Delta v\}$ . Определим линейный функционал  $f$  следующим образом:  $f(x) = 0$  для  $x \in W$ ,  $f(v) = 1$  и далее по линейности. Из  $K$ -инвариантности  $W$  и элемента  $v$  следует  $K$ -инвариантность  $f$ . Этот функционал удовлетворяет требуемым условиям.

( $T_2$ )  $\rightarrow$  ( $T_3$ ). Пусть  $\rho: K \rightarrow L(V)$  - конечномерное линейное представление. Рассмотрим  $V^K$  и  $v \in V^K, v \neq 0$ . Положим  $\dim V^K = m$ ,  $\dim V = n$ . В силу условия ( $T_2$ ) существует  $K$ -инвариантный линейный непрерывный функционал  $f$  такой, что  $f(v) \neq 0$ . Положим  $W_1 = \{x \mid f(x) = 0\}$ ,  $W_1$  является  $K$ -инвариантным подпространством. Если  $m = 1$ , то  $W_1$  является  $K$ -инвариантным дополнительным подпространством к  $V^K$ . Пусть  $m > 1$ , тогда  $W_1 \cap V^K \neq \{0\}$ . Имеем  $\dim W_1 \cap V^K = m - 1$ . Применяя приведенное выше рассуждение к  $W_1$  и далее по индукции в результате конечного числа шагов получаем  $K$ -инвариантное подпространство  $W_m$  такое, что оно дополнительно к  $V^K$ . Теорема доказана.

#### Список використаних джерел

1. Желобенко Д.П. Компактные группы Ли и их представления. // М.: Наука, 1970. - 664 с.
2. Желобенко Д.П., Штерн А.И. Представления групп Ли. // М.: Наука, 1977.
3. Клиффорд А., Престон Г. Алгебраическая теория полугрупп. // М.: Мир, 1972. - Т.2.
4. Муминов К.К. Различные алгебраические варианты понятия линейной редуктивности, их свойства и взаимосвязи // Деп. в ВИНТИ 11.10.90. - № 5347-В 90. - 17 с.
5. Муминов К.К. Различные топологические варианты линейной редуктивности и их взаимосвязи // ДАН Уз.ССР.-1991. - №11.-С. 5-6.
6. Муминов К.К., Хаджиев Дж. Линейно-редуктивные представления топологических групп // ДАН Уз.ССР.-1989. - № 10 - С.9-11
7. Спрингер Т. Теория инвариантов. // М.: Мир, 1981. - 126 с.
8. Хэмфри Д.Е. Линейные алгебраические группы. // М.: Наука, 1980. - 400 с.

Надійшла до редколегії 09.12.2006



УДК 519.41/47

Микола С. Черніков, д.ф.-м.н.,  
Оксана О. Требенко

### *RN*-групи з наддоповнюваною циклічною $p$ -підгрупою

Досліджуються *RN*-групи, в яких кожна підгрупа, що містить деяку фіксовану циклічну  $p$ -підгрупу, має доповнення.

Ключові слова: *RN*-група, доповнюваність, наддоповнюваність, розв'язність, локальна скінченність.

E-mail: chern@imath.kiev.ua, trebenko@imath.kiev.ua

#### 1 Introduction

Recall that a subgroup  $H$  of the group  $G$  is called complemented in  $G$ , if there exists some subgroup  $D$  of  $G$  such that  $G = HD$  and  $H \cap D = 1$ . Finite groups in which all subgroups are complemented were first considered by Ph.Hall [8]. The complete constructive description of arbitrary (finite or infinite) groups in which all subgroups are complemented has been obtained by N.V.Chernikova [2, 3]. Such groups were called completely factorizable [2]. Remark that in view of N.V.Chernikova's Theorem completely factorizable groups are solvable (more precisely, metabelian) and locally finite. Further, in view of this theorem, completely factorizable  $p$ -groups are just elementary abelian groups.

Following [11] we call a subgroup  $H$  of the group  $G$  supercomplemented in  $G$ , if each subgroup of  $G$  containing  $H$  is complemented in  $G$ . In consequence of N.V.Chernikova's results [2,3], it is naturally to consider groups with supercomplemented subgroups. The evident examples show that a  $p$ -group with supercomplemented cyclic subgroup is not necessary abelian.

In [5] locally graded  $p$ -groups with a supercomplemented cyclic subgroup were investigated. It turned out that, according to [5], such groups are locally finite and solvable (in particular, in the case of  $p \neq 2$ , metabelian). Later, V.A.Kreknin [11] has showed that the derived length of such locally graded 2-groups does not exceed 3.

Recall that a group is said to be locally graded, if its every nonidentity finitely generated subgroup has a proper subgroup of finite index [7]. The class of all locally graded groups contains the class of all *RN*-groups which is very wide. For example, all solvable and locally solvable groups, groups of all

M. S. Chernikov, D.Sci. (Phys.-Math.),  
O. O. Trebenko

### *RN*-groups with a supercomplemented cyclic $p$ -subgroup

*RN*-groups, in which every subgroup containing some fixed cyclic  $p$ -subgroup has a complement, are investigated.

Key Words: *RN*-group, complementibility, supercomplementibility, solvability, locally finiteness.

Kurosh-S.N.Chernikov's classes, radical (in the sense of B.I.Plotkin), locally radical groups are *RN*-groups.

The main results of the present paper are the following propositions.

**Theorem 1.** Let  $G$  be an *RN*-group with a finite supercomplemented cyclic  $p$ -subgroup  $H$ . Then  $G$  is solvable and locally finite.

**Theorem 2.** For an arbitrary sufficiently large prime  $p$  there exists a non-locally graded 2-generated  $p$ -group  $G = A \rtimes H$  where  $A$  is an infinite simple group with all proper nonidentity subgroups of order  $p$  and  $H$  is a supercomplemented subgroup of order  $p$  of  $G$ .

By virtue of Theorem 2, the requirement of belonging of  $G$  to the class of *RN*-groups in Theorem 1 and the requirement of locally gradability in [5] are essential.

In what follows,  $\mathbb{N}$  and  $\mathbb{P}$  denote the sets of all naturals and primes respectively. Below  $p, q \in \mathbb{P}$ . The symbol  $\rtimes$  is used to denote the semidirect product. Let  $G$  be a group. Notations  $H \leq G$  ( $H \trianglelefteq G$ ) and  $H < G$  ( $H \triangleleft G$ ) mean that  $H$  is a (normal) subgroup of  $G$  and  $H$  is a (normal) subgroup of  $G$  different from  $G$  respectively.  $\pi(G)$  is the set of all  $p \in \mathbb{P}$  for which  $G$  has an element of order  $p$ . Further,  $\Phi(G)$  is the Frattini subgroup of  $G$ ,  $Z(G)$  is the centre of  $G$ . Let  $\emptyset \neq H \subseteq G$ . Then  $H^G = \langle h^g : h \in H, g \in G \rangle$ ,  $H^n = \langle h^n : h \in H, n \in \mathbb{N} \rangle$ . Below for an arbitrary solvable group  $X$ ,  $d(X)$  is



the derived length of  $X$ . Other notations are standard.

Accordingly to the following proposition, the groups considered in [5,11] are, in fact,  $RN$ -groups (as in Theorem 1 of the present paper).

**Proposition 1.** A primary group is locally graded iff it is an  $RN$ -group.

*Proof.* Let  $G$  be a  $p$ -group. If  $G$  is an  $RN$ -group, then it is locally graded. Suppose that  $G$  is locally graded and  $G \neq 1$ . Let  $K$  be a nonidentity finitely generated subgroup of  $G$ . Then (with regard to Poincare's Theorem) there exists  $N \triangleleft K$  with  $|N:K| < \infty$ . Since  $K/N$  is a nonidentity finite  $p$ -group,  $(K/N)' \neq K/N$ . Therefore  $K' \neq K$ . By S.Brodskii's Theorem (see, for instance, [1]),  $G$  is an  $RN$ -group.

Proposition is proven.

## 2 Preliminary results

The next lemma easily follows from Lemma 1 [5].

**Lemma 1.** Let  $G$  be a group with a supercomplemented subgroup  $H$ ,  $H \subseteq K \leq G$ , and let  $\varphi$  be a homomorphism of  $K$ . Then  $H^\varphi$  is supercomplemented in  $K^\varphi$ .

**Proposition 2.** Let  $G$  be a group with a finite supercomplemented subgroup  $H$  of order  $m$ . If an elementary abelian  $q$ -subgroup  $Q$  of  $G$  is its minimal normal subgroup, then either  $m \neq 1$  and  $|Q| \leq q^{(m-1)m}m^m$ , or  $m=1$  and  $|Q|=q$ .

*Proof.* Let  $m \neq 1$ . Show that  $Q$  has a minimal normal subgroup of order  $\leq q^{m-1}$  of the group  $QH$ . Let  $H = \{h_1, h_2, \dots, h_m\}$ . Take  $a \in Q \setminus \{1\}$ . Denote  $K = \langle a^{h_1}, a^{h_2}, \dots, a^{h_m} \rangle$ . Then  $K \leq QH$  and  $|K| \leq q^m$ . Obviously,  $K$  contains some minimal normal subgroup  $Q_1$  of  $QH$ .

Suppose that  $|Q_1| = q^m$ . Then  $Q_1 = \langle a^{h_1} \rangle \times \langle a^{h_2} \rangle \times \dots \times \langle a^{h_m} \rangle$ . Clearly,  $\langle a^{h_1} a^{h_2} \dots a^{h_m} \rangle \triangleleft QH$  and  $|\langle a^{h_1} a^{h_2} \dots a^{h_m} \rangle| = q < q^m$ , which is a contradiction. Thus  $|Q_1| \leq q^{m-1}$ .

Further, for some  $D \leq G$ ,  $G = (Q_1 H)D$  and  $(Q_1 H) \cap D = 1$ . In view of S.N.Chernikov's Lemma

(see, for instance, [4], Lemma 1.8),  $QH = Q_1 H (QH \cap D)$ . Also

$Q_1 H \cap (QH \cap D) = Q_1 H \cap D = 1$ . Denote

$Q_2 = Q \cap D$ . Then  $Q_2 \neq Q$ . Since

$G = QHD = QDH$  and  $Q_2 \leq Q, D$ , we have

$G = N_G(Q_2)H$ . So for each  $g \in G$ , there exists

$h \in H$  such that  $Q_2^g = Q_2^h$ . Further, for each  $h \in H$ , obviously,

$$|Q:Q_2^h| = |Q:Q_2| \leq |QH:QH \cap D| = |Q_1 H| \leq q^{m-1}m.$$

So

$$|Q:\bigcap_{h \in H} Q_2^h| \leq \prod_{h \in H} |Q:Q_2^h| \leq (q^{m-1}m)^m.$$

As far as  $\bigcap_{h \in H} Q_2^h = \bigcap_{g \in G} Q_2^g \leq G$ ,  $Q_2 \neq Q$  and  $Q$  is

a minimal normal subgroup of  $G$ ,  $\bigcap_{h \in H} Q_2^h = 1$ . So

$$|Q| \leq (q^{m-1}m)^m.$$

If  $m=1$ , then  $G$  is completely factorizable. Therefore in consequence of N.V.Chernikova's Theorem [2, 3],  $|Q|=q$ .

Proposition is proven.

**Lemma 2.** Let  $G$  be a group with a finite supercomplemented subgroup  $H$ ;  $N \leq G$  and  $N$  is abelian. Then  $N$  is periodic.

*Proof.* Let  $N$  be not periodic. Let  $H = \{h_1, h_2, \dots, h_m\}$ . Take some element  $a$  of infinite order of  $N$ . Denote  $K = \langle a^{h_1}, a^{h_2}, \dots, a^{h_m} \rangle$ . Obviously,  $|\pi(K)| < \infty$ . Take any  $q \in \mathbb{P} \setminus (\pi(K) \cup \pi(H))$ . Clearly,  $HK$  has no nonidentity  $q$ -subgroups. Obviously, for some  $s \in \mathbb{N}$ ,

$$|HK:HK^q| = q^s.$$

For some  $D < G$ ,

$$G = (HK^q)D, \quad HK^q \cap D = 1.$$

By S.N.Chernikov's Lemma,

$$HK = HK^q (HK \cap D) \text{ and } HK^q \cap (HK \cap D) = 1.$$

Therefore  $|HK \cap D| = q^s$ , which is a contradiction.

Thus  $N$  is periodic.

Lemma is proven.



**Proposition 3.** Let  $G$  be a group with a finite supercomplemented subgroup  $H$  of order  $m$ . Then any abelian chief factor  $K/L$  of  $G$  is an elementary  $q$ -group of order  $\leq q^n$ , where either  $m \neq 1$  and  $n = m(m-1) + m \log_q m$ , or  $n = m = 1$ .

*Proof.* In view of Lemma 1,  $G/L$  is a group with a finite supercomplemented subgroup  $HL/L$  of order  $\leq m$ . Then, since  $K/L$  is an abelian normal subgroup of  $G/L$ ,  $K/L$  is periodic (see Lemma 2). Therefore, because of  $K/L$  is an abelian minimal normal subgroup of  $G/L$ ,  $K/L$  is, obviously, an elementary  $q$ -subgroup for some  $q$ . Therefore in view of Proposition 2 the present proposition is correct.

Recall that in view of Zassenhaus's Theorem, for an arbitrary  $n \in \mathbb{N}$ , the derived length of linear groups of degree  $\leq n$  over fields is bounded by some natural number  $\zeta(n)$  depending only on  $n$  (see, for instance, [14], Theorem 3.7).

**Proposition 4.** Let  $G$  be a finite solvable group with a supercomplemented cyclic  $p$ -subgroup  $H$  of order  $m$ . Then

$$d(G) \leq \zeta(m) + m! + 1.$$

*Proof.* Let  $G \neq 1$  and

$$G = G_0 \supset G_1 \supset \dots \supset G_s = 1$$

be some chief series of  $G$ . In view of Proposition 3, for some  $q = q(i) \in \mathbb{P}$ ,  $G_i/G_{i+1}$  is a  $q$ -group and  $|G_i/G_{i+1}| \leq q^n$ ,  $n = \max\{m(m-1) + m \log_2 m, 1\}$ .

Since  $G/C_G(G_i/G_{i+1})$  is naturally embedded into  $GL_n(q)$ , by Zassenhaus's Theorem mentioned above,  $d(G/C_G(G_i/G_{i+1})) \leq \zeta(m)$ . Therefore

$$d(G/\bigcap_{i=0}^{s-1} C_G(G_i/G_{i+1})) \leq \zeta(m).$$

Show that the derived length of  $F = \bigcap_{i=0}^{s-1} C_G(G_i/G_{i+1})$  is bounded by  $m! + 1$ . In view of Theorem III.4.3 [9] (for instance),  $F$  is nilpotent.

If  $P$  is a Sylow  $p$ -subgroup of  $F$ , then, by Lemma 1,  $H$  is a supercomplemented subgroup of a  $p$ -group  $PH$ . Therefore, in view of Theorem 1 (ii) [5],  $d(PH) \leq m! + 1$ .

If  $Q \neq 1$  is a Sylow  $q$ -subgroup of  $F$ ,  $q \neq p$ , then, in view of Lemma 1, for some  $D \leq QH$ ,

$$QH = (\Phi(Q)H)D \text{ and } (\Phi(Q)H) \cap D = 1.$$

Obviously,  $D$  complements  $\Phi(Q)$  in  $Q$ . Consequently,  $\Phi(Q) = 1$  and  $Q$  is elementary abelian. So  $d(Q) = 1$ .

Since  $F$  is decomposed into the direct product of its Sylow subgroups,  $d(F) \leq m! + 1$ .

Therefore  $d(G) \leq \zeta(m) + m! + 1$ .

Proposition is proven.

**Remark.** The upper bound in Proposition 4 is, of course, very rough.

**Proposition 5.** Let  $G$  be a locally solvable group with a finite supercomplemented subgroup  $H$ . Then  $G$  is locally finite.

*Proof.* Obviously, with regard to Lemma 1, it is sufficient to show that every finitely generated subgroup of  $G$  containing  $H$  is finite. Thus the proof is reduced to the case when  $G$  is a finitely generated solvable group.

Prove by induction on the derived length of  $G$ . Let  $F$  be the last nonidentity term of the derived series of  $G$ . By Lemma 2,  $F$  is periodic. In view of Lemma 1 and by the induction hypothesis,  $G/F$  is finite. Therefore by Schreier-Dyck's Theorem (see, for instance, [12], p.228, 111),  $F$  is finitely generated. So  $F$  and, at the same time,  $G$  are finite.

Proposition is proven.

**Lemma 3.** A finitely generated  $RN$ -group  $G$  is finite and solvable iff the set of all its finite solvable quotient groups is finite.

*Proof.* Necessity is obvious.

*Sufficiency.* Let  $K$  be an intersection of all  $N \trianglelefteq G$  such that  $G/N$  is finite and solvable. Since the number of such  $N$  is finite,  $G/K$  is finite and solvable. Hence, in view of Schreier-Dyck's Theorem,  $K$  is finitely generated. Assume that  $K \neq 1$ . Then because of  $K$  is a finitely generated  $RN$ -group,  $K \neq K'$ .

If  $|K : K'| < \infty$ , then  $G/K'$  is finite and solvable. Therefore  $K' \supseteq K$ , which is a contradiction. So  $|K : K'|$  is infinite.

Since  $K/K'$  is infinite abelian finitely generated, for an arbitrary  $p \in \mathbb{P}$ ,  $K \neq L$ , where



$(K/K')^p = L/K'$ . Then  $L \triangleleft G$ ,  $L \subsetneq K$  and  $K/L$  is finite abelian. So  $G/L$  is finite and solvable, which is a contradiction.

Lemma is proven.

### 3 Proofs of Theorems

*Proof of Theorem 1.* Obviously, with regard to Lemma 1 and Proposition 4, it is sufficient to show that every finitely generated subgroup of  $G$  containing  $H$  is finite and solvable. Thus the proof is reduced to the case of finitely generated group  $G$ .

Let  $K$  be an intersection of all  $N \trianglelefteq G$  such that  $G/N$  is finite and solvable. Put  $|H| = m$ . By virtue of Proposition 4 and Lemma 1,  $d(G/N) \leq \zeta(m) + m! + 1$ . Consequently,  $G/K$  is solvable with  $d(G/K) \leq \zeta(m) + m! + 1$ . Further, in view of Lemma 1 and Proposition 5,  $G/K$  is finite. Consequently, the set of all finite solvable quotient groups of  $G$  is finite. Therefore, by Lemma 3,  $G$  is finite.

By Lemma 3  $K$  and, at the same time,  $G$  are solvable and finite.

Theorem is proven.

*Proof of Theorem 2.* In view of Obraztsov's Theorem ([13], Corollary to Theorem D), for sufficiently large prime  $p$  there exists an infinite simple 2-generated  $p$ -group  $A$  with all proper subgroups of order  $p$ , having an automorphism  $\varphi$  of order  $p$  such that  $C_A(\varphi) = 1$ . Therefore there exists a  $p$ -group  $G = A \rtimes H$  such that  $|H| = p$  and  $C_G(H) = H$ . Since  $A$  is infinite simple and, obviously, 2-generated,  $A$  and, at the same time,  $G$  are not locally graded.

Take any  $g \in A \setminus \{1\}$  and  $h \in H \setminus \{1\}$ . Since, clearly,  $a^h \notin \langle a \rangle$ ,  $|\langle a, a^h \rangle| \neq p$ . So  $A = \langle a, a^h \rangle$ . Therefore  $G = \langle a, h \rangle$ . Thus  $G$  is 2-generated.

Show that in  $G$  there exist only two subgroups ( $H$  and  $G$ ) containing  $H$ . Suppose contrary. Let  $H \subset K < G$ . Then, in view of S.N.Chernikov's Lemma,  $K = (A \cap K) \rtimes H$ . Since  $1 \neq A \cap K < A$ , we have  $|A \cap K| = p$ . Therefore  $|K| = p^2$ . So  $K$  is abelian. Then  $C_G(H) \supseteq A \cap K$ , which is a contradiction. Therefore each subgroup of  $G$  containing  $H$  has a complement in  $G$ .

Theorem is proven.

### References

1. Brodskii S.D. Equations over the groups and groups with one defining relation: Avtoref...kand. diss. fiz.-mat. nauk. — Moscow: Moscow State Ped. In-te, 1983. — 14 p. (in Russian)
2. Chernikova N.V. Completely factorizable groups // Dokl. AN SSSR. — 1953. — 92, №5. — P. 877-880.
3. Chernikova N.V. Groups with complemented subgroups // Mat. sb. — 1956. — 39, №3. — P. 273-292.
4. Chernikov N.S. Groups which are products of permutable subgroups. — Kyiv: Nauk. dumka, 1987. — 208 p. (in Russian)
5. Chernikov N.S., Kreknin V.A., Trebenko O.O. A generalization of completely factorizable groups // Matematychni Studii. — 2005. — 23, №2. — P. 129-135.
6. Chernikov S.N. Groups with prescribed properties of the system of subgroups. — Moscow, 1980. — 384 p. (in Russian)
7. Chernikov S.N. Infinite nonabelian groups with the invariant condition for infinite nonabelian subgroups // Dokl. AN SSSR. — 1970. — 194, №6. — p.1280-1283.
8. Hall Ph. Complemented groups // J. London Math. Soc. — 1937. — 12, №3. — P. 201-204.
9. Huppert B. Endliche Gruppen. I. — Berlin etc.: Springer, 1967. — 792 S.
10. Kargapolov M.I., Merzljakov Yu.I. Fundamentals of the group theory. — Moscow: Nauka, 1972. — 240 p.
11. Kreknin V.A. Locally graded 2-groups with a supercomplemented cyclic subgroup // Trans. In-t Math. NAS Ukraine. — 2005. — 2, №3. — p.137-209.
12. Kurosh A.G. The theory of groups. 3-d ed. — Moscow: Nauka, 1967. — 648 p.
13. Obraztsov V.N. A new embedding scheme for groups and some applications // J. Austral. Math. Soc. Ser.A. — 1996. — 61, №2. — P. 267-288.
14. Wehrfritz B.A.F. Infinite linear groups. — Berlin etc.: Springer, 1973. — 228 p.

Надійшла до редакції 04.12.2006



1. H. Cartan, *Sur la structure des groupes réductifs*, *Ann. Inst. Fourier* (N.S.) 11 (1961), 173-207.

2. R. Steinberg, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 321-352.

3. J. Tits, *Sur la structure des groupes réductifs*, *Ann. Inst. Fourier* (N.S.) 11 (1961), 209-244.

4. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 353-374.

5. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 375-396.

6. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 397-418.

7. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 419-440.

8. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 441-462.

9. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 463-484.

10. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 485-506.

11. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 507-528.

12. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 529-550.

13. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 551-572.

14. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 573-594.

15. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 595-616.

16. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 617-638.

17. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 639-660.

18. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 661-682.

19. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 683-704.

20. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 705-726.

21. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 727-748.

22. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 749-770.

23. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 771-792.

24. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 793-814.

25. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 815-836.

26. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 837-858.

27. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 859-880.

28. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 881-902.

29. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 903-924.

30. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 925-946.

31. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 947-968.

32. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 969-990.

33. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 991-1012.

34. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1013-1034.

35. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1035-1056.

36. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1057-1078.

37. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1079-1100.

38. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1101-1122.

39. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1123-1144.

40. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1145-1166.

41. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1167-1188.

42. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1189-1210.

43. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1211-1232.

44. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1233-1254.

45. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1255-1276.

46. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1277-1298.

47. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1299-1320.

48. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1321-1342.

49. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1343-1364.

50. J. Tits, *On the structure of the reductive groups*, *Ann. of Math.* (2) 80 (1964), 1365-1386.



ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ  
РІВНЯННЯ,  
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА  
ТА МЕХАНІКА







УДК 539.3:532.546:519:63

Зражевська В.Ф., кандидат фіз-мат наук, доцент,  
Зражевський Г.М., кандидат фіз-мат наук,  
доцент, Купенко О.Г., кандидат фіз-мат наук,  
доцент

### Чисельне розв'язання деякої нестационарної нелінійної задачі термопружності для порожнинного циліндру

Запропоновано ефективну напіваналітичну процедуру для розв'язання нестационарної нелінійної задачі термопружності для областей, що мають осесиметричну форму з неосесиметричними граничними умовами. Нестационарна нелінійна задача теплопровідності розв'язується ітераційним методом, що побудовано на базі методу часткової дискретизації рівняння зважених нев'язок в слабкому формулюванні з використанням методу Гальоркіна перетвореної за Кіргофом вихідної задачі. Термонапруження підраховуються за аналітичними виразами отриманими шляхом розв'язання квазістатичної пружної задачі з поліноміальною апроксимацією залежності матеріальних сталей від температури. Застосування процедури проілюстровано на прикладі секторального охолодження порожнинного циліндру. Проведено аналіз розв'язку.

Ключові слова: термонапруження, часткова дискретизація, перетворення Кіргофа.

\*E-mail: zgrig@univ.kiev.ua, alex\_kutz@univ.kiev.ua

### Вступ

Відомо, що інтенсивні нестационарні термічні навантаження металевих конструкцій можуть спричинити пошкодження та руйнування. Технологічні процеси в енергетиці та машинобудуванні передбачають як штатні так і аварійні зміни температурних режимів. Оскільки циліндричні конструкції, наприклад трубопроводи, корпуси реакторів складають значну частку елементів виробництва, розрахунок критичних температурних режимів їх функціонування є важливим.

Теорії температурних напружень та інженерним методикам їх розрахунків присвячена чисельна література [1-5].

Математична модель термічних навантажень металевих конструкцій зводиться до

V.F. Zrazhevskaya, Cand.Sci. (Phys.-Math.),  
Associate Professor, G.M. Zrazhevsky, Cand.Sci.  
(Phys.-Math.), Associate Professor, O.G. Kuzenko,  
Cand.Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor

### Numerical solving of some non-stationary nonlinear problem of the thermoelasticity for the hollow cylinder

The effective numerical scheme of a non-stationary nonlinear thermoelasticity problem for the rotationally symmetric cylindrical domain with not axially symmetric boundary conditions solving is proposed. The non-stationary nonlinear problem of the thermal conduction is solving by an iterative method on the basis of the partial discretization method of weighted discrepancies equation in a weak statement with the Galiorkin method using after than Kirchoff transformation has been applied to the initial problem. The thermotensions are computed according to analytical expressions obtained by quasistatic elastic problem with the polynomial approximation of material constants from temperature solving. The procedure applying is illustrated on an example of the sector cooldown of the hollow cylinder. The analysis of results is conducted.

Key Words: thermoelasticity, partial discretization, Kirchoff transformation

розрахунку нестационарної поведінки теплових полів шляхом розв'язання нестационарної гранично-початкової задачі теплопровідності та в подальшому, підрахунку температурних напружень, шляхом розв'язання стаціонарної граничної задачі теорії пружності [2-5]. Отримано базові аналітичні розв'язки базових модельних задач для канонічних областей [1,2]. В той же час, в реальних інженерних задачах при значних діапазонах зміни температури параметри моделі є температуро залежними, що передбачає врахування нелінійних ефектів [2,3].

Нелінійні нестационарні задачі потребують розробки ефективних чисельних методів. В даній роботі пропонується напіваналітична чисельна схема, що будується на базі методах часткової дискретизації та зважених



нев'язок, що враховує осесиметричність області, що суттєво спрощує чисельну схему та мінімізує вимоги до обчислювальних потужностей. Проведено аналіз збіжності запропонованої чисельної схеми, наведено приклад реалізації.

#### Постановка задачі.

Нехтуючи інерційними членами в рівняннях пружної рівноваги, запишемо класичну модель термопружного деформування порожнинного циліндру при умові однорідності теплового навантаження вздовж осевого напрямку, та вважаючи, що осеві переміщення відсутні, у вигляді [1,2]:

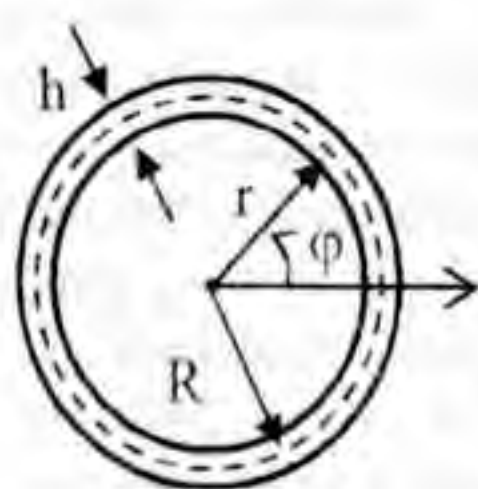


Рис. 1. Область D

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\sigma_r - \sigma_\varphi}{r} = 0, \\ \frac{\partial \sigma_{r\varphi}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{2}{r} \sigma_{r\varphi} = 0, \\ \varphi \in [0, 2\pi], r \in [R - h/2, R + h/2] \end{cases} \quad (1)$$

граничні умови:

$$\sigma_r|_{r=R \pm h/2} = 0, \sigma_{r\varphi}|_{r=R \pm h/2} = 0 \quad (2)$$

компоненти тензора деформацій в цьому випадку записуються через компоненти напружень [3]:

$$\begin{cases} \varepsilon_r = \frac{1-\nu^2}{E} \left( \sigma_r - \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_\varphi \right) + (1+\nu)\gamma\theta, \\ \varepsilon_\varphi = \frac{1-\nu^2}{E} \left( \sigma_\varphi - \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_r \right) + (1+\nu)\gamma\theta. \end{cases} \quad (3)$$

До розв'язку (1)-(2) необхідно додати однорідні осеві напруження  $\sigma_z^0$ , що знаходяться з умови:

$$\sigma_z^0 = - \iint_D [\nu(\sigma_r + \sigma_\varphi) - \gamma E \theta] ds / (2\pi R h) \quad (4)$$

де  $D$  - переріз циліндру (Рис.1). Додаткові напруження з виконанням (4) необхідні для забезпечення силової рівноваги на нескінченності. Матеріальні сталі задачі ( $E$  -

модуль Юнга та  $\nu$  - коефіцієнт розширення) вважаємо залежними від температури  $\theta$ ,  $\nu = \text{const}$  (коефіцієнт Пуассона). Вирази (1)-(4) необхідно доповнити початково-граничною задачею нестационарної теплопровідності [1,5] для визначення поля температури:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( k \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \right) \frac{1}{r^2} - \rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} = 0, \quad (5)$$

$$\varphi \in [0, 2\pi], r \in [R - h/2, R + h/2], t > 0$$

де  $\theta = \theta(r, \varphi, t)$  - розподіл температури,  $k = k(\theta)$  - коефіцієнт теплопровідності, з граничними:

$$\begin{cases} \theta \left( R - \frac{h}{2}, \varphi, t \right) = \bar{\theta}(\varphi) \\ \frac{\partial \theta}{\partial r} \left( R + \frac{h}{2}, \varphi, t \right) = 0 \end{cases}, \varphi \in [0, 2\pi], t \geq 0, \quad (6)$$

та початковими умовами:

$$\begin{aligned} \theta &= \theta(r, \varphi, 0) = 0 \\ \varphi &\in [0, 2\pi], r \in [R - h/2, R + h/2] \end{aligned} \quad (7)$$

Отже, за умовами моделі на внутрішній поверхні задається неосесиметричне розподілення температури, зовнішня поверхня вважається теплоізованою. Поверхні циліндру вільні від напружень, сили та згинаючі моменти на нескінченності відсутні.

#### Задача теплопровідності

Оскільки задачі визначення розподілу температури та термопружних напружень відокремлені, доцільно почати з розв'язання нестационарної задачі теплопровідності (5)-(7).

Завдяки залежності  $k = k(\theta)$ , задача є нелінійною. Приймаючи з фізичних міркувань, що

$$k = k_0 \left( 1 + \alpha \left( \frac{\theta}{\Theta} \right) \right), \alpha \ll 1 \quad (8)$$

та провівши обезрозмірення задачі по відношенню до  $\Theta$  (характерна температура),  $h/2$ ,  $\tau$  (характерний час:  $\tau = \rho c h^2 / (4k_0)$ ) та застосувавши перетворення Кіргфа [12-14]:

$$\begin{aligned} K(\theta) &= \int_0^\theta \alpha(\theta) d\theta \\ \psi(r, \varphi, t) &= \theta(r, \varphi, t) + K(\theta) \end{aligned} \quad (9)$$

отримаємо задачу:



$$\frac{1}{r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial K}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 K}{\partial \varphi^2}, \quad (10)$$

$$\begin{cases} \psi(\bar{R}-1, \varphi, t) = \bar{\psi}(\varphi), \\ \frac{\partial \psi}{\partial r}(\bar{R}+1, \varphi, t) = 0, \\ \psi(r, \varphi, 0) = 0, \end{cases}$$

$$\text{де } \bar{\psi}(r, \varphi, t) = \int_0^{\theta} \alpha(\theta) d\theta.$$

Для нелінійної задачі (10) може бути побудована ефективна ітераційна схема розв'язання, що враховує осесиметричність області. Будемо шукати розв'язок (10) в вигляді розвинення в ряд Фур'є (не зменшуючи загальності вважаємо  $\psi(r, \varphi, t) = \psi(r, -\varphi, t)$ ):

$$\begin{cases} \psi(r, \varphi, t) = \sum_{k=0}^{\infty} (\psi_k(r, t) + \bar{\psi}_k) \cos k\varphi, \\ K(\theta(r, \varphi, t)) = \sum_{k=0}^{\infty} K_k(r, t) \cos k\varphi, \\ \bar{\psi}(\varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{\psi}_k \cos k\varphi, \end{cases} \quad (11)$$

де для  $K(\theta)$  та інших функцій коефіцієнти розвинення знаходяться як:

$$\begin{cases} K_0(r, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\varphi \int_0^{\theta(r, \varphi, t)} \alpha(\theta) d\theta, \\ K_k(r, t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \cos k\varphi d\varphi \int_0^{\theta(r, \varphi, t)} \alpha(\theta) d\theta, k=1, 2, \dots \end{cases} \quad (12)$$

Отримаємо сукупність зв'язаних задач виду:

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi_k}{\partial r} \right) - \frac{k^2}{r^2} \psi_k - \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} K_k, \\ r \in [\bar{R}-1, \bar{R}+1], t > 0, \\ \begin{cases} \psi_k(\bar{R}-1, t) = 0, \\ \frac{\partial \psi_k}{\partial r}(\bar{R}+1, t) = 0, \end{cases} t > 0 \\ \psi_k(r, 0) = -\bar{\psi}_k, r \in [\bar{R}-1, \bar{R}+1] \\ k = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (13)$$

Після розв'язання (13), розподіл температури  $\theta$  можна поновити за допомогою зворотного перетворення Кіргофа.

Застосуємо до розв'язання (13) метод зв'язаних нев'язок в формі часткової дискретизації з апроксимацією:

$$\psi_k(r, t) = \sum_{i=1}^M \psi_{k,i}(t) \bar{N}_i(r) \quad (14)$$

що автоматично задовольняє однорідні граничні умови  $\bar{N}_i(\bar{R}-1) = 0 \vee \frac{\partial \bar{N}_i}{\partial r}(\bar{R}+1) = 0$  та перейдемо до слабкого формулювання використавши метод Гальоркіна [6,7,8] в рівнянні зв'язаних нев'язок:

$$\begin{aligned} \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} \left( \frac{\partial \psi_k}{\partial r} \frac{d\bar{N}_l}{dr} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi_k}{\partial r} \bar{N}_l + \frac{k^2}{r^2} \psi_k \bar{N}_l + \right. \\ \left. + \frac{\partial \psi_k}{\partial t} \bar{N}_l \right) dr = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} K_k \bar{N}_l dr \end{aligned} \quad (15)$$

Отримаємо ряд зв'язаних задач Коші виду:

$$\begin{cases} \mathbf{M} \frac{d\psi_k}{dt} + \mathbf{K}_k \psi_k = \mathbf{f}, \\ \psi_k(0) = -(\bar{\psi}_k)_0, k=0, 1, 2, 3, \dots, t > 0 \end{cases} \quad (16)$$

Використавши як базисні, тригонометричні функції  $N_i(x) = \sin(i-1/2)\pi x$ , в змінних  $x$  ( $\bar{N}_i(r) = N_i((r-\bar{R}+1)/2)$ ) маємо:

$$\begin{aligned} \psi_k^T &= \{\psi_{ki}\}_{i=1}^M, \mathbf{M} = \mathbf{E}, \mathbf{K}_k = \{K_{kli}\}_{l,i=1}^M, \\ \mathbf{f}_k^T &= \{f_{ke}\}_{e=1}^M, \\ K_{kli} &= 2 \int_0^1 \left\{ \frac{1}{4} \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_e}{dx} - \frac{1}{2x+\bar{R}-1} \frac{dN_i}{dx} N_e + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k^2}{(2x+\bar{R}-1)^2} N_i N_e \right\} dx, \end{aligned} \quad (17)$$

$$f_{ke} = 2 \frac{d}{dt} \int_0^1 K_k(2x+\bar{R}-1, t) N_e(x) dx.$$

Обернене перетворення Кіргофа може бути проведене методом простої ітерації за алгоритмом:



$$\begin{aligned}\theta^0 &= 0, \theta^1 = \psi, \\ \theta^{n+1} &= \psi - \int_0^{\theta^n} \alpha(x) dx, n = 1, 2, 3, \dots\end{aligned}\quad (18)$$

$$\begin{aligned}\theta_k^0 &= 0, \theta_k^1 = \psi_k, \\ \theta_k^{n+1} &= \theta_k^n - \frac{\alpha_0}{4} \sum_{\substack{i,j \\ i+j=n \\ |i-j|=k}} (\theta_i^n \theta_j^n - \theta_i^{n-1} \theta_j^{n-1})\end{aligned}\quad (21)$$

Умова  $0 \leq \alpha(x) < 1, \forall x \in [0, 1]$  є достатньою для збіжності процесу (18) в нормі  $L_2$ . Відповідно, коефіцієнти Фур'є знаходяться за ітераційною процедурою:

$$\begin{aligned}\theta_k^0 &= 0, \theta_k^1 = \psi_k, \\ \theta_k^{n+1} &= \theta_k^n - \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \cos k\varphi d\varphi \int_0^{\theta^n} \alpha(x) dx.\end{aligned}\quad (19)$$

Для конкретного виду  $\alpha(x)$ , процес обернення перетворення Кіргофа може бути спрощено. У випадку лінійної залежності ( $\alpha = \alpha_0 \theta$ ):

$$\psi = \theta + \frac{\alpha_0}{r} \theta^2 \text{ та } \psi_k = \theta_k + \frac{\alpha_0}{r} \sum_{\substack{i,j \\ i+j=k \\ |i-j|=1}} \theta_i \theta_j \quad (20)$$

Ітераційна процедура обернення набуває вигляду:

Компоненти тензора напружень частинного розв'язку мають вигляд:

$$\begin{aligned}\sigma_z(r, \varphi, t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_z(r, \varphi)_k(r, t) \cos k\varphi, \sigma_z(r, \varphi, t) = -\frac{E\gamma \theta_k(r, t)}{1-\nu} \\ \sigma_{r_k}(r, \varphi, t) &= \frac{E\gamma r^{-2-k}}{r(1-\nu)} \left\{ (1-k)r^{2k} \int_r^{\bar{R}+1} r^{1-k} \theta_k(r, t) dr - (1+k) \int_{\bar{R}-1}^r r^{1-k} \theta_k(r, t) dr \right\}, \\ \sigma_{r\varphi_k}(r, \varphi, t) &= -\frac{E\gamma r^{-2-k}}{r(1-\nu)} \left\{ (1-k)r^{2k} \int_r^{\bar{R}+1} r^{1-k} \theta_k(r, t) dr + (1+k) \int_{\bar{R}-1}^r r^{1+k} \theta_k(r, t) dr \right\}.\end{aligned}\quad (22)$$

Напруження (22) не задовольняють граничним умовам (2), але враховуючи накладені умови плоскої деформації, легко побудувати однорідний розв'язок для компенсації граничних напружень [1]. Функція напружень такого однорідного розв'язку має вигляд:

$$\begin{aligned}\phi(r, \varphi) &= \sum_{k=0}^{\infty} \phi_k(r) \cos k\varphi, \\ \phi_0(r) &= a_0 \ln r + b_0 r^2, \phi_1(r) = a_1 / r + b_1 r^3, \\ \phi_k(r) &= a_k r + b_k r^{-(k+2)} + a'_k r^{-k} + b'_k r^{-k+r}\end{aligned}\quad (23)$$

Коректність застосування методу простої ітерації до розв'язання нелінійної задачі (16)-(17) можна довести перевіряючи виконання умов теореми про нерухому точку [9-12].

### Знаходження напружень

Розв'язання неоднорідної задачі (1)-(3) зручно проводити виділивши неоднорідний розв'язок для термонпружного потенціалу [1] ( $u_r = \partial \chi / \partial r, u_\varphi = 1/r \partial \chi / \partial \varphi$  - компоненти вектора переміщень) з коефіцієнтами Фур'є:

$$\begin{aligned}\chi_0(r, t) &= -\beta \left\{ \ln r \int_{\bar{R}-1}^r r \theta_0(r, t) dr + \int_r^{\bar{R}+1} r \theta_0(r, t) \ln r dr \right\}, \\ \chi_k(r, t) &= -\frac{\beta}{rk} \left\{ r^k \int_r^{\bar{R}+1} \theta_k(r, t) r^{1-k} dr + \right. \\ &\quad \left. r^{-k} \int_{\bar{R}-1}^r \theta_k(r, t) r^{1+k} dr \right\},\end{aligned}$$

де

$$\beta = (1+\nu)/(1-\nu).$$

Задовольнивши вибором коефіцієнтів в (23) граничні умови (2) та врахувавши однорідні напруження (4) (для виконання умови рівноваги для нескінченного циліндру), можна отримати аналітичні вирази для перших коефіцієнтів Фур'є компонентів тензора напружень:

$$\frac{\sigma_{z_0}(r, t)}{\sigma_{z_0}} = \frac{1}{2\bar{R}} \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} r \theta_0(r, t) dr - \theta_0(r, t)$$



$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{r_0}(r,t)}{\sigma_{z_0}} &= \frac{1}{4\bar{R}r^2} \left\{ \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} r\theta_0(r,t)dr - \int_{\bar{R}-1}^r r\theta_0(r,t)dr \right\}, \\
 \frac{\sigma_{\varphi_0}(r,t)}{\sigma_{z_0}} &= \frac{1}{4\bar{R}r^2} \left\{ \left( (\bar{R}-1)^2 + r^2 \right) \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} r\theta_0(r,t)dr + 4\bar{R} \left( \int_{\bar{R}-1}^r r\theta_0(r,t)dr - r^2\theta_0(r,t) \right) \right\}, \\
 \frac{\sigma_{z_1}(r,t)}{\sigma_{z_0}} &= \frac{1}{\bar{R}(\bar{R}^2+1)} \left\{ r \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} r^2\theta_1(r,t)dr - \bar{R}(\bar{R}^2+1)\theta_1(r,t) \right\}, \\
 \frac{\sigma_{r_1}(r,t)}{\sigma_{z_0}} &= \frac{1}{4\bar{R}(\bar{R}^2+1)r^3} \left\{ \left( r^4 - (\bar{R}-1)^4 \right) \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} r^2\theta_1(r,t)dr - \bar{R}(\bar{R}^2+1) \int_{\bar{R}-1}^r r^2\theta_1(r,t)dr \right\}, \\
 \frac{\sigma_{\varphi_1}(r,t)}{\sigma_{z_0}} &= \frac{1}{4\bar{R}(\bar{R}^2+1)r^3} \left\{ \left( 3r^4 + (\bar{R}-1)^4 \right) \int_{\bar{R}-1}^{\bar{R}+1} r^2\theta_1(r,t)dr + \bar{R}(\bar{R}^2+1) \left( \int_{\bar{R}-1}^r r^2\theta_1(r,t)dr - r^3\theta_1(r,t) \right) \right\}.
 \end{aligned} \tag{24}$$

Для наступних коефіцієнтів Фур'є аналітичні вирази є громіздкими та не приводяться. Формули, приведені в (22), (24) виведені при умові лінеаризації модуля Юнга та коефіцієнту розширення відносно температури. Можна легко отримати вирази для напружень з врахуванням членів розкладу більш високого порядку (через громіздкість вони не приводяться хоча і використовуються при підрахунках в прикладі).

Суттєвим моментом задачі є лінійність задачі (1) - (2). І хоча задача (5) - (6) є нелінійною, після знаходження коефіцієнтів Фур'є температурного поля, коефіцієнтів Фур'є розподілу напружень можна розшукати підрахунком аналітичних виразів (24) (та подібних до них для  $k = 2, 3, \dots$ ).

#### Процедура знаходження розв'язку повної задачі

Повний розв'язок задачі можна отримати за наступним ітераційним алгоритмом:

1. Побудувати розв'язок лінійної задачі теплопровідності (16), (17) для використання в якості початкового наближення.
2. Побудувати обернення перетворення Кіргофа за (18).
3. Побудувати розподіл напружень, за формулами (24) (та подібними до них для наступних коефіцієнтів Фур'є) для даного наближення.
4. Знайти  $K_k(x,t)$ , скориставшись процедурою (18) (оскільки  $K_k = \psi_k - \theta_k$ ).
5. Перебудувати  $f_{kl}(t)$  згідно до (17).
6. Розв'язати лінійну задачу Коші (16) з правою частиною, знайденою в попередньому пункті. Для цього можна скористатись стандартним ме-

тодом, наприклад, скінченно-елементним методом.

7. Перевірити умову припинення ітерацій. Якщо воно не виконується, повернутись до описаної процедури, починаючи з пункту 2.

8. Виконати пункт 2 для знаходження розподілу температури та пункт 3 для знаходження напружень.

В результаті реалізації приведеного алгоритму, на кожній ітерації отримуємо наближений нестационарний розподіл температури та залежний від часу квазістатичний розподіл термонапружень.

В якості умови припинення ітерацій можна взяти умову для розв'язку задачі теплопровідності:  $\left| \psi^{(n+1)} - \psi^{(n)} \right| / \left| \psi^{(n)} \right| > \varepsilon$ .

#### Приклад

Як приклад реалізації алгоритму, приведеного в попередньому пункті, розв'яжемо важливу з практичної точки зору задачу про аналіз термонапруженого стану сегменту трубопроводу, що знаходячись в температурно стаціонарному стані піддається стрімкому секторальному охолодженню.

Прийmemo  $\alpha = \alpha_0 \theta$  ( $\alpha_0 = 0.3$ ),  $E = E_0 + \beta_0 \theta$  ( $\beta_0 = 0.1$ ). Параметр умови припинення ітерацій взято  $\varepsilon = 0.001$  (що відповідає в середньому 8 ітераціям). Задано граничний початковий розподіл температури згідно з моделлю охолодження сектору  $\pi/3$  (Рис. 2).

Згладження розподілу температури проведено для врахування фізичних процесів, пов'язаних з



конвективним теплообміном в тепловесучій рідині.

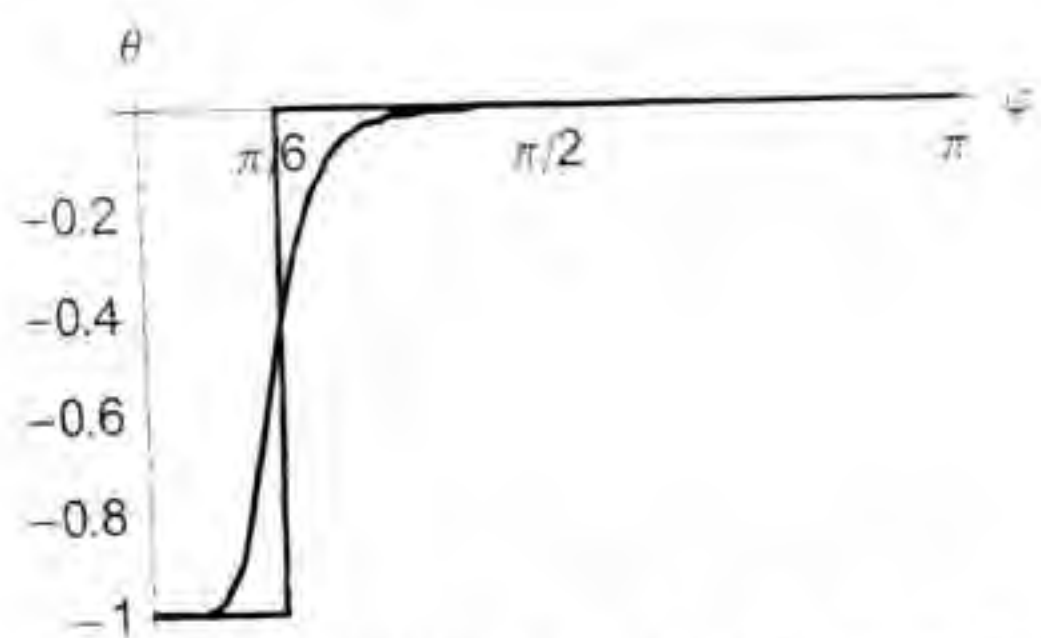


Рис. 2. Початковий граничний розподіл температури (сектор охолодження  $\pi/3$ )

Результати розрахунків проілюструємо на графіках.

На Рис. 3, Рис. 4 представлено характерний розподіл температури в перерізі  $\varphi=0$  по товщинній координаті для різних моментів часу (Рис. 3) та в радіальних перерізах в залежності від часу (Рис. 4). Якісний аналіз свідчить про автоматичне задовільнення граничним умовам та дає уяву про темп вирівнювання температури.

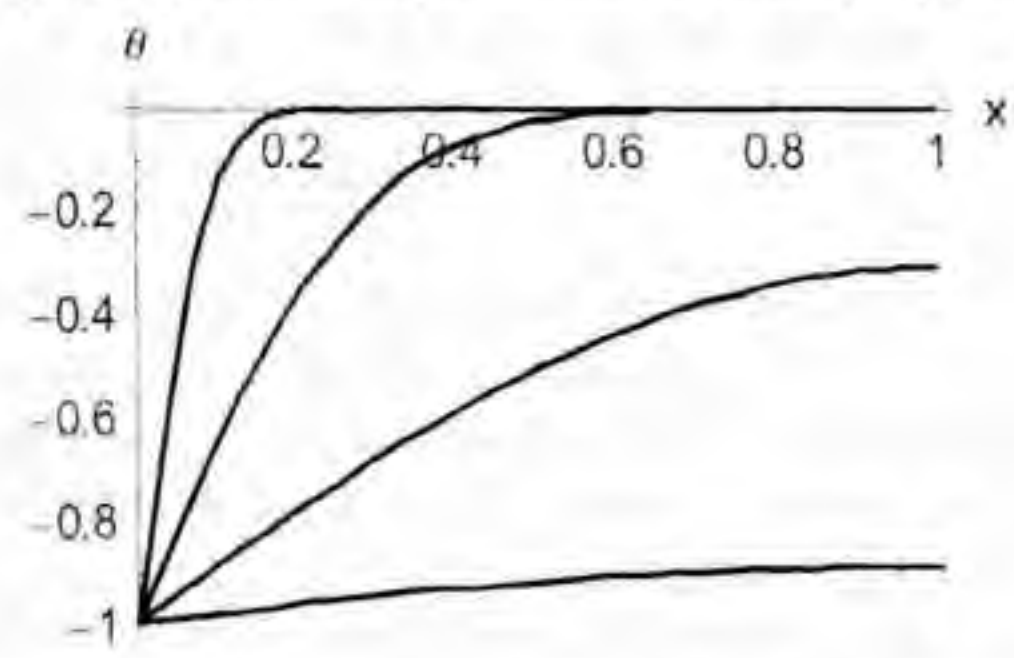


Рис. 3. Розподіл температури в перерізі  $\varphi=0$  для моментів часу  $t=0.01, 0.1, 1, 5$

На Рис. 5 представлено розподіл осьових напружень в перерізі  $\varphi=0$  по товщинній координаті для різних моментів часу. Бачимо, що максимальні розтягуючі напруження (для охолодження) виникають на внутрішній стінці в початкові моменти часу та потім зменшуються. Осьові напруження не зникають при вирівнюванні температури завдяки наявності градієнту температури по кутовій координаті.

На Рис. 6, Рис. 7 представлено кутовий розподіл осьових напружень на внутрішній (Рис. 6) та зовнішній (Рис. 7) стінках для різних моментів часу. Бачимо, що розтягуючі напруження в зоні сектора, що охолоджується компенсуються стискаючими напруженнями в протилежному секторі, що превалюють на зовнішній стінці.

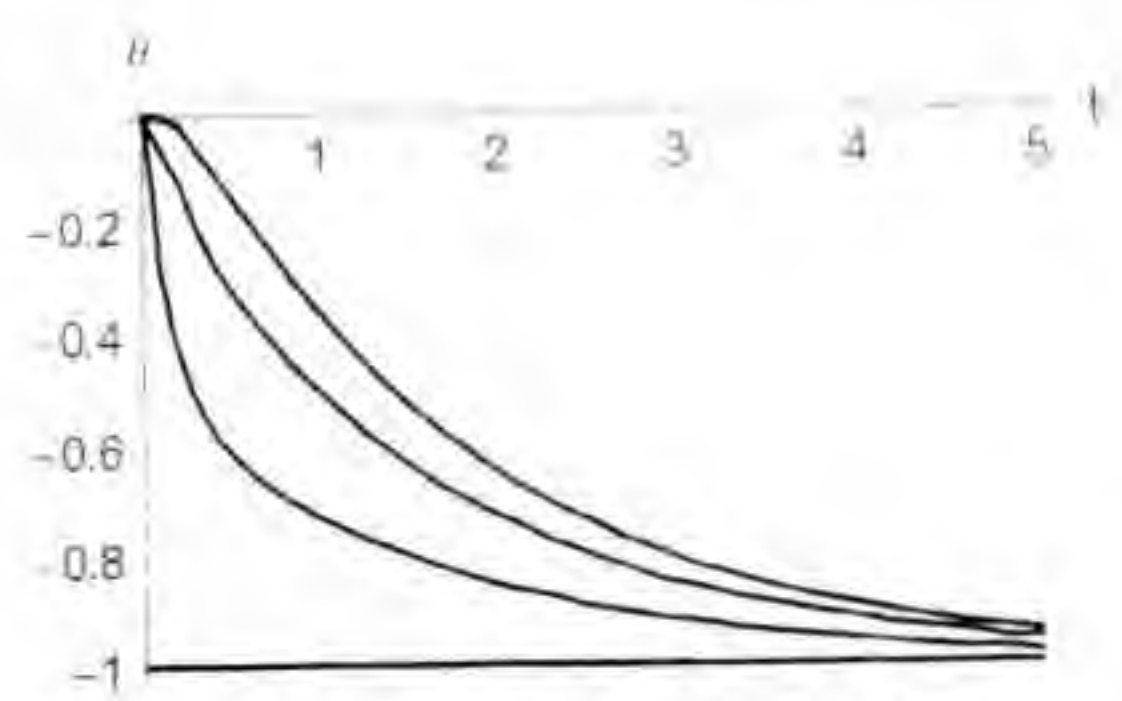


Рис. 4. Розподіл температури в перерізах  $x=0, 0.25, 0.5, 0.75$  в залежності від часу  $\sigma_z/\sigma_{z0}$

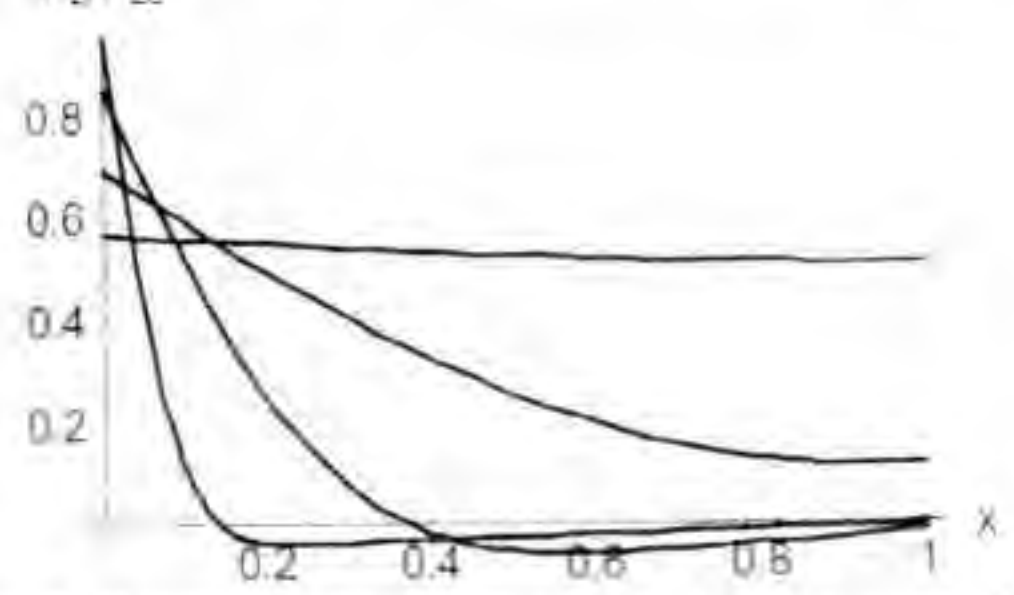


Рис. 5. Розподіл осьових напружень в перерізі  $\varphi=0$  для моментів часу  $t=0.01, 0.1, 1, 5$



Рис. 6. Кутовий розподіл осьових напружень на внутрішній стінці для моментів часу  $t=0.01, 0.1, 1, 5$



Рис. 7. Кутовий розподіл осьових напружень на зовнішній стінці для моментів часу  $t=0.01, 0.1, 1, 5$

На Рис. 8 представлено характерний розподіл осьових напружень в радіальних перерізах для  $\varphi=0$  в залежності від часу. Бачимо, що характер еволюції напружень в радіальних перерізах поза середнім є практично однаковим, отже з точки



зору магістрального руйнування активними та найбільш небезпечними є тріщини, що розташовуються в межах від середнього перерізу та особливо на внутрішній стінці.

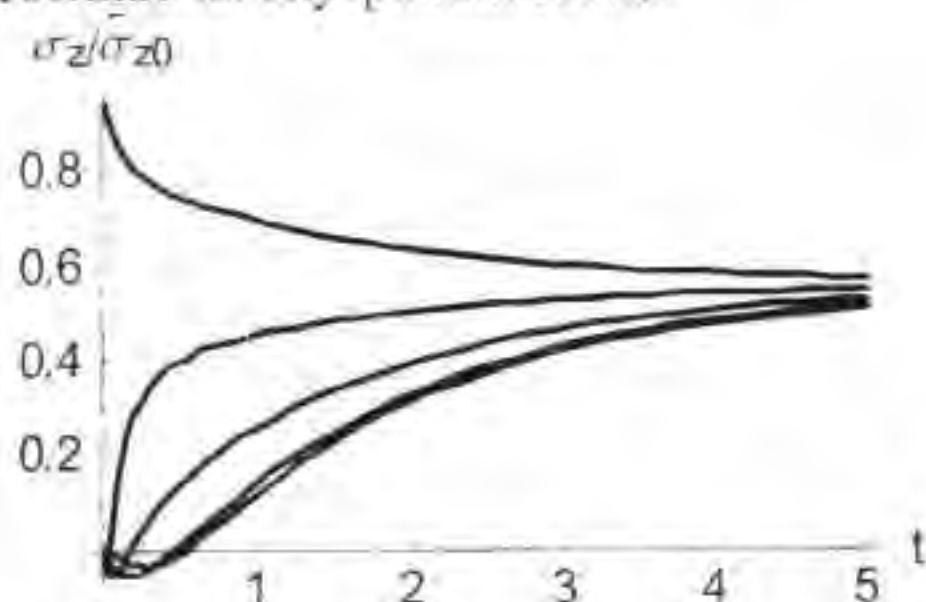


Рис. 8. Розподіл осьових напружень в перерізах  $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$  в залежності від часу

### Висновки

- Запропоновано ефективну чисельну процедуру для якісного та кількісного визначення розподілу температури та температурних напружень при нестационарному неосесиметричному тепловому навантаженні елементів конструкцій осесиметричної форми.
- Процедура є напіваналітичною та будується шляхом розщеплення граничної задачі за допомогою розкладу в ряд Фур'є. Використано метод Гальоркіна та метод часткової дискретизації в слабкому формулюванні для перетвореної за Кіргофом вихідної задачі.
- Перевагами запропонованої процедури є напіваналітична структура, що допускає аналітичний аналіз результатів, дозволяє контролювати точність як моделі (шляхом врахування додаткових членів ряду Фур'є) так і чисельних розрахунків завдяки структуруванню процедури.
- Процедура дозволяє враховувати нелінійність моделі, а лінійна модель слугує початковим наближенням.
- Значна частина розрахунків базується на точних та модельних аналітичних розв'язках, що дозволяє легко переконафігурувати модель: змінювати граничні умови, вводити джерела тепла, тощо. Окрім того, суттєво знижені вимоги до обчислювальних ресурсів.
- Проведено тестові розрахунки для стандартної моделі секторального охолодження, що підтвердили як якісну так і кількісну адекватність результатів (при порівнянні з модельними розв'язками лінійної задачі).

### Список використаних джерел

1. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высш. школа, 1967. – 527 с.
2. Новацкий В. Теория упругости. – М.: Мир, 1975. – 872 с.
3. Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости. – М.: Наука, 1975. – 575 с.
4. Кутателадзе С.С. Основы теории теплообмена (5-е изд.) – М.: Атомиздат, 1979. – 456 с.
5. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели термомеханики. – М.: Физматлит, 2002. – 465 с.
6. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – М.: Мир, 1986. – 318 с.
7. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. – М.: Мир, 1988. – 352 с.
8. Бреббия К., Теллес Ж., Вроубел Л. Методы граничных элементов. – М.: Мир, 1987. – 524 с.
9. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1976. – 527 с.
10. Heiko B., Kornhuber R., and Sander O. On Nonlinear Dirichlet-Neumann Algorithms for Jumping Nonlinearities // FU Berlin, FB Mathematik und Informatik, – 1998. – P. 1-8.
11. Alt H.W. and Luckhaus S. Quasilinear elliptic-parabolic differential equations // Math. Z. 1983. V183. – P.311-341.
12. Yuan Fa-rong and Wu Shan-li Transient temperature and residual stress field in axisymmetric metal components after hardening // Materials Science and Technology – 1985. – V 1. – P. 1-10.
13. Wrobel L. C. The dual reciprocity boundary element formulation for nonlinear diffusion problem, computer methods // Applied Mechanics and Engineering. – V65. – 1987. P.147- 165.
14. Bonani G. G. On the application of the kirchhoff transformation to the steady state thermal analysis of semiconductor devices with temperature dependent and piecewise inhomogeneous thermal conductivity // ESolid-State Electronic – 1995 – V 38. – N. 7. – P. 1409-1412.

Надійшла до редколегії 12.03.07



УДК 517.518

Олексій Ф. Калайда, к.ф.-м.н., доцент

## Симетричне двостороннє чисельне диференціювання функцій за допомогою чисельного інтегрування

За допомогою симетричних двосторонніх формул чисельного інтегрування побудовано відповідні симетричні двосторонні формули та алгоритми чисельного диференціювання.

Ключові слова: двосторонні, диференціювання, інтегрування.

E-mail: akalayda@i.com.ua

**1. Новий підхід до проблеми чисельного диференціювання.** Як відомо, формули чисельного диференціювання будуються диференціюванням відповідних колокант функцій. При цьому при надмірному згущенні сітки вузлів значно збільшується неусувна похибка, в чому й полягає причина некоректності задачі чисельного диференціювання. Тут для побудови формул чисельного диференціювання використаємо формулу Ньютона-Лейбніца

$$J(f'; a, b) = \int_a^b f'(x) dx = \Delta f(a) = f(b) - f(a) \quad (1)$$

а для наближеного обчислення інтеграла – відповідні квадратурні формули

$$J(f'; a, b) \approx \sum_{j=0}^m \kappa_j f'_j, f'_j = f'(x_j), x_j \in [a, b].$$

Так, наприклад, при використанні формул прямокутників (похибка  $O(H^2)$ ,  $H = b - a$ )

$J(f'; a, b) \approx (b - a)f'(a)$ ,  $J(f'; a, b) \approx (b - a)f'(b)$  з (1) дістаємо формули чисельного диференціювання (з похибкою  $O(H)$ ), відповідно,

$$f'(a) \approx \Delta f(a) / H, f'(b) \approx \Delta f(a) / H,$$

а при використанні формули середніх прямокутників (похибка  $O(H^3)$ )

$$J(f'; a, b) \approx Hf'(c), c = (a + b) / 2,$$

- формулу чисельного диференціювання

$$f'(c) \approx \Delta f(a) / H$$

(з похибкою  $O(H^2)$ ). І взагалі, з формули

$$J(f'; a, b) \approx Hf'(\zeta), \forall \zeta \in [a, b]$$

маємо формулу (з похибкою  $O(H)$  або  $O(H^2)$ )

$$f'(\zeta) \approx \Delta f(a) / H.$$

Цим локальні формули чисельного диференціювання (добуті за допомогою одновузлових квадратурних формул) без використання значень

O. F. Kalaida, cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor

## Symmetric two-sided numeral differentiation of functions by means numeral integration

By means symmetric two-sided formulas of numeral integration the proper symmetric two-sided formulas are built and algorithms numeral differentiation.

Key Words: two-sided, differentiation, integration.

похідної ще у якихось вузлах вичерпуються. При використанні ж багатовузлових квадратурних формул в локальному режимі (формули використовуються для усього відрізка інтегрування, тобто без його поділу на елементарні частини) для знаходження наближеного значення похідної в одному вузлі потрібно задати значення похідної у решті вузлах. При цьому, як видно з (1), при використанні квадратурної формули  $(m + 1)$ -го локального порядку матимемо формулу чисельного диференціювання  $m$ -го порядку (це проілюстровано на наведених вище прикладах). Так, наприклад, при використанні формули Сімпсона (локальна похибка  $O(h^5)$ ,  $h = H / 2$ )

$$J(f'; a, b) \approx h(f'(a) + 4f'(c) + f'(b)) / 3,$$

$$c = (a + b) / 2,$$

дістаємо формулу чисельного диференціювання (з двократними вузлами  $a, b$ , похибка  $O(h^4)$ )

$$f'(c) \approx (3\Delta f(a) / h - (f'(a) + f'(b))) / 4.$$

Цікаво, що при наближеній заміні в рівності (2) двох із трьох наявних в ній значень похідної відповідними трьохточковими формулами чисельного диференціювання [1] (з похибкою  $O(h^2)$ ) для третього чинника формули теж дістаємо відповідну трьохточкову формулу чисельного диференціювання.

Аналогічно за допомогою формули парабол

$$J(f', a, b) \approx H((2 - \mu)f'(a) + \quad (2)$$

$$+ (2 + \mu + \mu^{-1})f'(c) + (2 - \mu^{-1})f'(b)) / 6,$$

$$c \in (a, b), \mu = (c - a) / (b - c),$$

(при  $\mu = 1$  це формула Сімпсона, див. [1]) з похибкою  $O(H^3)$  дістаємо формулу чисельного диференціювання (з двократними вузлами  $a, b$ )

$$f'(c) \approx (6\Delta f(a) / H - (2 - \mu)f'(a) - (2 - \mu^{-1})f'(b)) / (2 + \mu + \mu^{-1}).$$

Цю формулу можна використовувати для квадратичної інтерполяції значень похідної у проміж-



них точках відрізка інтегрування (таблиця 1).

Більш загально, для чисельного диференціювання (для побудови формул чисельного диференціювання для похідних довільного порядку) використовуємо формулу Ньютона-Лейбніца

$$J(f^{(k+1)}; a, b) =$$

$$= \int_a^b f^{(k+1)}(x) dx = \Delta f^{(k)}(a) = f^{(k)}(b) - f^{(k)}(a), k \geq 0,$$

та, знову-таки, відповідні формули чисельного інтегрування. Крім того, з цієї рівності при  $k = -1$  при відомих значеннях первісної функції  $f$  в точках  $a, b$  маємо можливість у такий же спосіб знаходити наближення цієї функції (будувати так звані інтегрально-локальні [1] інтерполянти функції  $f$ ). У такий спосіб можемо послідовно знаходити наближення похідних першого, другого і т.д. порядків. Але при цьому традиційно буде, відповідно, понижуватись і порядок точності апроксимації. Щоб уникнути цього, скористаємось формулою

$$\frac{1}{(k-1)!} \int_c^x (x-s)^{k-1} f^{(k)}(s) ds =$$

$$= f(x) - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(x-c)^j}{j!} f^{(j)}(c), c, x \in [a, b],$$

та, знову ж таки, відповідними спеціальними для даного інтеграла формулами чисельного інтегрування (добутими шляхом інтерполяції похідної  $f^{(k)}(s)$  многочленом Лагранжа та інтегрування результату). Тоді дістанемо безпосередньо наближення цієї похідної з потрібним порядком точності. Так, при  $c = a, x = b$  та лінійному многочлені Лагранжа з даної формули дістаємо наближену рівність (похибка  $O(kH^{k+2}/(2(k+2)!))$ ,  $H = b - a$ )

$$\frac{H^k}{(k+1)!} (kf^{(k)}(a) + f^{(k)}(b)) \approx$$

$$\approx f(b) - f(a) - \sum_{j=1}^{k-1} f^{(j)}(a) \frac{H^j}{j!},$$

з якої з похибкою, відповідно,  $O(H^2/(2(k+2)))$  та  $O(kH^2/(2(k+2)))$  знаходимо наближення  $f^{(k)}(a)$  або  $f^{(k)}(b)$ .

Нарешті, зауважимо, що при використанні у цих побудовах двосторонніх формул чисельного інтегрування [2, 3]

$$J(f'; a, b) \approx \kappa_0 f'_0 (1 \pm \varepsilon) +$$

$$+ \sum_{j=1}^{m-1} \kappa_j f'_j + \kappa_m f'_m (1 \mp \varepsilon), f'_j = f'(x_j), x_j \in [a, b],$$

в такий спосіб дістанемо двосторонні формули чисельного диференціювання. Так, при використанні двосторонніх формул, відповідних формулі (2) чисельного інтегрування дістаємо результат, наведений у таблиці 1.

Таблиця 1

Нез. змінна, похибки двосторонніх наближень, їх сер. арифм., виїмка абс. похибки та похибка за формулою  $df(x)/dx \approx (f(x+h) - f(x-h))/2h$  ( $f(x) = e^x$ , параметр двосторонності  $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-2}$ )

|      |             |             |             |
|------|-------------|-------------|-------------|
| 0.02 | -3.44930E-4 | 3.28163E-4  | -8.38356E-6 |
|      | -3.36547E-4 | 3.15078E-2  |             |
| 0.03 | -4.49087E-4 | 4.34349E-4  | -7.36917E-6 |
|      | -4.41718E-4 | 2.12546E-2  |             |
| 0.04 | -5.09068E-4 | 5.00573E-4  | -4.24769E-6 |
|      | -5.04820E-4 | 1.08984E-2  |             |
| 0.05 | -5.25909E-4 | 5.25800E-4  | -5.47602E-8 |
|      | -5.25855E-4 | 4.38084E-4  |             |
| 0.06 | -5.00657E-4 | 5.08984E-4  | 4.16357E-6  |
|      | -5.04820E-4 | -1.01274E-2 |             |
| 0.07 | -4.34367E-4 | 4.49069E-4  | 7.35076E-6  |
|      | -4.41718E-4 | -2.07990E-2 |             |
| 0.08 | -3.28107E-4 | 3.44987E-4  | 8.43964E-6  |
|      | -3.36547E-4 | -3.15779E-2 |             |

Далі розглянемо способи застосування даного методу чисельного диференціювання до довільної системи вузлів на відрізку.

**2. Нелокальні формули чисельного диференціювання (сплайнове чисельне диференціювання за допомогою чисельного інтегрування).** Записавши наближені формули чисельного диференціювання, утворені з рівності (1) за допомогою симетричних квадратурних формул закритого типу по заданій системі квадратурних вузлів, для кожного вузла на відрізку чисельного диференціювання, дістанемо недовизначені системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно двосторонніх наближених значень похідної у вузлах відрізка диференціювання. Для замикання даних систем до цілком визначених систем можна або задати значення похідної у відповідній кількості межових вузлів, або виразити у цих вузлах значення похідної за допомогою традиційних формул чисельного диференціювання відповідного порядку, або апроксимувати ці значення многочленом Лагранжа відповідного порядку або, нарешті, використати ще відповідну кількість двосторонніх квадратурних формул того ж або вищого порядку (наприклад, при застосуванні в усіх вузлах двосторонніх формул Ньютона-Котеса з непарною кількістю вузлів використати ще відповідну кількість разів двоісторонні формули того ж порядку з парною кіль-



кістю вузлів). Нижче наведено результати чисельних експериментів у названих чотирьох випадках (відповідно, таблиці 2 – 5) при застосуванні формули (2) (у четвертому випадку використано двосторонні формули 3/8-х у двох прилежних вузлах). У стовпчиках цих таблиць наведено, відповідно, значення не залежної змінної, похибки двосторонніх наближень, їх середнє арифметичне, вики абсолютної похибки та похибки за формулою

$$df(x)/dx \approx (f(x+h) - f(x-h))/2h.$$

Таблиця 2

(функція  $x \mapsto e^x$ , на відрізку  $[0, 1]$  вузлів 101, крок  $h = 0.01$ , параметр двосторонності  $\varepsilon = 10^{-5}$ )

|      |           |          |            |           |          |
|------|-----------|----------|------------|-----------|----------|
| 0.10 | -3.690E-8 | 3.678E-8 | -6.140E-11 | -3.684E-8 | 1.842E-5 |
| 0.25 | -4.287E-8 | 4.273E-8 | -7.134E-11 | -4.280E-8 | 2.140E-5 |
| 0.50 | -5.505E-8 | 5.487E-8 | -9.159E-11 | -5.496E-8 | 2.748E-5 |
| 0.75 | -7.068E-8 | 7.045E-8 | -1.176E-10 | -7.057E-8 | 3.528E-5 |
| 0.95 | -8.587E-8 | 8.559E-8 | -1.429E-10 | -8.573E-8 | 4.310E-5 |

Таблиця 3

(функція  $x \mapsto e^x$ , вузлів 101, крок  $h = 0.01$ , параметр двосторонності  $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-5}$ )

|      |            |           |             |            |           |
|------|------------|-----------|-------------|------------|-----------|
| 0.01 | -8.528E-8  | 8.513E-8  | -7.521E-11  | -8.520E-8  | 1.6834E-5 |
| 0.10 | -7.374E-8  | 7.362E-8  | -6.140E-11  | -7.368E-8  | 1.842E-5  |
| 0.20 | -8.1495E-8 | 8.1359E-8 | -6.7857E-11 | -8.1427E-8 | 2.0357E-5 |
| 0.30 | -9.0066E-8 | 8.9916E-8 | -7.4983E-11 | -8.9991E-8 | 2.2498E-5 |
| 0.40 | -9.9538E-8 | 9.9372E-8 | -8.2871E-11 | -9.9455E-8 | 2.4864E-5 |
| 0.50 | -1.1001E-7 | 1.0982E-7 | -9.1575E-11 | -1.0991E-7 | 2.7479E-5 |
| 0.60 | -1.2158E-7 | 1.2137E-7 | -1.0122E-10 | -1.2147E-7 | 3.0369E-5 |
| 0.70 | -1.3436E-7 | 1.3414E-7 | -1.1188E-10 | -1.3425E-7 | 3.3563E-5 |
| 0.80 | -1.4849E-7 | 1.4825E-7 | -1.2363E-10 | -1.4837E-7 | 3.7093E-5 |
| 0.90 | -1.6411E-7 | 1.6384E-7 | -1.3663E-10 | -1.6397E-7 | 4.0994E-5 |
| 0.99 | -2.2815E-7 | 2.2779E-7 | -1.7898E-10 | -2.2797E-7 | 4.4854E-5 |

Таблиця 4

(функція  $x \mapsto \exp(x^2)$ , вузлів 21, крок  $h = 0.01$ , параметр двосторонності  $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-5}$ )

|      |            |           |            |
|------|------------|-----------|------------|
| 1.01 | -2.8945E-6 | 2.7268E-6 | -8.3873E-8 |
|------|------------|-----------|------------|

|            |                                 |
|------------|---------------------------------|
| -2.8106E-6 | 9.4132E-4                       |
| 1.05       | -3.2766E-6 3.1584E-6 -5.9067E-8 |
| -3.2175E-6 | 1.0974E-3                       |
| 1.10       | -3.8974E-6 3.7497E-6 -7.3848E-8 |
| -3.8236E-6 | 1.3330E-3                       |
| 1.15       | -4.2252E-6 4.0403E-6 -9.2435E-8 |
| -4.1327E-6 | 1.6243E-3                       |
| 1.19       | 7.7517E-5 -7.7595E-5 -3.9041E-8 |
| 7.7556E-5  | 1.9069E-3                       |

Таблиця 5

(функція  $x \mapsto \sin x$ , вузлів 101, крок  $h = 0.05$ , параметр двосторонності  $\varepsilon = 10^{-3}$ )

|      |            |            |             |            |            |
|------|------------|------------|-------------|------------|------------|
| 0.10 | -1.9906E-6 | 1.7939E-6  | -9.8361E-08 | -1.8923E-6 | -4.1453E-4 |
| 0.50 | -8.0212E-6 | 7.9597E-6  | -3.0726E-08 | -7.9904E-6 | -3.6561E-4 |
| 1.00 | -1.4043E-5 | 1.4006E-5  | -1.8916E-08 | -1.4025E-5 | -2.2510E-4 |
| 1.50 | -1.6627E-5 | 1.6622E-5  | -2.4765E-09 | -1.6625E-5 | -2.9470E-5 |
| 2.00 | -1.5140E-5 | 1.5170E-5  | 1.4569E-08  | -1.5155E-5 | 1.7337E-4  |
| 2.50 | -9.9465E-6 | 1.0003E-5  | 2.8048E-08  | -9.9745E-6 | 3.3377E-4  |
| 3.00 | -2.3173E-6 | 2.3867E-6  | 3.4660E-08  | -2.3520E-6 | 4.1245E-4  |
| 3.50 | 5.8792E-6  | -5.8136E-6 | 3.2786E-08  | 5.8464E-6  | 3.9014E-4  |
| 4.00 | 1.2636E-5  | -1.2590E-5 | 2.2884E-08  | 1.2613E-5  | 2.7232E-4  |
| 4.50 | 1.6300E-5  | -1.6285E-5 | 7.3790E-09  | 1.6292E-5  | 8.7821E-5  |
| 4.90 | 1.9332E-5  | -1.9374E-5 | -2.1438E-08 | 1.9353E-5  | -7.7704E-5 |

На завершення зауважимо, що вибір параметра двосторонності наближень здійснюється за умови знакосталості вики двосторонніх наближень.

#### Список використаних джерел

1. Калайда О.Ф. Чисельні методи. – Київ: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2000. – 250 с.
2. Калайда О.Ф. Симетричні двосторонні наближення функцій, похідних та інтегралів //Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - Вип. № 3. 2003. – С. 107 – 109.
3. Калайда О.Ф. Двосторонні симетричні наближення функцій, похідних та інтегралів та розв'язків інтегральних рівнянь, диференціальних та інтегро-диференціальних задач //Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. Вип. № 4. 2005. – С. 77 – 83.

Надійшла до редколегії 11.12.2006



УДК 517.9

Олексій В. Капустян, к.ф.-м.н., доцент,  
Хосе Валеро, д. ф.-м.н., професор

## Існування неперервного розв'язку для однієї тривимірної системи гідродинаміки

В роботі доведено існування в сильній топології фазового простору неперервних по часу розв'язків для тривимірної системи Бенара.

Ключові слова: система Бенара, неперервний розв'язок.

E-mail: alexkap@univ.kiev.ua, jvalero@umh.es

### 1 Вступ

В роботі досліджується тривимірна система Бенара, що складається з тривимірної системи Нав'є-Стокса і нелінійного параболічного рівняння. Ця система є добре відомою моделлю в гідродинаміці, що описує швидкість, тиск і температуру в'язкої нестислої рідини [1]. Існування, єдиність та неперервність розв'язків для двовимірної системи Бенара було доведено в [2]. Основними проблемами при дослідженні відповідної тривимірної системи, так само, як і для тривимірної системи рівнянь Нав'є-Стокса [3], є відсутність результатів щодо неперервності слабких розв'язків і щодо єдиності розв'язку задачі Коші. В даній роботі ця проблема частково вирішується в наступному сенсі: доведено існування розв'язку  $\{u(t), w(t)\}$ , такого, що  $w(\cdot) \in C([0, T]; L^2(\Omega))$ .

### 2 Постановка задачі

На множині  $(0, T) \times \Omega$  розглядається задача

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u + (u \nabla) u + \xi \omega = f(t) - \nabla p \\ \operatorname{div} u = 0, \\ u|_{\partial \Omega} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} - \Delta \omega + (u \nabla) \omega = g(t) \\ \omega|_{x \in \partial \Omega} = 0, \end{cases} \quad (2)$$

де  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  - обмежена область з гладкою границею,  $\nu > 0$ ,  $\xi \in \mathbb{R}^3$  - константи,

$f: \mathbb{R} \times \Omega \mapsto \mathbb{R}^3$ ,  $g: \mathbb{R} \times \Omega \mapsto \mathbb{R}$  - задані функції,

$u \nabla = \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ . Введемо стандартні простори

O.V. Kapustyan, C.Sci(Phys-Math.), Ass.Prof,  
J. Valero, D.Sci(Phys-Math.), Full Professor

## Existence of continuous solution for some 3D system in hydrodynamics

In the paper the existence of continuous solutions in strong topology of the phase space for 3D Benard system is proved.

Key Words: Benard system, continuous solution.

$$Y = \{u \in (C_0^\infty(\Omega))^3 \mid \operatorname{div} u = 0\},$$

$$H = cl_{(L^2(\Omega))^3} Y, \quad V = cl_{(H_0^1(\Omega))^3} Y$$

Тоді  $H$  і  $V$  є сепарабельними гільбертовими просторами [3].  $V \subset H \subset V^*$ . Позначимо  $(\cdot, \cdot)$ ,  $((\cdot, \cdot))$  скалярний добуток в  $H$  і  $V$  відповідно. Ці самі позначення залишимо і для скалярних добутків в просторах  $L^2(\Omega)$  і  $H_0^1(\Omega)$ . Через  $\|\cdot\|$  позначатимемо норму в просторах  $H$ ,  $L^2(\Omega)$ , і через  $\|\cdot\|_V$  і  $\|\cdot\|_{H^1}$  - норми в просторах  $V$  і  $H_0^1(\Omega)$ . Нехай  $H_w$ ,  $L_w^2(\Omega)$  - простори  $H$ ,  $L^2(\Omega)$  зі слабкою топологією. Для  $u, v, w \in V$  покладемо

$$b(u, v, w) = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^3 u_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} w_i dx. \text{ Відомо [3], що } b \text{ є}$$

трилінійною неперервною формою на  $V$  і для всіх  $u, v \in V$   $b(u, v, v) = 0$ . Для  $u, v \in V$  позначимо через  $B(u, v)$  елемент простору  $V^*$ , означений рівністю  $\langle B(u, v), w \rangle_V = b(u, v, w) \quad \forall w \in V$ . Далі, для  $u \in V, v, w \in H_0^1(\Omega)$  покладемо

$$c(u, v, w) = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^3 u_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} w_i dx. \text{ Легко показати, що}$$

$$c(u, v, v) = 0, \quad \text{якщо } u \in V, v \in H_0^1(\Omega). \text{ Для}$$

$u \in V, v \in H_0^1(\Omega)$  позначимо через  $C(u, v)$  елемент простору  $(H_0^1(\Omega))^*$ , для якого  $\langle C(u, v), w \rangle_{H_0^1} = c(u, v, w) \quad \forall w \in H_0^1(\Omega)$ . Тоді якщо

$A_1: V \mapsto V^*$ ,  $A_2: H_0^1(\Omega) \mapsto (H_0^1(\Omega))^*$  - лінійні оператори, породжені білінійними формами  $\langle A_1 u, v \rangle_V = ((u, v))$ ,  $\langle A_2 \omega, \bar{v} \rangle_{H_0^1} = ((\omega, \bar{v}))$ , то задача

(1),(2) може бути переписана в операторній формі



$$\frac{du}{dt} + \nu A_1 u + B(u, u) + \xi \omega = f \quad \text{в } V^* \quad (3)$$

$$\frac{d\omega}{dt} + A_2 \omega + C(u, \omega) = g \quad \text{в } (H_0^1(\Omega))^* \quad (4)$$

Будемо казати, що пара функцій  $\{u, \omega\} \in (L^2(0, T; V) \cap L^\infty(0, T; H)) \times (L^2(0, T; H_0^1(\Omega) \cap L^\infty(0, T; L^2(\Omega)))$  є слабким розв'язком (1),(2) на  $(0, T)$ , якщо для всіх  $v \in V, \tilde{v} \in H_0^1(\Omega)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(u, v) + \nu((u, v)) + b(u, u, v) + (\xi \omega, v) &= (f, v) \\ \frac{d}{dt}(\omega, \tilde{v}) + ((\omega, \tilde{v})) + c(u, \omega, \tilde{v}) &= (g, \tilde{v}) \end{aligned} \quad (5)$$

в сенсі скалярних розподілів на  $(0, T)$ . Якщо  $f \in L^2(0, T; V^*)$ ,  $g \in L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$  і  $\{u, \omega\}$  задовольняють (5), то  $\{u, \omega\}$  належить  $C([0, T], V^*) \times C([0, T], (H_0^1(\Omega))^*)$ . Тоді з вкладення  $\{u, \omega\} \in L^\infty(0, T; H) \times L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$  маємо  $u \in C([0, T], H_w) \times C([0, T], L_w^2(\Omega))$ . Це означає, що задача Коші для (1),(2) може бути поставленою для  $u_0 \in H, \omega_0 \in L^2(\Omega)$ . З іншого боку, для таких правих частин  $f, g$

$$B(u, u) \in L^{\frac{4}{3}}(0, T; V^*), \quad C(u, \omega) \in L^{\frac{4}{3}}(0, T; (H_0^1(\Omega))^*),$$

отже,  $\frac{du}{dt} \in L^{\frac{4}{3}}(0, T; V^*), \quad \frac{d\omega}{dt} \in L^{\frac{4}{3}}(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$ , і,

$$\text{крім того, } \{u, \omega\} \in L^{\frac{8}{3}}(0, T; (L^4(\Omega))^4).$$

Мета роботи - за додаткової умови  $g \in L^4(0, T; L^4(\Omega))$  довести, що існує слабкий розв'язок  $\{u(t), \omega(t)\}$  такий, що  $\omega(\cdot) \in C([0, T]; L^2(\Omega))$ .

### 3 Основні результати

Існування слабого розв'язку задачі (1),(2) встановлюється методом гальоркінських апроксимацій аналогічно тому, як це робиться для 3D системи Нав'є-Стокса [3]. Точніше, справедлива

**Лема 1.** Нехай  $f \in L^2(0, T; H)$ ,  $g \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ . Тоді для довільних  $\{u_0, \omega_0\} \in H \times L^2(\Omega)$  і  $T > 0$  задача (1),(2) має принаймні один слабкий розв'язок  $\{u, \omega\}$  на  $(0, T)$  такий, що  $u(0) = u_0, \omega(0) = \omega_0$ .

Доведення основного результату буде ґрунтуватись на наступній властивості

трилінійної форми  $c$ .

**Лема 2.** Для  $v \in V, w \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  маємо  $c(v, w, w^3) = 0$  і  $w^3 \in H_0^1(\Omega)$ , отже

$$\langle C(v, w), w^3 \rangle_{H_0^1} = c(v, w, w^3) = 0. \quad (6)$$

*Доведення.* Нехай  $w \in C^\infty(\bar{\Omega}), v \in Y$ . Для таких функцій трилінійна форма  $c$  є коректно означеною і

$$\begin{aligned} c(v, w, w^3) &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial w}{\partial x_i} w^3 dx = \\ &= - \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 w \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i w^3) dx = - \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^3 w w^3 \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dx - \\ &= 3 \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial w}{\partial x_i} w^3 dx = -3c(v, w, w^3). \end{aligned}$$

Оскільки  $Y$

щільна в  $V$ ,  $C^\infty(\bar{\Omega})$  щільна в  $H^2(\Omega)$  і вкладення  $H^2(\Omega) \subset L^\infty(\Omega)$  є неперервним, залишилося перейти до границі. Зауважимо також, що з включення  $w \in H^2(\Omega)$  випливає  $w \in L^\infty(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ , отже  $w^3 \in H^1(\Omega)$ . Легко бачити, що  $w^3 \in H_0^1(\Omega)$  і виконується (6). Лема доведена.

Основним результатом роботи є наступна

**Теорема.** Нехай  $f \in L^2(0, T; H)$ ,  $g \in L^4(0, T; L^4(\Omega))$ . Тоді для довільних  $\{u_0, \omega_0\} \in V \times H_0^1(\Omega)$  існує слабкий розв'язок  $\{u, \omega\}$  задачі (1),(2), для якого

$$u \in C([0, T], H_w) \cap L^\infty(0, T; H) \cap L^2(0, T; V) \quad (7)$$

$$\omega \in C([0, T], L^2(\Omega)) \cap C([0, T], L_w^4(\Omega)) \cap L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \quad (8)$$

$$\frac{du}{dt} \in L^{\frac{4}{3}}(0, T; V^*), \quad \frac{d\omega}{dt} \in L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*) \quad (9)$$

*Доведення*

Для фіксованої абсолютно неперервної функції  $v: [0, T] \rightarrow V$  розглянемо допоміжні задачі

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} + \nu A_1 u + B(v, u) + \xi \omega = f \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{cases} \frac{d\omega}{dt} + A_2 \omega + C(v, \omega) = g \\ \omega(0) = \omega_0 \end{cases} \quad (11)$$

$$\text{де } f \in W^{1,2}(0, T; H), \quad g \in W^{1,4}(0, T; L^4(\Omega)).$$

Доведемо, що для довільних  $u_0 \in V, \omega_0 \in H_0^1(\Omega)$  існує єдиний слабкий розв'язок  $\{u, \omega\}$  задачі



(10),(11). Крім того,  $u: [0, T] \rightarrow V$ ,  
 $\omega: [0, T] \rightarrow H_0^1(\Omega)$  є абсолютно неперервними,  
 $\frac{du}{dt} \in L^2(0, T; V^*)$ ,  $\frac{d\omega}{dt} \in L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$  і для  
всіх  $t \in [0, T]$  виконуються нерівності

$$\|u(t)\|^2 + \nu \int_0^t \|u(r)\|_V^2 dr \leq \|u_0\|^2 + \frac{2}{\nu \lambda_1} \int_0^t \|f(r)\|^2 dr +$$

$$+ \frac{2|\xi|^2 T}{\nu \lambda_1} (\|\omega_0\|^2 + \frac{1}{\lambda_1} \int_0^t \|g(p)\|^2 dp) =: K_1^2 \quad (12)$$

$$\|\omega(t)\|_{L^4(\Omega)}^4 \leq \|\omega_0\|_{L^4(\Omega)}^4 e^{3T} +$$

$$+ \int_0^t e^{3(T-r)} \|g(r)\|_{L^4(\Omega)}^4 dr =: K_2^4 \quad (13)$$

$$\|\omega(t)\|^2 + \int_0^t \|\omega(p)\|_{H^1}^2 dp \leq$$

$$\leq \|\omega_0\|^2 + \frac{1}{\lambda_1} \int_0^t \|g(p)\|^2 dp =: K_3^2 \quad (14)$$

де  $\lambda_1$  - мінімальне серед власних чисел  $A_1$  і  $A_2$ .  
Для цього використаємо гальоркінські  
апроксимації. Нехай  $\{w_i\} \subset D(A_1)$ ,  $\{\tilde{w}_i\} \subset D(A_2)$  -  
власні функції відповідних операторів, що  
утворюють ортонормовані базиси в просторах  $H$   
і  $L^2(\Omega)$  відповідно. Нехай  $u^m(t) = \sum_{i=1}^m g_{im}(t) w_i$ ,  
 $\omega^m(t) = \sum_{i=1}^m \tilde{g}_{im}(t) \tilde{w}_i$  - гальоркінські апроксимації  
(10),(11), тобто

$$\frac{du^m}{dt} + \nu A_1 u^m + P_m B(v, u^m) + \xi \omega^m = P_m f,$$

$$u^m(0) = u_0^m \quad (15)$$

$$\frac{d\omega^m}{dt} + A_2 \omega^m + \tilde{P}_m C(v, \omega^m) = \tilde{P}_m g,$$

$$\omega^m(0) = \omega_0^m \quad (16)$$

де  $P_m$ ,  $\tilde{P}_m$  - проектори на скінченновимірні  
підпростори, що породжуються наборами  
 $\{w_1, \dots, w_m\}$  і  $\{\tilde{w}_1, \dots, \tilde{w}_m\}$ . Тоді стандартно [3]  
отримуємо що  $u^m, \omega^m$  задовольняють оцінки  
(12),(14). Отже,  $u^m$  обмежені в  
 $L^\infty(0, T; H) \cap L^2(0, T; V)$ ,  $\omega^m$  обмежені в  
 $L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ . Крім того,  
помноживши (15) на  $A_1 u^m$ , (16) - на  $A_2 \omega^m$ , з  
леми Гронуола отримуємо, що послідовність  
 $\{u^m, \omega^m\}$  обмежена в  $L^\infty(0, T; V) \times L^\infty(0, T; H_0^1(\Omega))$  і  
в  $L^2(0, T; D(A_1)) \times L^2(0, T; H^2(\Omega))$ . Тоді легко  
показати, що  $\exists d_1 > 0 \quad \forall h > 0, \quad \forall m \geq 1$

$$\|u^m(t+h) - u^m(t)\|_V^2 + \|\omega^m(t+h) - \omega^m(t)\|_{H^1}^2$$

$$\leq d_1 (\|u^m(h) - u^m(0)\|_V^2 + \|\omega^m(h) - \omega^m(0)\|_{H^1}^2) \quad (17)$$

$$+ \int_0^t (\|f(s+h) - f(s)\|^2 + \|g(s+h) - g(s)\|^2 +$$

$$+ \|v(s+h) - v(s)\|_V^4) ds$$

Оскільки  $b(v, u^m, w) = -b(v, w, u^m)$  для  $w \in V$ ,  
 $c(v, \omega^m, \tilde{w}) = -c(v, \tilde{w}, \omega^m)$  для  $\tilde{w} \in H_0^1(\Omega)$ , то з  
нерівності Гельдера

$$|b(v, u^m, w)| \leq d_2 \|v\|_{(L^4(\Omega))^3} \|u^m\|_{(L^4(\Omega))^3} \|w\|_V,$$

$$|c(v, \omega^m, \tilde{w})| \leq d_3 \|v\|_{(L^4(\Omega))^3} \|\omega^m\|_{L^4(\Omega)} \|\tilde{w}\|_{H^1}$$

Тоді з попередніх міркувань випливає

$$\|P_m B(v, u^m)\|_{L^\infty(0, T; V^*)} \leq d_4,$$

$$\|\tilde{P}_m C(v, \omega^m)\|_{L^\infty(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)} \leq d_5.$$

З цих нерівностей зокрема маємо, що  $\frac{du^m}{dt}, \frac{d\omega^m}{dt}$   
є обмеженими в  $L^2(0, T; V^*)$ ,  $L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$   
відповідно. З одержаних нерівностей і леми про  
компактність виводимо, що по підпослідовності  
 $\{u^m, \omega^m\}$  збігається до деякої функції  $\{u, \omega\}$  слабо  
в  $L^2(0, T; D(A_1)) \times L^2(0, T; H^2(\Omega))$  і сильно в  
 $L^2(0, T; V) \times L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ . Крім того,  
послідовність  $\left\{ \frac{du^m}{dt}, \frac{d\omega^m}{dt} \right\}$  збігається до

$\left\{ \frac{du}{dt}, \frac{d\omega}{dt} \right\}$  слабо в  $L^2(0, T; V^*) \times L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$ ,  
і  $\{u^m(t), \omega^m(t)\}$  збігається до  $\{u(t), \omega(t)\}$  в  
 $V \times H_0^1(\Omega)$  для м.в.  $t$ . Стандартно доводиться [3],  
що  $B(v, u^m)$  збігається до  $B(v, u)$  слабо в  
 $L^2(0, T; V^*)$ ,  $C(v, \omega^m) \rightarrow C(v, \omega)$  слабо в  
 $L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$ . Отже,  $\{u, \omega\}$  є слабким  
розв'язком задачі (10),(11). Далі, з включень  
 $u \in L^2(0, T; D(A_1))$ ,  $\omega \in L^2(0, T; H^2(\Omega))$  і  
 $\frac{du}{dt} \in L^2(0, T; V^*)$ ,  $\frac{d\omega}{dt} \in L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)$  маємо  
 $u \in C([0, T]; V)$ ,  $\omega \in C([0, T]; H_0^1(\Omega))$ . Звідси  $\{u, \omega\}$   
задовольняють (17) для всіх  $t \in [0, T-h]$ . Функції  
 $f, g, v$  є абсолютно неперервними, отже з (17)  
маємо, що функції  $u: [0, T] \rightarrow V$ ,  
 $\omega: [0, T] \rightarrow H_0^1(\Omega)$  також є абсолютно  
неперервними. Тому  $\{u, \omega\}: [0, T] \rightarrow (L^3(\Omega))^4$  -



абсолютно неперервна. Для дуального в  $L^4(\Omega)$  відображення  $F(w)(x) = \frac{w(x)|w(x)|^2}{\|w\|_{L^4(\Omega)}^2}$  маємо, що

для м.в.  $t$

$$\begin{aligned} \|\omega\|_{L^4(\Omega)} \frac{d}{dt} \|\omega\|_{L^4(\Omega)} &= \left\langle \frac{d\omega}{dt}, F(\omega) \right\rangle_4 = \\ &= \frac{1}{\|\omega\|_{L^4(\Omega)}^2} \left\langle \frac{d\omega}{dt}, \omega^3 \right\rangle_4 \end{aligned} \quad (18)$$

де  $\langle \cdot, \cdot \rangle_4$  - спарювання між  $L^4(\Omega)$  і  $L^4(\Omega)$ .

Оскільки  $\omega(t) \in H^2(\Omega)$  для м.в.  $t$ , то  $\omega(t) \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$ . Звідси  $\omega^3(t) \in H^1(\Omega)$  і  $\nabla \omega^3(t) = 3\omega^2(t) \nabla \omega(t)$ . Крім того,  $\omega^3(t) \in H_0^1(\Omega)$ . Тоді з формули Гріна  $3 \int_\Omega \omega^2 |\nabla \omega|^2 dx = (A_1 \omega, \omega^3)$ .

Множачи (11) на  $\omega^3$  і використовуючи лему 2 і (18), маємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \frac{d}{dt} \|\omega\|_{L^4(\Omega)}^4 + 3 \int_\Omega \omega^2 |\nabla \omega|^2 dx &\leq \|g\|_{L^4(\Omega)} \|\omega\|_{L^4(\Omega)}^3 \\ &\leq \frac{1}{4} \|g\|_{L^4(\Omega)}^4 + \frac{3}{4} \|\omega\|_{L^4(\Omega)}^4 \end{aligned}$$

Тоді з леми Гронуола маємо нерівність (13). Оскільки єдиність очевидна, то шукане доведено. Тепер зафіксуємо  $\delta > 0$  і розглянемо функції  $\{v, w\}: [0, T] \rightarrow V \times H_0^1(\Omega)$ , що є абсолютно неперервними і задовольняють для всіх  $t \in [0, T]$  оцінки

$$\begin{aligned} \max \left\{ \|v(t)\|^2, \nu \|v\|_{L^2(0, T; V)}^2 \right\} &\leq \\ &\leq \|u_0\|^2 + \frac{2}{\nu \lambda_1} \int_0^t \|f(r)\|^2 dr + \\ &+ \frac{2|\xi|^2 T}{\nu \lambda_1} (\|\omega_0\|^2 + \frac{1}{\lambda_1} \int_0^t \|g(r)\|^2 dr) + \delta = K_1^2 \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \|w(t)\|_{L^4(\Omega)} &\leq (\|\omega_0\|_{L^4(\Omega)}^4 e^{3T} + \\ &+ \int_0^t e^{3(T-r)} \|g(r)\|_{L^4(\Omega)}^4 dr + \delta)^{\frac{1}{4}} = K_2 \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \|w\|_{L^2(0, T; H_0^1(\Omega))} &\leq (\|\omega_0\|^2 + \\ &+ \frac{1}{\lambda_1} \int_0^t \|g(r)\|^2 dr + \delta)^{\frac{1}{2}} = K_3 \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \left\| \frac{dw}{dt} \right\|_{L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)} &\leq R_1 (K_1 + (\int_0^t \|f(r)\|^2 dr)^{\frac{1}{2}} + \\ &+ K_3 + K_1^2 + \delta) = K_4 \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d\omega}{dt} \right\|_{L^2(0, T; (H_0^1(\Omega))^*)} &\leq R_2 (K_3 + \\ &+ (\int_0^t \|g(r)\|^2 dr)^{\frac{1}{2}} + K_2 K_1 + \delta) = K_5 \end{aligned} \quad (23)$$

де  $R_i$  залежать лише від констант вихідної задачі. Нехай  $C$  - замикання в просторі  $L^2(0, T; H) \times L^2(0, T; L^2(\Omega))$  множини функцій  $\{v, w\}: [0, T] \rightarrow V \times H_0^1(\Omega)$ , що є абсолютно неперервними і задовольняють (19)-(23). Тоді легко показати, що для будь-яких  $\{v, w\} \in C$  виконуються співвідношення (7)-(9). Далі, множина  $C$  є опуклою в

$L^2(0, T; H) \times L^2(0, T; L^2(\Omega))$  і з леми про компактність впливає компактність  $C$ . Крім того, множина  $C$  є коректно означеною для  $f \in L^2(0, T; H)$ ,  $g \in L^4(0, T; L^4(\Omega))$ . Зараз доведемо, що якщо  $\{v, w\} \in C$ ,  $f \in L^2(0, T; H)$ ,  $g \in L^4(0, T; L^4(\Omega))$ , то для довільних  $\{u_0, \omega_0\} \in V \times H_0^1(\Omega)$  існує слабкий розв'язок  $\{u, \omega\}$  задачі (10), (11), причому  $\{u, \omega\}$  належить  $C$  (а отже, задовольняє (19)-(23), (7)-(9)). Виберемо  $\{v_n, w_n\}$  так, щоб  $\{v_n, w_n\}: [0, T] \rightarrow V \times H_0^1(\Omega)$  були абсолютно неперервними, задовольняли (19)-(23) і

$$\begin{aligned} v_n &\rightarrow v \text{ сильно в } L^2(0, T; H), \\ w_n &\rightarrow w \text{ сильно в } L^2(0, T; L^2(\Omega)). \end{aligned}$$

Нехай  $\{f_n, g_n\} \in W^{1,2}(0, T; H) \times W^{1,4}(0, T; L^4(\Omega))$ , що збігаються до  $\{f, g\}$  в  $L^2(0, T; H) \times L^4(0, T; L^4(\Omega))$ . Попередні міркування гарантують існування єдиного слабого розв'язку  $\{u_n, \omega_n\}$  задачі (10), (11), що відповідає  $(v_n, f_n)$ ,  $(w_n, g_n)$  і задовольняє (12)-(14) для  $f_n, g_n$ . Крім того,  $\{u_n, \omega_n\}: [0, T] \rightarrow V \times H_0^1(\Omega)$  є абсолютно неперервними. Оскільки  $f_n \rightarrow f$  в  $L^2(0, T; H)$ ,  $g_n \rightarrow g$  в  $L^4(0, T; L^4(\Omega))$ , то для достатньо великих  $n$   $\{u_n, \omega_n\}$  задовольняє (19)-(21). Тоді з урахуванням нерівності

$$|b(v_n, u_n, z)| \leq k_1 \|z\|_\nu \|v_n\|_{L^4(\Omega)}^3 \|u_n\|_{L^4(\Omega)}^3 \leq$$



$\leq k_2 \|z\|_V \|u_n\|_V^4 \|v_n\|_V^4 \|u_n\|_V^4 \|v_n\|_V^4$  отримуємо

$$\begin{aligned} \left\| \frac{du_n}{dt} \right\|_{L^3(0,T;V^*)} &\leq k_1 (\|u_n\|_{L^4(0,T;V)} + \\ &+ \|f_n\|_{L^4(0,T;H)} + \|\omega_n\|_{L^4(0,T;L^2(\Omega))} + K_1^2) \leq \\ &\leq R_1 (K_1 + (\int_0^T \|f(r)\|^2 dr)^{\frac{1}{2}} + K_3 + K_1^2 + \delta) \end{aligned}$$

Отже  $\frac{du_n}{dt}$  задовольняє (22) для достатньо

великих  $n$ . Аналогічно з (19)-(21) і нерівності

$$|c(v_n, \omega_n, z)| \leq k_5 \|z\|_V \|v_n\|_{L^4(\Omega)}^3 \|\omega_n\|_{L^4(\Omega)}^3$$

отримуємо

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d\omega_n}{dt} \right\|_{L^2(0,T;V^*)} &\leq R_2 (K_3 + \\ &+ (\int_0^T \|g(r)\|^2 dr)^{\frac{1}{2}} + K_2 K_1 + \delta) \end{aligned}$$

Отже виконується (23) і по підпослідовності

$$\{u_n, \omega_n\} \rightarrow \{u, \omega\} \text{ слабо в } L^2(0,T;V \times H_0^1(\Omega))$$

$$\{u_n, \omega_n\} \rightarrow \{u, \omega\}^* \text{ слабо в } L^\infty(0,T;H \times L^4(\Omega))$$

$$\frac{d}{dt} u_n \rightarrow \frac{d}{dt} u \text{ слабо в } L^{\frac{4}{3}}(0,T;V^*)$$

$$\frac{d}{dt} \omega_n \rightarrow \frac{d}{dt} \omega \text{ слабо в } L^2(0,T;(H_0^1(\Omega))^*)$$

Тоді з леми про компактність  $\{u_n, \omega_n\}$  збігається до  $\{u, \omega\}$  сильно в

$L^2(0,T;H) \times L^2(0,T;L^4(\Omega))$ . Звідси одразу

виводимо, що  $\{u, \omega\} \in C$ . Оскільки аналогічно

[3] маємо, що  $B(v_n, u_n) \rightarrow B(v, u)$  слабо в

$L^{\frac{4}{3}}(0,T;V^*)$  і  $C(v_n, \omega_n) \rightarrow C(v, \omega)$  слабо в

$L^2(0,T;(H_0^1(\Omega))^*)$ , то  $\{u, \omega\}$  є слабким

розв'язком (10),(11). Тепер покладемо

$\mathcal{F}(v, z) = \{\{u, \omega\} : \{u, \omega\} \in C \text{ - слабкий розв'язок}$

$(10),(11)\}$  і означимо многозначне відображення

$$\begin{aligned} \Phi : C &\mapsto 2^C \\ \Phi(v, z) &= \{\{u, \omega\} : \{u, \omega\} \in \mathcal{F}(v, z)\} \end{aligned}$$

Це відображення має опуклі значення. Дійсно,

нехай  $\{u_1, \omega_1\}, \{u_2, \omega_2\} \in \mathcal{F}(v, z)$ . Легко

перевірити, що  $\{u, \omega\} = \alpha \{u_1, \omega_1\} + (1 - \alpha) \{u_2, \omega_2\}$  -

слабкий розв'язок (10),(11), що відповідає  $v$  для

всіх  $\alpha \in [0, 1]$ . Оскільки множина  $C$  є опуклою,

то  $\{u, \omega\} \in C$ . Звідси  $\{u, \omega\} \in \mathcal{F}(v, z)$ . Доведемо,

що відображення  $\Phi$  є напівнеперервним зверху.

Якщо це не так, то існують  $\{v, z\} \in C$ , окіл  $O$

множини  $\Phi(v, z)$  в  $L^2(0,T;H) \times L^2(0,T;L^2(\Omega))$  і

послідовність  $\{v_n, z_n\} \rightarrow \{v, z\}$ ,  $\{u_n, \omega_n\} \in \Phi(v_n, z_n)$

такі, що  $\{u_n, \omega_n\} \notin O$  для всіх  $n$ . Повторюючи

попередні міркування отримуємо, переходячи до

підпослідовності, що  $u_n \rightarrow u$  в  $L^2(0,T;H)$ ,

$\omega_n \rightarrow \omega$  в  $L^2(0,T;L^2(\Omega))$ , де  $\{u, \omega\} \in C$  - слабкий

розв'язок (10),(11), що відповідає  $v$ . Отже,

$\{u, \omega\} \in \Phi(v, z)$ , що є протиріччям. Звідси,

зокрема, випливає, що  $\Phi$  має компактні

значення. Тоді з теореми Какутані про нерухому

точку маємо, що відображення  $\Phi$  має нерухому

точку, що і є шуканим слабким розв'язком.

Теорема доведена.

#### 4 Висновки

В роботі досліджується проблема існування

неперервних по часу розв'язків в сильній

топології фазового простору для тривимірної

системи Бенара. Доведено, що для початкових

даних з простору  $V \times H_0^1(\Omega)$  існує принаймні

один розв'язок відповідної задачі Коші

$\{u(t), w(t)\}$ , для якого  $w(\cdot) \in C([0, T]; L^2(\Omega))$ .

#### Список використаних джерел

1. Birnir B., Svanstedt N. Existence theory and strong attractors for the Rayleigh-Benard problem with a large aspect ratio // Discrete and continuous dynamical systems. - 2004. - vol. 10. - P. 53-74
2. Temam R. Infinite-dimensional dynamical systems in mechanics and physics. - Berlin:Springer, 1988. - 500 p.
3. Темам Р. Уравнения Навье-Стокса: теория и численный анализ. - М.:Мир, 1981. - 405 с.
4. Лионс Ж.-Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. - М.:Мир, 1972. - 587 с.
5. Cabral M., Rosa R., Temam R. Existence and dimension of the attractor for the Benard problem on the channel-like domains // Discrete and continuous dynamical systems. - 2004. - vol. 10. - P. 89-116

Надійшла до редколегії 21.02.2007



УДК 529.3

Василь Г. Карнаухов, д.ф.-м.н., професор  
Тетяна В. Карнаухова, к.ф.-м.н., доцент  
Олена В. П'ятецька, інженер

## ВПЛИВ ДЕФОРМАЦІЙ ЗСУВУ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ОРТОТРОПНОГО СЕНСОРА ПРИ ВИМУШЕНИХ ЗГИН- НИХ КОЛИВАННЯХ ПРЯМОКУТНОЇ КОМПОЗИТНОЇ ПЛАСТИНИ З ШАР- НІРНИМ ЗАКРІПЛЕННЯМ ТОРЦІВ

На основі моделі Тимошенка досліджено вплив деформацій зсуву на характеристики ортотропного сенсора при вимушених гармонічних коливаннях прямокутної ортотропної пластини з шарнірним закріпленням її торців. Одержано прості аналітичні формули для заряду, струму та різниці потенціалів, які показує сенсор. Як частковий випадок, розглянута трансверсально-ізотропна пластина з трансверсально-ізотропним сенсором. Електромеханічна поведінка матеріалів при моногармонічному механічному та електричному навантаженнях описується з використанням концепції комплексних характеристик.

Ключові слова: композитні пластини, п'єзоелектричний сенсор, активне демпфірування.

Прямокутні композитні пластини знаходять широке застосування у багатьох галузях сучасної науки і техніки. Часто на них діють стаціонарні та нестаціонарні механічні й теплові навантаження, які можуть викликати високий рівень напружень. Для зменшення рівня власних коливань пластин, суттєвого зниження амплітуд при вимушених коливаннях і зменшення напружень в зонах концентрації в останні роки почали інтенсивно розвиватися активні методи демпфірування з використанням п'єзоелектричних сенсорів та актуаторів. Останні досягнення в з цих питань представлено в роботах [4,5]. При сумісному використанні для активного демпфірування п'єзоелектричних сенсорів та актуаторів головним питанням є розрахунок характеристик цих елементів, їх оптимального розміщення в структурі пластини, розрахунок різниць потенціалів, які необхідно підвести до актуаторів для компенсації механічного навантаження з метою змен-

Vasyl G. Karnaukhov, D.Sci(Phys-Math.), Professor  
Tetyana V. Karnaukhova, C.Sci(Phys-Math.), Ass.Pr  
Olena V. Pyatetska, engineer

## INFLUENCE OF SHEAR DEFORMATIONS ON THE CHARACTERISTICS OF ORTHOTROPIC SENSOR UNDER FORCED BENDING VIBRATIONS OF COMPOSITE PLATE WITH THE SIMPLE SUPPORT CONDITIONS

On base Timoshenko's models an influence of shear deformations is studied on the characteristics of orthotropic sensor under harmonic of rectangular orthotropic plate with the simple support conditions. Simple formulas for a charge, a current and sensor's potential difference are obtained. Transversally isotropic plate is considered too. Electromechanical behavior of materials is described by the conception of complex characteristics under monoharmonic mechanical and electrical loading.

Key words: composite plates, piezoelectrical sensor, active damping.

шення амплітуди коливань. Ефективність активного демпфірування за допомогою сенсорів та актуаторів залежить від багатьох факторів: їх геометричних розмірів, розміщення в структурі оболонки, електромеханічних властивостей тощо. Як відомо, для дослідження механічного стану композитних елементів необхідно використовувати уточнені моделі, зокрема, моделі типу Тимошенка. Останні досягнення з цих питань представлено у монографії [3].

Дана стаття присвячена дослідженню деформацій зсуву на характеристики п'єзоелектричних сенсорів при вимушених стаціонарних згинних коливаннях прямокутної пластини при дії на неї гармонічного за часом нормального тиску. Торці пластини вважаються шарнірно закріпленими. Використовуються результати роботи [2], в якій розроблена термомеханічна модель Тимошенка з розподіленими п'єзоелектричними ортотропними сенсорами. Пасивний матеріал



також вважається ортотропним. Одержана проста формула для заряду, струму та різниці потенціалів, які показує сенсор. Як частковий випадок, розглянута трансверсально-ізотропа пластина з трансверсально-ізотропним сенсором.

Нехай пластина складена із середнього шару, який виготовлено з пасивного металічного, полімерного чи композитного матеріалу і двох зовнішніх шарів, виготовлених з полімерного чи керамічного ортотропного п'єзоматеріалу з товщиною попередньою поляризацією. На пластину діє гармонічний за часом нормальний тиск. Вважається, що пасивні і п'єзоактивні шари виготовлено із в'язкопружних матеріалів, механічні й електричні властивості яких не залежать від температури.

Для моделювання механічної поведінки пасивного і п'єзоактивного шарів використовується модель Тимошенка. Основні співвідношення для цієї моделі представлено в роботі [2]. Пасивний шар може бути як металічним, так і діелектричним. Вважається, що п'єзоактивні шари поляризовані по товщині, причому нижній та верхній шари поляризовані в протилежних напрямках. Для них приймається гіпотеза, що тангенціальні складові вектора індукції набагато менші від нормальної складової. У результаті з рівняння електростатики матимемо, що нормальна складова індукції постійна по товщині п'єзошару.

До рівнянь, наведених в [2], слід додати рівняння руху

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_1}{\partial x} + \frac{\partial Q_2}{\partial y} + \rho^* \omega^2 w + p(x, y) &= 0, \\ Q_1 &= \frac{\partial M_1}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial y}, \quad Q_2 = \frac{\partial M_2}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial x}. \end{aligned} \quad (1)$$

Компоненти тензора згинних деформацій для пластини визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^z &= \kappa_1 z; \quad \varepsilon_{11}^y = \kappa_2 z; \quad \varepsilon_{12}^z = \kappa_{12} z; \\ \kappa_{12} &= \tau_1 + \tau_2; \quad \varepsilon_{13}^z = \phi_1 + \theta_1; \quad \varepsilon_{23}^z = \phi_2 + \theta_2, \\ \kappa_1 &= \frac{\partial \phi_1}{\partial x}, \quad \kappa_2 = \frac{\partial \phi_2}{\partial y}, \quad \theta_1 = \frac{\partial w}{\partial x}, \\ \theta_2 &= \frac{\partial w}{\partial y}, \quad \tau_1 = \frac{\partial \phi_1}{\partial y}, \quad \tau_2 = \frac{\partial \phi_2}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2)$$

Визначальні рівняння для моментів і перерізуючих сил для ортотропного пасивного матеріалу з ортотропними сенсорами представлено в [2] і вони мають вигляд:

$$\begin{aligned} M_{(1,2)} &= D_{1(,2)} \kappa_1 + D_{12,22} \kappa_2, \quad H = D_{66} \kappa_{12}, \\ Q_1 &= Q_{11} (\phi_1 + \frac{\partial w}{\partial x}), \quad Q_2 = Q_{22} (\phi_2 + \frac{\partial w}{\partial y}). \end{aligned} \quad (3)$$

Потрібно мати на увазі, що відповідно до концепції комплексних характеристик при моногармонічному навантаженні коефіцієнти наведених вище визначальних рівнянь комплексні і в загальному випадку залежать від частоти і температури [1]. У подальшому будемо вважати їх незалежними від температури.

Підставляючи (2) у визначальні рівняння (3), а результат - у рівняння руху (1), матимемо систему комплексних диференціальних рівнянь відносно  $\phi_1, \phi_2, w$ :

$$\begin{aligned} Q_{11} \frac{\partial}{\partial x} (\phi_1 + \frac{\partial w}{\partial x}) + Q_{22} \frac{\partial}{\partial y} (\phi_2 + \frac{\partial w}{\partial y}) + \rho^* \omega^2 w + p(x, y) &= 0, \\ Q_{11} (\phi_1 + \frac{\partial w}{\partial x}) &= \frac{\partial}{\partial x} (D_{11} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + D_{12} \frac{\partial \phi_2}{\partial y}) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} [D_{66} (\frac{\partial \phi_1}{\partial y} + \frac{\partial \phi_2}{\partial x})], \\ Q_{22} (\phi_2 + \frac{\partial w}{\partial y}) &= \frac{\partial}{\partial y} (D_{12} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + D_{22} \frac{\partial \phi_2}{\partial y}) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} [D_{66} (\frac{\partial \phi_1}{\partial y} + \frac{\partial \phi_2}{\partial x})]. \end{aligned} \quad (4)$$

Для шарнірного закріплення механічне навантаження і розв'язок задачі представимо у вигляді

$$\begin{aligned} w &= \sum_m \sum_n w_{mn} \sin k_m x \sin p_n y, \\ \phi_1 &= \sum_m \sum_n \phi_{mn}^1 \cos k_m x \sin p_n y, \\ \phi_2 &= \sum_m \sum_n \phi_{mn}^2 \sin k_m x \cos p_n y, \\ p &= \sum_m \sum_n p_{mn} \sin k_m x \sin p_n y, \end{aligned} \quad (5)$$

Використовуючи вказані рівняння руху відносно  $\phi_1, \phi_2, w$ , одержимо

$$\phi_{mn}^1 = \frac{\Delta_{11}}{\Delta} w_{mn}, \quad \phi_{mn}^2 = \frac{\Delta_{21}}{\Delta} w_{mn}, \quad (6)$$

Тут

$$\Delta = (\frac{D_{11}}{Q_{11}} k_m^2 + \frac{D_{66}}{Q_{11}} p_n^2 + 1) (\frac{D_{22}}{Q_{22}} p_n^2 + \frac{D_{66}}{Q_{22}} k_m^2 + 1) -$$



$$\begin{aligned} & \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{11}} \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{22}} k_m^2 p_n^2, \\ \Delta_{11} = & -\left(\frac{D_{22}}{Q_{22}} k_m p_n^2 + \frac{D_{66}}{Q_{22}} k_m^3 + k_m\right) + \\ & + \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{11}} k_m^2 p_n^2, \\ \Delta_{21} = & -\left(\frac{D_{11}}{Q_{11}} k_m^2 p_n + \frac{D_{66}}{Q_{11}} p_n^2 + p_n\right) + \\ & + \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{22}} k_m^2 p_n^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Використовуючи (6), з першого рівняння (4) матимемо

$$w_{mn} = \frac{p_{mn}}{Q_{11} k_m^2 + Q_{22} p_n^2 + Q_{11} k_m \frac{\Delta_{11}}{\Delta} + Q_{22} p_n \frac{\Delta_{21}}{\Delta} - I_1 \omega^2} \quad (8)$$

Формула для заряду  $Q$  наведена в [2] і для ортотропного сенсора має вигляд

$$Q = \gamma_{31}(h_1 + h_0) \iint_{(S)} \kappa_1 dx dy + \gamma_{32}(h_1 + h_0) \iint_{(S)} \kappa_2 dx dy. \quad (9)$$

У випадку коротко-замкнутих електродів для шарнірного закріплення торців пластини з використанням (5)-(6) матимемо

$$Q = 4(h_1 + h_0) \left( \frac{\gamma_{31} \varphi_{mn}^1}{p_n} + \frac{\gamma_{32} \varphi_{mn}^2}{k_m} \right). \quad (10)$$

При гармонічному механічному навантаженні з (10) одержимо формулу для амплітуди струму:

$$I = i \omega Q. \quad (11)$$

У випадку розімкнутих електродів з наведених у [2] формул знайдемо вираз для різниці потенціалів, яка знімається з ортотропного сенсора:

$$V_S = \frac{1}{S} \left\{ \frac{\gamma_{31}}{2\gamma_{33}} \iint_{(S)} \kappa_1 dx dy + \frac{\gamma_{32}}{2\gamma_{33}} \iint_{(S)} \kappa_2 dx dy \right\}. \quad (12)$$

Тут  $S = ab$  – площа сенсора.

Для шарнірного закріплення з використанням (5) з (12) матимемо:

$$V_S = \frac{2}{S \gamma_{33}} h_1 (h_1 + h_0) \frac{\gamma_{31} k_m \varphi_{mn}^1 + \gamma_{32} p_n \varphi_{mn}^2}{k_m p_n} \quad (13)$$

$(m, n = 1, 3, 5, \dots).$

Тут  $\varphi_{mn}^{1,2}$  визначаються за формулами (6)-(8).

Для трансверсально-ізотропного матеріалу в наведених вище співвідношеннях слід покласти:

$$\begin{aligned} D_{11} = D_{22} = D, \quad D_{12} = \nu D, \\ D_{66} = \frac{1-\nu}{2} D, \quad Q_{11} = Q_{22} = Q'. \end{aligned} \quad (14)$$

З одержаних вище формул видно, що, наприклад, для трансверсально-ізотропного матеріалу вплив зсуву визначається відношенням модулів зсуву  $G'/G$  та відношенням розмірів пластини до її товщини, так що він може суттєво змінити показники сенсора.

Аналогічний результат матимемо і для випадку, коли пасивний шар – діелектричний, а внутрішні електроди відсутні. Потрібно лише врахувати нові вирази для жорсткісних характеристик пластини, наведених у [2].

#### Список використаних джерел

1. Карнаухов В.Г., Михайленко В.В. Нелинейная термомеханика пьезоэлектрических неупругих тел при моногармоническом нагружении. – Житомир: ЖГТУ, 2005. – 428с.
2. Карнаухов В.Г., Карнаухова Т.В., П'ятецька О.В. Уточнена термомеханічна модель композитних оболонок типу Тимошенка з розподіленими ортотропними сенсорами при моногармонічному навантаженні//Вісник Київського університету. Серія фізико-математичні науки. – 2006. -№3. – С.81-85.
3. Луговой П.З., Мейш В.Ф., Штанцель Э.А. Нестационарная динамика неоднородных оболочечных конструкций. – К.: Издательско-полиграфический центр << Киевский университет >>, 2005. – 536с.
4. Gabbert U. and Tzou H.S. Smart Structures and Strucronic Systems.- Kluwer Academic Pub.: Dordrecht/Boston/ London. – 2001. – 384p.
5. Rao S.S. and Sunar M. Piezoelectricity and its use in disturb
6. Tani J., Takagi T., Qiu J. Intelligent material systems: Applications of functional materials// Applied mechanic reviews. – 1998. – V. 51, N 8. – P. 505 - 521.

Надійшла до редколегії 25.12.06



УДК 517.9

Сергій А. Кривошея, к.ф.-м.н., доцент

### Деякі властивості лінійних нетерових операторів у гільбертових просторах.

В статті розглядається формула псевдообернення добутку лінійних нетерових операторів, а також інші властивості цих операторів в гільбертових просторах.

Ключові слова: лінійний нетерів оператор, ортопроектор, псевдообернений оператор.

E-mail: [serhiy.kryvosheya@gmail.com](mailto:serhiy.kryvosheya@gmail.com)

Як відомо [2], у випадку, коли  $A$  і  $B$  –  $(m \times r)$  і  $(r \times n)$  – вимірні матриці відповідно, причому  $\text{rank} A = \text{rank} B = r$ , має місце формула псевдообернення добутку матриць

$$(AB)^+ = B^+ A^+, \quad (1)$$

де  $A^+$ ,  $B^+$ ,  $(AB)^+$  – псевдообернення (за Муром – Пенроузом) матриць. Формула (1) є узагальненням відомого співвідношення  $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$  для невинроджених матриць.

Апарат теорії узагальнено-обернених і псевдообернених операторів (і, зокрема, матриць) широко використовується при дослідженні розв'язності і представленні розв'язків як лінійних, так і слабонелінійних крайових задач для різноманітних класів диференціальних, інтегро-диференціальних, інтегральних систем рівнянь а також систем рівнянь з імпульсною дією [1,3,4,5]. Характерною особливістю цих задач є те, що їх лінійна частина визначена деяким нетеровим оператором, який не має оберненого.

У статті формула (1) узагальнюється на випадок добутку лінійних нетерових операторів а також розглядаються деякі інші властивості нетерових операторів у гільбертових просторах.

Наведемо спочатку деякі відомі факти [1].

Лінійний оператор  $L^*: H_2 \rightarrow H_1$ , який задовольняє умовам

$$LL^*L = L, \quad L^*LL^* = L^*, \\ (LL^*)^+ = LL^*, \quad (L^*L)^+ = L^*L, \quad (2)$$

Serhiy A. Kryvosheya, Cand.Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor

### Some properties of the linear Noether's operators in Hilbert's spaces.

In this article the formula of pseudoinversing product of linear Noether's operators is being observed, as well as some properties of these operators in Hilbert's spaces.

Key words: the linear Noether's operator, ortoprojector, pseudoinverse operator.

називають псевдооберненим до лінійного оператора  $L: H_1 \rightarrow H_2$ . Якщо псевдообернений оператор існує, то він єдиний.

Лінійний обмежений оператор  $L: H_1 \rightarrow H_2$  називають нетеровим оператором, якщо: 1)  $\text{Im } L$  – замкнений підпростір  $H_2$ ; 2)  $\dim \text{Ker } L = \text{const}$ ,  $\dim \text{Ker } L^* = \text{const}$ .

Для нетерових операторів в гільбертових просторах мають місце такі твердження.

**Теорема 1.** Якщо  $L: H_1 \rightarrow H_2$  – нетерів оператор, то спряжений оператор  $L^*: H_2 \rightarrow H_1$  також нетерів і мають місце ортогональні розклади

$$H_1 = \text{Ker } L \oplus \text{Im } L^*, \quad H_2 = \text{Ker } L^* \oplus \text{Im } L. \quad (3)$$

**Теорема 2.** Якщо  $L: H_1 \rightarrow H_2$  – нетерів оператор, то завжди існує єдиний лінійний обмежений псевдообернений оператор  $L^*: H_2 \rightarrow H_1$ , який можна побудувати за формулами

$$L^* = (L^*L + P_L)^{-1} L^*, \quad L = L^*(LL^* + P_{L^*})^{-1}, \quad (4)$$

причому

$$L^*L = I_{H_1} - P_L, \quad LL^* = I_{H_2} - P_{L^*} \quad (5)$$

де  $I_{H_1}$ ,  $I_{H_2}$  – тотожні оператори,  $P_L$ ,  $P_{L^*}$  – ортопроектори на  $\text{Ker } L$  і  $\text{Ker } L^*$  відповідно.

**Теорема 3.** Нехай  $L: H_1 \rightarrow H_2$  – нетерів оператор. Тоді псевдообернений оператор  $L^*$  також нетерів, причому



$$\text{Ker} L^* = \text{Ker} L^*, \text{Ker} (L^*)^* = \text{Ker} L.$$

$$\text{Im} L^* = \text{Im} L^*, \quad (6)$$

Доведення. Оскільки за теоремою 1 оператор

$L^*$  нетерів, то достатньо довести співвідношення

(6). Рівність  $\text{Ker} L^* = \text{Ker} L^*$  випливає безпосередньо з формул (3), (4). Доведемо другу

з формул (6). Нехай  $x \in \text{Ker} (L^*)^*$ . Тоді

$$(L^*)^* x = 0, L(L^* L + P_L)^{-1} x = 0, \text{ звідки}$$

$$(L^* L + P_L)^{-1} x = x_0 \in \text{Ker} L,$$

$$x = (L^* L + P_L) x_0 = x_0 \in \text{Ker} L,$$

$$\text{Ker} (L^*)^* \subset \text{Ker} L. \text{ Нехай тепер } x \in \text{Ker} L.$$

$$\text{Маємо: } (L^*)^* x = L(L^* L + P_L)^{-1} x = Lx', \text{ де}$$

$$x' = (L^* L + P_L)^{-1} x. \text{ Доведемо, що } x' \in \text{Ker} L.$$

Якщо  $x' \notin \text{Ker} L$ , то  $x' = x_0 + x_1$  ( $x_0 \in \text{Ker} L$ ,

$x_1 \in \text{Im} L^*$ ). Звідси

$$x = (L^* L + P_L)(x_0 + x_1) = L^* Lx_0 + L^* Lx_1 +$$

$$P_L x_0 + P_L x_1 = L^* Lx_1 + x_0$$

$$x - x_0 = L^* Lx_1, L^* Lx_1 = 0, Lx_1 \in \text{Ker} L^*, x_1 = 0.$$

$$\text{Отже, } x' \in \text{Ker} L \text{ і } \text{Ker} L \subset \text{Ker} (L^*)^*.$$

$$\text{З рівностей } \text{Ker} L^* = \text{Ker} L^*,$$

$$\text{Ker} (L^*)^* = \text{Ker} L \text{ випливає, що}$$

$$\dim \text{Ker} L^* = \text{const}, \dim \text{Ker} (L^*)^* = \text{const}.$$

Доведемо останнє із співвідношень (6). Нехай

$x \in \text{Im} L^*$ ,  $x = L^* y$ . Тоді

$$Lx = LL^* y = (I_{H_2} - P_L) y = y - P_L y,$$

$$y = Lx + P_L y. \text{ Маємо:}$$

$$x = L^* y = L^* (Lx + P_L y) = L^* Lx + L^* P_L y =$$

$$= L^* Lx = (I_{H_1} - P_L) x = x - P_L x$$

$$\text{Звідси } P_L x = 0, x \in \text{Im} L^*, \text{Im} L^* \subset \text{Im} L^*.$$

Нехай тепер  $x \in \text{Im} L^*$ . Тоді

$$L^* Lx = (I_{H_1} - P_L) x = x, x \in \text{Im} L^*,$$

$$\text{Im} L^* \subset \text{Im} L^*. \text{ Отже, } \text{Im} L^* = \text{Im} L^*.$$

**Теорема 4.** Для того, щоб лінійний обмежений оператор  $L^*: H_2 \rightarrow H_1$  був псевдооберненим до нетерів оператора  $L: H_1 \rightarrow H_2$ , необхідно і достатньо, щоб виконувалися умови (5).

Доведення. Необхідність умов випливає з теореми 2. Нехай тепер умови (5) виконуються. Маємо:

$$LL^* L = (I_{H_2} - P_L) L = L - P_L L = L,$$

$$L^* LL^* = L^* (I_{H_2} - P_L) = L^* - L^* P_L = L^*,$$

$$(LL^*)^* = (I_{H_2} - P_L)^* = I_{H_2} - P_L = LL^*,$$

$$(L^* L)^* = (I_{H_1} - P_L)^* = I_{H_1} - P_L = L^* L$$

і, згідно з означенням, оператор  $L^*$  є псевдооберненим до оператора  $L$ .

**Теорема 5.** Нехай  $B: H_1 \rightarrow H_2$ ,  $A: H_2 \rightarrow H_3$  – нетерів оператори. Тоді оператор  $AB: H_1 \rightarrow H_3$  також нетерів.

Доведення.

1. Доведемо, що  $\text{Im}(AB)$  – замкнений підпростір в  $H_3$ . Нехай  $z_n \in \text{Im}(AB) \subset \text{Im} A$  – збіжна послідовність,  $z_n \rightarrow z_0 \in \text{Im} A$ .

Оскільки  $z_n \in \text{Im}(AB)$ , то  $z_n = (AB)x_n = Ay_n$ , де  $x_n \in H_1$ ,  $y_n = Bx_n$ ,  $y_n \in \text{Im} B$ ,  $z_n \in \text{Im} A$ .

Тому можна вибрати  $y_n = A^* z_n$ ,  $x_n = B^* y_n$ .

$$\text{Справді, } Ay_n = AA^* z_n = (I_{H_3} - P_A) z_n = z_n,$$

$$Bx_n = BB^* y_n = (I_{H_2} - P_B) y_n = y_n. \text{ Із збіжності}$$

послідовності  $z_n$  і співвідношень

$$\|y_{n+p} - y_n\| = \|A^* (z_{n+p} - z_n)\| \leq \|A^*\| \cdot \|z_{n+p} - z_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

$$(\forall p \in \mathbb{N})$$

$$\|x_{n+p} - x_n\| = \|B^* (y_{n+p} - y_n)\| \leq \|B^*\| \cdot \|y_{n+p} - y_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

випливає збіжність послідовностей  $x_n$ ,  $y_n$  і співвідношення

$$x_n \rightarrow x_0 \in H_1, y_n \rightarrow y_0 \in \text{Im} B \subset H_2,$$

$$z_0 = Ay_0, y_0 = Bx_0, z_0 = (AB)x_0 \in \text{Im}(AB).$$

2. Доведемо, що  $\dim \text{Ker}(AB) = \text{const}$ ,

$$\dim \text{Ker}(B^* A^*) = \text{const}. \text{ Очевидно,}$$

$$\text{Ker} B \subset \text{Ker}(AB). \text{ Тому}$$

$$\dim \text{Ker}(AB) \geq s = \dim \text{Ker} B.$$

$$\text{Якщо } x \in \text{Ker}(AB), \text{ то } Bx = \sum_{i=1}^p \lambda_i h_i, \text{ де}$$

$$p = \dim \text{Ker} A, h_1, \dots, h_p - \text{ базис } \text{Ker} A. \text{ Тому}$$



$$B^* Bx = (I_{H_1} - P_B)x = \sum_{i=1}^p \lambda_i B^* h_i,$$

$$x = P_B x + \sum_{i=1}^p \lambda_i B^* h_i = \sum_{j=1}^s \alpha_j g_j + \sum_{i=1}^p \lambda_i B^* h_i,$$

де  $g_1, \dots, g_s$  – базис  $\text{Ker} B$ . З останньої рівності випливає, що  $\dim \text{Ker}(AB) \leq s + p$ . Співвідношення  $\dim \text{Ker}(B^* A^*) = \text{const}$  можна довести аналогічно.

**Теорема 6.** Нехай  $B: H_1 \rightarrow H_2$ ,  $A: H_2 \rightarrow H_3$  – нетерові оператори, які задовольняють умову

$$P_B^* P_A = P_A X + Y P_B^*, \quad (7)$$

де  $X, Y: H_2 \rightarrow H_2$  – деякі лінійні обмежені оператори. Тоді має місце формула псевдообернення добутку нетерових операторів:

$$(AB)^* = (I_{H_1} - P_{AB}) B^* A^* (I_{H_3} - P_{(AB)^*}). \quad (8)$$

**Доведення.** Згідно з твердженнями теорем 3, 4, достатньо довести, що для оператора  $L = AB$  виконуються умови:

$$(AB)^* (AB) = I_{H_1} - P_{AB},$$

$$(AB)(AB)^* = I_{H_3} - P_{(AB)^*} \quad (9)$$

Позначимо  $P'_B = I_{H_1} - P_{AB}$ ,  $P'_R = I_{H_3} - P_{(AB)^*}$ . З теореми 1 випливає, що  $P'_B$  і  $P'_R$  – ортопроектори на  $\text{Im}(AB)^* \stackrel{\text{def}}{=} R'$  і  $\text{Im}(AB) \stackrel{\text{def}}{=} R$  відповідно.

Нехай  $x$  – будь-який елемент з  $H_1$ . Маємо:

$$\begin{aligned} (AB)^* (AB)x &= P'_B B^* A^* P_R ABx = P'_B B^* A^* ABx = \\ &= P'_B B^* (I_{H_2} - P_A) Bx = P'_B B^* Bx - P'_B B^* P_A Bx = \\ &= P'_B (I_{H_1} - P_B)x - P'_B B^* P_A Bx = \\ &= P'_B x - P'_B (P_B x + B^* P_A Bx) = \\ &= P'_B x = (I_{H_1} - P_{AB})x, \text{ оскільки} \end{aligned}$$

$$x' = P_B x + B^* P_A Bx \in \text{Ker}(AB) \quad \text{і} \quad P'_B x' = 0,$$

внаслідок умови (7). Справді

$$\begin{aligned} ABx' &= ABP_B x + AB B^* P_A Bx = A(I_{H_2} - P_B^*) P_A Bx = \\ &= AP_A Bx - AP_B^* P_A Bx = -A(P_A X + Y P_B^*) Bx = 0 \end{aligned}$$

Для будь-якого елемента  $z \in H_3$

маємо:  $P_R z = ABx$  ( $x \in H_1$ ),

$$\begin{aligned} (AB)(AB)^* z &= AB P'_B B^* A^* P_R z = \\ &= AB(I_{H_1} - P_{AB}) B^* A^* P_R z = \\ &= ABB^* A^* P_R z = A(I_{H_1} - P_B^*) A^* P_R z = \\ &= AA^* P_R z - AP_B^* A^* P_R z = \\ &= (I_{H_3} - P_A^*) P_R z - AP_B^* A^* ABx = \\ &= P_R z - P_A^* ABx - AP_B^* (I_{H_1} - P_A) Bx = \\ &= P_R z - AP_B^* Bx + AP_B^* P_A Bx = \\ &= P_R z + A(P_A X + Y P_B^*) Bx = P_R z = (I_{H_3} - P_{(AB)^*}) z \end{aligned}$$

**Зауваження.**

1. Умова (7) виконується, наприклад, у випадку, коли ортопроектори  $P_B^*$  і  $P_A$  комутують:  $P_B^* P_A = P_A P_B^*$ .
2. Якщо  $P_B^* = 0$ ,  $P_A = 0$ , то  $P_{(AB)^*} = P_A^*$ ,  $P_{AB} = P_B$  і з формули (8) маємо  $(AB)^* = B^* A^*$ .

#### Список використаних джерел.

1. А.А. Бойчук, В.Ф. Журавлев, А.М. Самойленко. Обобщенно-обратные операторы и нетеровы краевые задачи. – Киев: Институт математики НАН України, 1995. – 318с.
2. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1967. – 575с.
3. Гребеников Е.А., Рябов Ю.А. Конструктивные методы анализа нелинейных систем. – М.: Наука, 1979. – 432с.
4. С.А. Кривошея. Умови розв'язності нетерових крайових задач для інтегродиференціальних систем. // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. науки. – 2001. – Вип. 4. – с. 144-151.
5. С.А. Кривошея. Періодичні розв'язки квазілінійних матричних диференціальних рівнянь. // Нелінійні коливання. – 1999. – Вип. 2. – с. 111 – 118.

Надійшла до редакції 12.12.2006



УДК 539.3

Ірина В. Лебедєва\*, к.ф.-м.н., доцент,  
Григорій П. Головач, к.ф.-м.н., доцент

## До питання про розв'язок спектральної задачі для зрізаного двопорожнинного гіперболоїда обертання

Розглянуто узагальнене перетворення Мелера-Фока для розкладу довільної функції. Показано, що існує випадок, коли цей розклад містить один член, що відповідає дискретній гілці спектру. Для доведення застосовано аналітичний та чисельний методи.

Ключові слова: власні функції, спектральна задача, інтегральне перетворення.

\*E-mail: Lebedevai@ukr.net

### 1 Вступ

У роботах [1,2,4,7,8] при розв'язанні задачі теорії потенціалу для зрізаного двопорожнинного гіперболоїда обертання знайдено формули розкладу в інтеграл довільної функції  $f(\xi)$  за власними функціями рівняння Лежандра на інтервалі  $(\xi_0; \infty)$ . Для інтервалу  $(0; \infty)$  ця задача детально вивчена [3,9], і такий розклад виконується на підставі інтегрального перетворення Мелера-Фока. Для інтервалу  $(\xi_0; \infty)$  задача вирішена Н.А.Беловою, Я.С.Уфляндом [1,2] та А.Ф.Улітком [7,8] за нульових граничних умов першого і другого роду. Нами [4] здійснено розв'язок задачі за нульових граничних умов третього роду і таким чином отримано узагальнення інтегрального перетворення Мелера-Фока. За методом Тітчмарша [6] формула розкладу довільної функції  $f(x)$  має вигляд

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \varphi(x, \lambda) [-\operatorname{Im} m(\lambda)] d\lambda + \sum_{n=0}^N r_n \varphi(x, \lambda_n) \int_0^\infty \varphi(y, \lambda_n) f(y) dy, \quad (1)$$

де  $r_n$  — лишки функції  $m(\lambda)$  у її полюсах. Згідно з граничними умовами

$$\begin{aligned} \varphi(0, \lambda) &= \sin \alpha, \quad \varphi'(0, \lambda) = -\cos \alpha, \\ \vartheta(0, \lambda) &= \cos \alpha, \quad \vartheta'(0, \lambda) = \sin \alpha, \end{aligned} \quad (2)$$

I. V. Lebedyeva, Cand.Sci. (Phys.-Math.),  
Associate Professor,

G. P. Golovach, Cand.Sci. (Phys.-Math.), Associate  
Professor

## On the Spectral Problem for Truncated Parted Hyperboloid of Revolution

The generalization of the Mehler-Fok integral transform for the expansion to an arbitrary function is studied. The case when the expansion contains one term which corresponds to discrete branch of the spectrum is considered. Both asymptotical and numerical methods are used

Key Words: eigenfunctions, spectral problem, integral transform.

які для довільного значення кута  $\alpha$  відповідають розв'язковій задачі за нульових граничних умов третього роду, для функцій  $\varphi(\xi, \lambda)$ ,  $\vartheta(\xi, \lambda)$  знайдено такі вирази

$$\begin{aligned} \varphi(\xi, \lambda) &= -y_1(\xi, \lambda) \{ y_2(\xi_0, \lambda) \cos \alpha + y_2'(\xi_0, \lambda) \sin \alpha \} + \\ &+ y_2(\xi, \lambda) \{ y_1(\xi_0, \lambda) \cos \alpha + y_1'(\xi_0, \lambda) \sin \alpha \}, \\ \vartheta(\xi, \lambda) &= y_1(\xi, \lambda) \{ y_2(\xi_0, \lambda) \sin \alpha - y_2'(\xi_0, \lambda) \cos \alpha \} + \\ &+ y_2(\xi, \lambda) \{ y_1(\xi_0, \lambda) \sin \alpha - y_1'(\xi_0, \lambda) \cos \alpha \}. \end{aligned} \quad (3)$$

Тут

$$y_1(\xi) = \sqrt{\operatorname{sh} \xi} P_{\frac{1}{2} + i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi), \quad (4)$$

$$y_2(\xi) = \frac{1}{2} \sqrt{\operatorname{sh} \xi} [Q_{\frac{1}{2} + i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi) + Q_{\frac{1}{2} - i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi)]$$

— лінійно незалежні дійсні розв'язки рівняння Лежандра

$$\frac{d^2 y}{d\xi^2} + \left( \lambda + \frac{1}{4 \operatorname{sh}^2 \xi} \right) y = 0, \quad (5)$$

де  $\lambda = \tau^2$  — комплексне число, що змінюється у верхній півплощині;  $m(\lambda)$  — аналітична функція від  $\lambda = \sigma + i\delta$  ( $\delta > 0$ ), регулярна у верхній півплощині. З умови, що функція  $\vartheta(x, \lambda) + m(\lambda)\varphi(x, \lambda)$  належить  $L^2(0; \infty)$  при довільному недійсному значенні параметра  $\lambda$ , знайдено аналітичний вираз для  $m(\lambda)$ :



$$-m(\lambda) = \frac{\left\{ y_1' - i \frac{2}{\pi} \operatorname{cth} \pi \sqrt{\lambda} y_2' \right\}_{\xi=\xi_0} \cos \alpha - \left\{ y_1 - i \frac{2}{\pi} \operatorname{cth} \pi \sqrt{\lambda} y_2 \right\}_{\xi=\xi_0} \sin \alpha}{\left\{ y_1' - i \frac{2}{\pi} \operatorname{cth} \pi \sqrt{\lambda} y_2' \right\}_{\xi=\xi_0} \sin \alpha + \left\{ y_1 - i \frac{2}{\pi} \operatorname{cth} \pi \sqrt{\lambda} y_2 \right\}_{\xi=\xi_0} \cos \alpha} =$$

$$= \frac{\frac{d}{d\xi} \left\{ \sqrt{\operatorname{sh} \xi} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi) \right\}_{\xi=\xi_0} \cos \alpha - \sqrt{\operatorname{sh} \xi_0} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi_0) \sin \alpha}{\frac{d}{d\xi} \left\{ \sqrt{\operatorname{sh} \xi} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi) \right\}_{\xi=\xi_0} \sin \alpha + \sqrt{\operatorname{sh} \xi_0} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi_0) \cos \alpha} \quad (6)$$

Функція  $m(\lambda)$  може мати полюси на дійсній від'ємній півосі, які знаходяться в нулях функції

$$\frac{d}{d\xi} \left\{ \sqrt{\operatorname{sh} \xi} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi) \right\}_{\xi=\xi_0} \sin \alpha +$$

$$+ \sqrt{\operatorname{sh} \xi_0} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi_0) \cos \alpha. \quad (7)$$

при  $\delta \rightarrow 0$ . Асимптотичне та чисельне дослідження рівняння

$$f(\xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varphi(\xi, \xi_0, \tau) \tau \operatorname{th} \pi \tau}{\left[ \operatorname{th} \pi \sqrt{\lambda} \{ y_1 \cos \alpha + y_1' \sin \alpha \} \right]_{\xi=\xi_0}^2 + \left[ \frac{2}{\pi} \{ y_2 \cos \alpha + y_2' \sin \alpha \} \right]_{\xi=\xi_0}^2} d\tau \int_{\xi_0}^\infty \varphi(x, \xi_0, \tau) f(x) \operatorname{sh} x dx$$

$$+ r_0 \varphi(\xi, \xi_0, \tau_0) \int_{\xi_0}^\infty \varphi(x, \xi_0, \tau_0) f(x) \operatorname{sh} x dx. \quad (9)$$

Покладаючи в (9)  $\alpha = 0$ , дістанемо інтегральне перетворення, отримане в роботах А.Ф. Улітка [7, 8]. Частинному випадку  $\alpha = 0$  в граничних умовах (2) спектральної задачі відповідає нульова гранична умова Діріхле на зрізі  $\xi = \xi_0$  двопорожнинного гіперболоїда. При цьому спектр задачі буде чисто неперервним.

## 2 Асимптотичне дослідження

Функція  $m(\lambda)$  може мати корені лише на дійсній від'ємній півосі, тому  $\lambda = \sigma < 0$  ( $\delta \rightarrow 0$ ). З урахуванням співвідношень для присланих функцій Лежандра [5]

$$Q_{-1/2+\mu}^m(\operatorname{ch} \xi) = (\operatorname{sh} \xi)^m \frac{d^m Q_{-1/2+\mu}(\operatorname{ch} \xi)}{(d \operatorname{ch} \xi)^m}$$

рівняння (8) запишемо так

$$\left( \operatorname{ctg} \alpha + \frac{1}{2} \operatorname{cth} \xi_0 \right) Q_{-1/2+\sqrt{-\sigma}}(\operatorname{ch} \xi_0) + Q_{-1/2+\sqrt{-\sigma}}^1(\operatorname{ch} \xi_0) = 0 \quad (10)$$

Скориставшись асимптотичною формулою при  $\xi \rightarrow \infty$  ( $\operatorname{ch} \xi \rightarrow \infty$ ,  $\operatorname{cth} \xi \rightarrow 1$ ) [5]

$$Q_\nu^m(\operatorname{ch} \xi) \sim e^{i\sigma \mu} \frac{1}{2^{\nu+1}} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\nu + \mu + 1)}{\Gamma(\nu + 3/2)} \frac{1}{(\operatorname{ch} \xi)^{\nu+1}},$$

$$\frac{d}{d\xi} \left\{ \sqrt{\operatorname{sh} \xi} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi) \right\}_{\xi=\xi_0} \sin \alpha +$$

$$+ \sqrt{\operatorname{sh} \xi_0} Q_{-1/2-i\sqrt{\lambda}}(\operatorname{ch} \xi_0) \cos \alpha = 0 \quad (8)$$

показують, що воно має один корінь  $\lambda = \lambda_0 = -\tau_0^2$ . Таким чином, розклад (1) містить один член, що відповідає дискретній гілці спектру, і має вигляд

легко встановити поведінку функцій, що входять у рівняння (10), на нескінченності:

$$Q_{-1/2+\sqrt{-\sigma}}(\operatorname{ch} \xi_0) \sim$$

$$\sim \frac{1}{2^{1/2+\sqrt{-\sigma}}} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(1/2+\sqrt{-\sigma})}{\Gamma(1+\sqrt{-\sigma})} \frac{1}{(\operatorname{ch} \xi_0)^{1/2+\sqrt{-\sigma}}},$$

$$Q_{-1/2+\sqrt{-\sigma}}^1(\operatorname{ch} \xi_0) \sim -\frac{1}{2^{1/2+\sqrt{-\sigma}}} \times$$

$$\times \sqrt{\pi} \frac{(1/2+\sqrt{-\sigma})\Gamma(1/2+\sqrt{-\sigma})}{\Gamma(1+\sqrt{-\sigma})} \frac{1}{(\operatorname{ch} \xi_0)^{1/2+\sqrt{-\sigma}}}. \quad (11)$$

У відповідності до асимптотичних формул (11) перетворимо рівняння (10):

$$\left( \operatorname{ctg} \alpha + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{2^{1/2+\sqrt{-\sigma}}} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-\sigma}\right)}{\Gamma(1+\sqrt{-\sigma})} \frac{1}{(\operatorname{ch} \xi_0)^{1/2+\sqrt{-\sigma}}} =$$

$$\frac{1}{2^{1/2+\sqrt{-\sigma}}} \sqrt{\pi} \frac{\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-\sigma}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-\sigma}\right)}{\Gamma(1+\sqrt{-\sigma})} \frac{1}{(\operatorname{ch} \xi_0)^{1/2+\sqrt{-\sigma}}},$$

звідки

$$\operatorname{ctg} \alpha = \sqrt{-\sigma}. \quad (12)$$



### 3 Чисельний розв'язок

Для чисельного аналізу рівняння (10) приведено до вигляду ( $\xi = \xi_0$ ):

$$(v+1)\operatorname{th} \xi - \frac{1}{2\operatorname{th} \xi} - \operatorname{ctg} \alpha +$$

$$+ \frac{(v+2)\operatorname{sh} \xi \int_0^1 t^{\frac{v+1}{2}} (1-t)^{\frac{1}{2}} \left(1 - t/\operatorname{ch}^2 \xi\right)^{-2-\frac{v}{2}} dt}{\left(\operatorname{ch}^3 \xi \int_0^1 t^{\frac{v-1}{2}} (1-t)^{\frac{v}{2}} \left(1 - t/\operatorname{ch}^2 \xi\right)^{-1-\frac{v}{2}} dt\right)} = 0,$$

$$-\sigma = (v+1/2)^2. \quad (14)$$

При  $\xi \rightarrow \infty$  з рівняння (12) маємо  $-\sigma|_{\xi \rightarrow \infty} = \operatorname{ctg}^2 \alpha$ , що збігається з результатом (11) і доводить правильність перетворень.

Нижче наведено значення  $-\sigma$  розв'язків рівняння (10) (таблиці 1 і 2). За значеннями параметрів  $\alpha, \xi$  у таблицях 1 і 2 на рис.1 зображено поверхню  $-\sigma = f(\alpha, \xi)$ , де  $0 < \alpha < \pi_0(\xi)$ ,

$$\pi_0(\xi) = \operatorname{arccctg} \left( \frac{\frac{1.5 \operatorname{sh} \xi \int_0^1 t^{0.25} (1-t)^{-0.25} \left(1 - \frac{t}{\operatorname{ch}^2 \xi}\right)^{-1.75} dt}{\operatorname{ch}^3 \xi \int_0^1 t^{-0.75} (1-t)^{-0.25} \left(1 - \frac{t}{\operatorname{ch}^2 \xi}\right)^{-0.75} dt} - \frac{1}{\operatorname{sh}^2 \xi}} \right),$$

$$\xi > 0.$$

Таблиця 1

Значення  $-\sigma$  розв'язків рівняння (10)

| $\xi \backslash \alpha$ | 0.25    | 0.50    | 0.75    | 1.0     | 1.25     | 1.5     |
|-------------------------|---------|---------|---------|---------|----------|---------|
| 0.01                    | 382.05  | 322.074 | 301.899 | 290.687 | 282.831  | 276.307 |
| 0.05                    | 41.7984 | 22.3651 | 17.0216 | 14.3628 | 12.6205  | 11.2568 |
| 0.10                    | 24.529  | 9.698   | 6.155   | 5.545   | 3.564    | 2.845   |
| 0.15                    | 20.234  | 6.740   | 3.765   | 2.4979  | 1.7686   | 1.2652  |
| 0.20                    | 18.425  | 5.515   | 2.807   | 1.7059  | 1.1015   | 0.7061  |
| 0.25                    | 17.473  | 4.869   | 2.310   | 1.306   | 0.775    | 0.445   |
| 0.3                     | 16.903  | 4.479   | 2.014   | 1.071   | 0.590    | 0.303   |
| 0.4                     | 16.277  | 4.045   | 1.6849  | 0.8157  | 0.3943   | 0.1629  |
| 0.5                     | 15.9558 | 3.816   | 1.5119  | 0.6835  | 0.29889  | 0.01037 |
| 1                       | 15.4746 | 3.4592  | 1.2379  | 0.4767  | 0.1525   | 0.0199  |
| 2                       | 15.352  | 3.3629  | 1.16197 | 0.41962 | 0.115103 | 0.00633 |
| 3                       | 15.339  | 3.353   | 1.1535  | 0.4132  | 0.11102  | 0.00519 |
| 4                       | 15.33   | 3.350   | 1.152   | 0.4124  | 0.1104   | 0.0050  |
| 10                      | 15.3375 | 3.35069 | 1.15224 | 0.41228 | 0.110406 | 0.00503 |

Таблиця 2

Значення  $-\sigma$  розв'язків рівняння (10)

| $\xi \backslash \alpha$ | 0.01    | 0.05    | 0.10   | 0.15    | 0.20   | 0.25  | 0.3   | 0.4    |
|-------------------------|---------|---------|--------|---------|--------|-------|-------|--------|
| 1.75                    | 270.104 | 10.0317 | 2.243  | 0.8713  | 0.4176 | 0.221 | 0.123 | 0.0388 |
| 2.0                     | 263.401 | 8.7871  | 1.680  | 0.5359  | 0.1970 | 0.071 | 0.021 |        |
| 2.25                    | 255.074 | 7.358   | 1.105  | 0.24261 | 0.0432 | 0.001 |       |        |
| 2.5                     | 242.741 | 5.483   | 0.4979 | 0.02864 |        |       |       |        |
| 2.75                    | 218.775 | 2.677   | 0.0158 |         |        |       |       |        |
| 3.0                     | 133.931 |         |        |         |        |       |       |        |
| 3.11                    | 0.17252 |         |        |         |        |       |       |        |



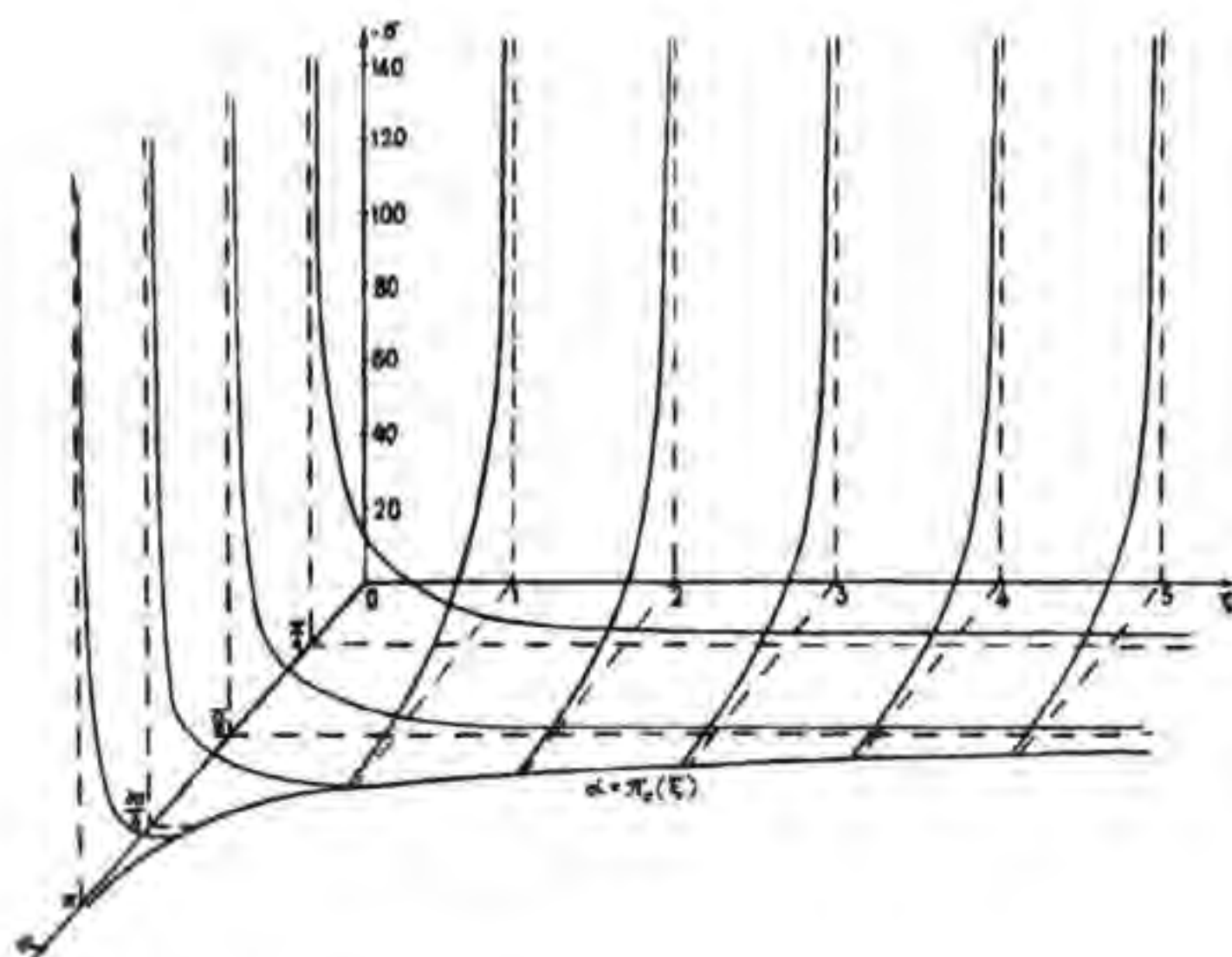


Рис. 1. Графічна ілюстрація розв'язків рівняння (10)

#### 4. Заключні зауваження

Таким чином, формула розкладу довільної функції  $f(\xi)$  за власними функціями рівняння Лежандра на інтервалі  $(\xi_0; \infty)$  має вигляд (9). Вона містить один член, що відповідає дискретній гілці спектру і який визначається єдиним коренем рівняння (8). Цей корінь знайдено асимптотично та чисельно. Результати чисельного аналізу для різних значень параметрів  $\alpha, \xi_0$  подано в таблицях 1 і 2 та на рис.1. У частинному випадку, коли  $\alpha=0$  в граничних умовах (2) (задача Діріхле), спектр задачі буде чисто неперервним і матимемо інтегральне перетворення, отримане в роботах А.Ф.Улітка [7,8]. Якщо при цьому  $\xi_0=0$ , дістанемо класичне інтегральне перетворення Мелера-Фока [3].

#### Список використаних джерел

1. Белова Н.А., Уфлянд Я.С. О разложении по собственным функциям одной сингулярной краевой задачи для уравнения Лежандра // Дифференц. уравнения. – 1967. – 3, №8. – С. 1397-1399.
2. Белова Н.А., Уфлянд Я.С. О кручении усеченного гиперболоида // Прикл. математика и механика. – 1970. – 34, №2. – С. 349-354.
3. Лебедев Н.Н. Специальные функции и их приложения. – М.: Физматгиз, 1963. – 358 с.
4. Лебедева І.В. Про розклад за власними функціями задачі для зрізаного двопорожнинного гіперболоїда обертання // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки. – 2005 – № 4. – С. 92-98.
5. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Дополнительные главы. – М.: Наука, 1986. – 800 с.
6. Титчмарш Э.Ч. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. Т.1. – М.: Изд-во иностр. лит, 1960. – 278 с.
7. Улитко А.Ф. Об одном обобщении интегрального преобразования Мелера-Фока // Прикл. Механика. – 1967. – 3, №5. – С. 45-49.
8. Улитко А.Ф. Векторные разложения в пространственной теории упругости. – Киев: Академперіодика, 2002. – 341 с.
9. Уфлянд Я.С. Интегральные преобразования в задачах теории упругости. – Л.: Наука, 1967. – 402 с.

Надійшла до редколегії 05.03.07



УДК 514.77

Віктор С. Лісняк, к.ф.-м.н., доцент

### Неголономна геометрія в її основних поняттях

Розглядаються неголономні аналоги класичних точкових і лінійчатих многовидів тривимірного евклідового простору, розподіли і загальніші неголономні многовиди як певні поля геометричних об'єктів. Побудову всіх аналогів виконано геометричним методом.

Дано вихідні поняття і складено системи визначальних диференціальних рівнянь цих неголономних многовидів.

Ключові слова: комплекс, конгруенція, неголономний многовид.

\*E-mail: [v-lisnyak@univ.kiev.ua](mailto:v-lisnyak@univ.kiev.ua)

Праісторія неголономної геометрії пролягає через неголономну механіку з кінця XVIII ст. Неголономні аналоги класичних многовидів зручні для унаочнення новітніх математичних моделей еволюціонуючих суцільних середовищ [1,2, 16]. Тут ці аналоги досліджуються уніфіковано [8,9].

$$\omega \equiv P(x, y, z)dx + Q(x, y, z)dy + R(x, y, z)dz = 0. \quad (1)$$

У разі виконання для нього умови Стокса

$$P(\partial Q / \partial z - \partial R / \partial y) + Q(\partial R / \partial x - \partial P / \partial z) + R(\partial P / \partial y - \partial Q / \partial x) = 0, \quad (2)$$

яку вперше вказав А.Клеро у 1741 р., ми маємо  $\infty^1$  інтегральних поверхонь, у які розшаровується (щонайбільше) область  $D$  його задання. Інакше воно гарантовно має лише множину  $M$  інтегральних кривих. Це вона спочатку називалася неголономною поверхнею  $\Sigma$ , а (1) її рівнянням.

$$P(x, y, z)(X - x) + Q(x, y, z)(Y - y) + R(x, y, z)(Z - z) = 0. \quad (3)$$

Умова (2) перетворює його на множину дотичних площин до  $\infty^1$  інтегральних поверхонь рівняння (1). У найзагальнішому випадку площини (3) утворюють взаємновизначуване з  $\Sigma$  ковекторне поле  $\Pi$ . Понад це, поле  $\Pi$  взаємновизначуване з полем напрямків  $L$  з  $E_3$ . При цьому кожній точці  $M$  відповідає деяка площина  $\pi$  з  $\Pi$  й ортогональна в  $M$  до  $\pi$  (задаючи відповідний напрямок) пряма  $l$ . Через ці 3 взаємновизначуваності певний час у різних школах неголономною поверхнею називалося якесь своє з цих геометрично різних утворень  $\Sigma, \Pi, L$  [5-7,10,15].

V.S. Lisnyak, Cand. Sci (Phys.-Math.) Associate Professor

### Aholonomic geometry in its basic notions

Aholonomic analogues for classic point and lineal manifolds in three-dimensional Euclidean space, distributions and more general aholonomic manifolds are considered as certain fields of geometrical objects. All analogues constructions are accomplished by geometrical method.

Their basic notions are given and systems of determining differential equations of these aholonomic manifolds are composed.

Key Words: aholonomic manifold, complex, congruence

#### § 1. Класична неголономна поверхня

1. Рівняння неголономної поверхні. У найпростішому варіанті задача неголономної геометрії зводиться до інтерпретації загального розв'язку рівняння

Утворення  $\Sigma$  насправді ж поверхнею не є у жодному класичному просторі.

2. Неголономна поверхня та ковекторне і векторні поля. З рівнянням (1) однозначно зіставляється поле площин

З  $\omega = 0$  однозначно зіставляється векторне поле

$$a = Pi + Qj + Rk. \quad (4)$$

Для нього умова Стокса (2) набуває вигляду

$$a \cdot \text{rot} a = 0 \quad (5)$$

критерію існування  $\infty^1$  локально ортогональних до  $a$  поверхонь. Поле  $a$  це пара  $a \equiv (L, \lambda)$ , де функція  $\lambda \geq 0$  є довжина відповідного  $M$  вектору з  $E_3$ . Тому неголономна поверхня паралельно вивчалася ще і як різні відповідності, поля чи розподіли ( $M \rightarrow \pi$  чи  $M \rightarrow l$  чи  $M \rightarrow a$ ) чи навіть їх системи (конекси, поєднання) – бінарні та тренарні, зокрема і як екіпараметричні



многовиди. З часом прямі координатні підходи поступилися використанню рухомого реперу і диференціальних форм [11,12].

Задля зручності можливих інженерно-фізичних застосувань неголономна поверхня досліджується у термінах класичного одиничного векторного поля.

## § 2. Неголономна поверхня як поле напрямків

Ітимемо від рівнянь класичної двовимірної поверхні у просторі  $E_3$  до побудови диференціальних рівнянь її неголономного аналогу в ньому.

$$\omega_1^3 = a\omega^1 + b\omega^2, \quad \omega_2^3 = b\omega^1 + c\omega^2. \quad (2)$$

Тоді фундаментальний геометричний об'єкт другого порядку (скорочено – ф.г.о.-2)  $(a,b,c)$  чи (за іншою термінологією) другий диференціальний окіл поверхні  $S$  визначає два незалежні функціональні інваріанти. За них часто доцільно взяти (як геометрично досить наочні) середню  $H = (a+c)/2$  і повну  $K = ac - b^2$  кривини цієї поверхні.

Істотним для подальшого є те, що перший диференціальний окіл поверхні однозначно визначає у кожній її точці локальну дотичну до неї площину  $\pi$ , а тому й локальний перпендикулярний до неї напрям.

Неголономною поверхнею назовемо тривимірне поле напрямків у просторі  $E_3$  – їх трипараметричний многовид  $(\infty^3)$ .

$$\Theta \equiv -\omega_\alpha^3 + a_{\alpha i}\omega^i = 0, \quad D\Theta_\gamma \equiv 0 \pmod{\Theta_\beta}; \quad (4)$$

Зовнішні продовження цієї системи приводять до рівнянь

$$\Theta_{\alpha i} \equiv da_{\alpha i} - a_{\beta i}\omega_\alpha^\beta - a_{\alpha k}\omega_i^k - a_{\alpha j}\omega^j = 0, \quad \Delta a_{\alpha j} \wedge \omega^j \equiv 0 \pmod{\Theta_\beta, \Theta_{\gamma p}}. \quad (5)$$

Тут усі функції  $a_{\alpha j}$  симетричні за всіма їхніми латинськими індексами.

3. Зображення для інваріантних функцій. Для довільного векторного поля

$$i_1 = a_{12} - a_{21}, \quad i_2 = a_{11} + a_{22}, \quad i_3 = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}, \\ i_4 = (a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22})^2 + (a_{13}a_{21} - a_{11}a_{23})^2, \quad i_5 = a_{13}^2 + a_{23}^2. \quad (6)$$

Тут  $i_1, \dots, i_5$  утворюють повну систему алгебраїчно незалежних (як функцій компонент з ф.г.о.-1) інваріантів першого диференціального околу  $E$ .

4. Інваріантні оператори й афінна нормаль. Позначимо символом  ${}^*d$  локальний оператор диференціювання, задовіль-

1. Класична поверхня. Єдиним інваріантом першого диференціального околу поверхні  $S$  є її локальна дотична площина  $\pi$ . Їй двоїстий орт нормалі  $n$ , визначаючий локально перпендикулярний до  $S$  напрям  $l$ . Це ж дозволяє взяти для  $S$  за супровідний частково канонізований орторепер  $Q = (A; e_1, e_2, e_3)$  з вершиною  $A$  у біжучій точці поверхні  $S$  та з ортами  $e_1, e_2$  у  $\pi$ . У такому  $Q$  поверхня  $S$  визначається рівнянням  $\omega^3 = 0$ . (1)

Його ж зовнішнє продовження (внаслідок інволютивності) має вигляд

2. Основні диференціальні рівняння поля напрямків. Нехай простір  $E_3$  віднесений до рухомого ортореперу  $Q = (A; R)$  з вершиною (визначуваною радіус-вектором)  $A$  та з о.н.б.  $R \equiv (e_1, e_2, e_3)$ .

Поля напрямків у  $E_3$  зручно задавати полями відповідних їм ортів.

Нехай у деякій області  $D \subset E_3$  задане поле  $E$  одиничного вектору (орту)  $e$ . У його 0-репері  $Q$  поле  $E$  має зображення  $e = e_3$ . (3)

Ще інакше: класична поверхня  $S$  визначає своїм першим диференціальним оком двовимірне поле напрямків, занурене в  $E_3$ .

Основні диференціальні рівняння поля  $E$  у  $Q$  запишуться так:

$E$  прямою перевіркою за допомогою (5) переконуємося в абсолютній інваріантності полів наступних функцій [6]: –

няючий алгебраїчно досить виразну умову  $e_3 \cdot {}^*dA = 0$ . Отже,  ${}^*d(\cdot)$  є ортогональна проєкція вектору  $d(\cdot)$  на локальну площину  $\pi$ . Ще умовимося ще символом  $\bar{e}$  позначати складову локального вектору  $e$  у  $R \equiv (e_1, e_2, e_3)$ , ортогональну до  $e_3$ .



Задання поля  $E$  в області  $D$  простору  $E_3$  вводить у кожній точці  $A$  цієї області лінійний оператор  $T$ , який ставить у відповідність векторові  ${}^{\pi}dA$  вектор  ${}^{\pi}de_3$ . Обидва ці вектори лежать у  $\pi$ , а тому в її локальному орторепері  $Q = (A; e_1, e_2)$  матриця

$$T = (a_{\alpha\beta}), \quad \alpha, \dots = 1, 2. \quad (7)$$

Афінна нормаль поля  $E$  за її означенням визначається точками  $A$  та  $A + dA|_{de_3=0}$ . Тоді

$$\operatorname{div} V = V_3^3 \quad (10), \quad \operatorname{rot} V = (V_2^3 - V_3^2)e_1 + (V_3^1 - V_1^3)e_2 + (V_1^2 - V_2^1)e_3. \quad (11)$$

Використовуючи попередні формули і позначення, зрештою дістаємо:

$$i_1 = e_3 \operatorname{rot} e_3, \quad i_2 = \operatorname{Sp} T = -\operatorname{div} e_3, \quad i_3 = \det T, \\ i_4 = (\bar{a})^2, \quad i_5 = (de_3|_{dA \perp \pi})^2 / (dA|_{dA \perp \pi})^2. \quad (12)$$

Це – лише одна з можливих інтерпретацій абсолютних інваріантів (6).

Зафіксовані тут рівностями (4) – (12) поняття та факти в однаковій мірі стосовні неголономних поверхонь, полів напрямків та полів ортів. Диференціальні геометрії усіх їх трьох тотожні з точністю до термінології.

### § 3. Неголономні аналоги лінійчатих многовидів

Вважатимемо вже відомими основні факти диференціальної геометрії класичних (голоном-

вектором афінної нормалі є саме такий вектор [1,2].

$$a = \delta^{ij} \Delta_i e_j. \quad (8)$$

Застосовуючи подання операторів класичного векторного аналізу в орторепері до інваріантного векторного поля  $V = V^i e_i$  та й до скалярного поля  $\varphi$  з диференціальним рівнянням

$$d\varphi = \varphi_i e^i, \quad \text{одержимо три робочі формули}$$

$$\operatorname{grad} \varphi = \delta^{ij} \varphi_i e_j, \quad (9)$$

$$\operatorname{rot} V = (V_2^3 - V_3^2)e_1 + (V_3^1 - V_1^3)e_2 + (V_1^2 - V_2^1)e_3. \quad (11)$$

Використовуючи попередні формули і позначення, зрештою дістаємо:

$$i_1 = e_3 \operatorname{rot} e_3, \quad i_2 = \operatorname{Sp} T = -\operatorname{div} e_3, \quad i_3 = \det T, \\ i_4 = (\bar{a})^2, \quad i_5 = (de_3|_{dA \perp \pi})^2 / (dA|_{dA \perp \pi})^2. \quad (12)$$

них) конгруенцій і комплексів прямих евклідового простору  $E_3$ .

1. Неголономні конгруенції та їхні інваріанти. Довільність неголономної конгруенції складає чотири функції від чотирьох аргументів кожна.

Множину допустимих супровідних 0-ортореперів  $R = (A; e_s)$  неголономної конгруенції можна вибрати так, що визначальна система її основних диференціальних рівнянь запишеться як [1,2]

$$\Theta^A \equiv -\Psi^A + z^{Aa} \omega_a^3 + z_a^A \omega^a = 0; \quad D\Theta^A \equiv 0 \pmod{\Theta^B}. \quad (1)$$

Тут індекси змінюються у межах:  $\alpha, \dots = 1, 2$ ;  $a, \dots = 1, 2, 3$ ;  $A, \dots = 1, \dots, 4$ . При позначенні елементу множини вони набирають усіх своїх можливих значень.

Перший диференціальний окіл неголономної конгруенції охоплює всього 18 алгебраїчно незалежних функціональних інваріантів [9, 11].

2. Якщо чотири головні параметри неголономної конгруенції пов'язати трьома істотними співвідношеннями, то у ній визначиться  $\infty^1$  прямих, кожній з яких у спадок дістануться дві граничні точки, два фокуси та перпендикулярний цій прямій орт. Таку множину прямих ми умовно назвемо лінійчатою поверхнею  $\lambda$  неголономної конгруенції.

Для геометричної побудови (з'ясування геометричного змісту) інваріантів першого диференціального околу неголономної конгруенції зручно звернутися до її лінійчатих поверхонь  $\lambda$  з певними їхніми властивостями.

При цьому зокрема можна одержати й аналітичні умови розшаровуваності неголономної конгруенції в  $\infty^2$  голономних так, що об'єкти

них) конгруенцій і комплексів прямих евклідового простору  $E_3$ .

Візьмемо довільну пряму  $l$  з неголономної конгруенції. Тоді пряма  $l + dl$ , нескінченно близька прямій  $l$  у зміщенні вздовж кожної з лінійчатих поверхонь  $\lambda$ , визначає на  $l$  відповідну цій  $\lambda$  точку  $L(\lambda)$  – основу спільного перпендикуляру прямих  $l$  та  $l + dl$ . Множина усіх точок  $L(\lambda)$  на  $l$ , відповідних різним виборам  $\lambda$ , неперервно заповнює відрізок  $R_1 R_2$  і т.д. [9, 11].

3. Рівняння неголономних комплексів. Геометричні об'єкти першого диференціального околу звичайного (класичного) комплексу прямих є вихідними для побудови і неголономного комплексу.

Широта задання неголономного комплексу складає три функції, залежних від чотирьох аргументів кожна, – по одній для задання положення двох точок  $J_1, J_2$  та  $e$ .

Тільки з'ясування того, що у разі цілковитої інтегровності рівняння  $\omega^2 = A\omega^1 + B\omega_3^1 + C\omega_3^2$



воно визначає  $\infty^1$  комплексів прямих, мотивує цю назву. Подібна обставина має також місце і для неголономних (лінійчатих) конгруенцій.

$$\Theta_i = -\Omega_i + u_{i\alpha} \omega_3^\alpha + z_{i\alpha} \omega^\alpha = 0 \quad (2), \quad D\Theta_i \equiv 0 \pmod{\Theta_i}. \quad (3)$$

своєю основною визначальною системою диференціальних рівнянь [6,10].

Повна система інваріантів істотно першого диференціального околу неголономного комплексу містить усього 12 алгебраїчно незалежних її інваріантних функцій. Орт  $e$  та дві точки  $J_1, J_2$  – це його тривіальні інваріанти.

#### § 4. Неголономні многовиди як поля

Існує ще підхід [3], за яким неголономним многовидом називається певний розподіл геометричних елементів. Дещо узагальнимо це поняття.

Мій досвід показує, що фактично побудова неголономного многовиду зводиться до поширення поля  $\mu_1(M)$  ф.г.о.-і  $\mu_1$  деякого зануреного в однорідний простір  $S$  многовиду  $M$  на весь  $S$ , що приводить до утворення поля  $\mu_1(S)$ . Це  $\mu_1(S)$  і дістає назву неголономного (аналогу) многовиду  $M$ . В окремих випадках поля виду  $\mu_m(S)$  можна інтерпретувати і як поля (відносних) функціональних інваріантів або ж фігур з  $S$ .

Означення неголономного многовиду як певного поля об'єктів або ж фігур створює ряд нових понятійних і конструкційних інваріантних можливостей. Прямими способами узагальнення понять неголономних многовидів (як певних розподілів) є взяття замість поля об'єкту  $\mu_m(S)$  поля деякого його підоб'єкту. Наведемо два відповідних приклади.

1. Якщо при побудові неголономної конгруенції в  $E_3$  істотно недозадати якісь з елементів  $e$  та  $R_1, F_1, F_2, R_2$ , то дістанемо (напів-, недо-, псевдо-, квазі-, майже) неголономну конгруенцію.

Навпаки, якщо понад ці задати для кожної прямої ще якісь геометричні чи аналітичні утворення, то вийде оснащена неголономна конгруенція = (неголономна конгруенція, лінійчатий простір) оснащених прямих.

$$\omega_1^3 = a_{1r}^3 \omega^r, \quad \omega_2^3 = a_{2r}^3 \omega^r; \quad \omega_1^4 = a_{1s}^4 \omega^s, \quad \omega_2^4 = a_{2s}^4 \omega^s. \quad (2)$$

Може виявитися і так, що вихідна система (2) містить цілком інтегровну її підсистему, наприклад  $\omega^4 = 0$ . Тоді відповідне утворення  $\Sigma_4^2$  природно назвати (напів-, частково-) (голономною, неголономною) поверхнею.

У допустимому його супровідному 0-орторепері  $R = (A; e_s)$  неголономний комплекс має

2. Коли четвірку точок  $R_1, F_1, F_2, R_2$  взяти несиметрично розташованими, то вийде узагальнена неголономна метрична конгруенція.

Іншим способом узагальнення поняття неголономного многовиду є поширення поля виду  $\mu_m(M)$  не на весь простір занурення  $M$ , а лише на деякий многовид  $Q$  (з таким як і для  $M$  твірним елементом) у ньому.

3. Поширимо індуковане заданою 2-поверхнею  $S$  з  $E_3$  поле  $L$  (ортогональних їй) напрямків не на весь  $E_3$ , а лише на деякий точковий многовид  $Q$  у ньому. Якщо  $Q$  – крива, то одержиться *одновимірною неголономною поверхнею* чи (в інших термінах) *відповерхневою неголономною кривою*. Коли ж  $Q$  – деяка (можливо відмінна від  $S$ ) поверхня, то приходимо до взагалі *афінно* (неортогонально) *нормалізованої* (оснащеної полем недотичних у відповідних точках  $Q$  напрямків) за подобою вихідної поверхні  $S$  *поверхні*.

Подібним чином, у випадку  $Q \equiv S$  самій поверхні  $S$  нав'язується, окрім її власної  $L$ , можливо ще й деяка (нами вказана) афінна нормалізація  $L^a$ , принаймні деяке *оснащення поверхні  $S$* .

4. Замість простого поширення (чи звуження) поля  $\mu_r(M)$  у просторі  $S$  це поле можна перенести в іншовимірний простір  $N$ . Так геометричні об'єкти заданої рівнянням (2.1)  $\omega^3 = 0$  з продовженням (2.2) класичної  $S_2 \in E_3$  можна нав'язати поверхні  $S_2 \in E_4$ , цим її оснастивши.

5. Голономна поверхня  $S_2 \in E_4$  в її супровідному орторепері задається інволютивною системою рівнянь  $\omega^3 = 0, \quad \omega^4 = 0, \quad (1)$  а її неголономний аналог  $\Sigma_4^2$  – цілком інтегрованою системою визначальних рівнянь

$$\omega_1^3 = a_{1r}^3 \omega^r, \quad \omega_2^3 = a_{2r}^3 \omega^r; \quad \omega_1^4 = a_{1s}^4 \omega^s, \quad \omega_2^4 = a_{2s}^4 \omega^s. \quad (2)$$

Аналітично ж це обов'язково проявиться у симетрії  $a_{12}^4 = a_{21}^4$  коефіцієнтів підсистеми.

Взагалі (неалгоритмічним) критерієм часткової голономності неголономного аналогу  $NH$  голономного многовиду  $H$  є наявність таких



функцій  $\lambda_m^\alpha$ , що система  $\theta^\alpha \equiv \lambda_m^\alpha \Omega^m = 0$  є цілком інтегрованою. Тут лінійні форми  $\Omega^m$  взяті з системи  $\Omega^P = 0$  визначальних рівнянь многовиду  $H$ . Це ж означає симетрію картанових

$$\omega^3 = 0; \quad \omega_1^3 = a\omega^1 + b\omega^2, \quad \omega_2^3 = g\omega^1 + c\omega^2. \quad (3)$$

Насправді ж системою її визначальних диференціальних рівнянь є така:

$$\omega_1^3 = a\omega^1 + b\omega^2 + p\omega^3, \quad \omega_2^3 = g\omega^1 + c\omega^2 + q\omega^3. \quad (4)$$

До неї треба ще додати й аналітичні умови її зовнішнього замикання.

До нових неголономних многовидів приводить і взаємодія полів (можливо різного походження але) однакового їх фізичного чи геометричного змісту.

Не виключена можливість різних означень геометрично того самого неголономного многовиду. Можуть бути й екзотичні та формальні неголономності поля.

А починалося ж усе з неголономної поверхні як визначуваного не цілком інтегровним рівнянням  $\omega \equiv Pdx + Qdy + Rdz = 0$  многовиду...

Відзначені тут досить загальні висновки не залежать від вибору вихідного (точкового чи лінійчатого) многовиду, відштовхуючись від якого з'являлося саме поняття неголономного многовиду і його перші властивості, наприклад, вони такі ж самі й для неголономних поверхонь конформного простору [4].

Перші підходи до неголономних аналогів многовидів здійснені мною зокрема у [4-6] й оглянуті у [8,14]. Обчислювальні формули для їхніх інваріантів у репері нульового порядку наведені у публікаціях [6,8,13]. В їх аналітичній побудові мені істотну допомогу надала Г.С. Польща.

Для перенесення цих побудов на проективні простори корисні дослідження Г.С. Польщі [7,12,14] з проективних розподілів точок.

Концептно найголовнішим тут є уніфікована побудова неголономних аналогів класичних многовидів з  $E_3$  за геометрією першого диференціального околу їхніх голономних прототипів. Аналітичним здобутком є геометрична побудова рівнянь (2.4),(2.5),(2.12),(3.1),(3.2),(4.2) для них.

#### Список використаних джерел

1. Борисов А.В., Мамаев И.С. Неголономные динамические системы. – Москва-Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2002. – 324 с.
2. Жермен П. Курс механики сплошных сред – М.: Высшая школа, 1983. – 400 с.
3. Липтеев Г.Ф. Распределение касательных элементов. //Тр. Геометр. семинара. Ин-т информ. АН СССР, 1971, 3, 29-48.

параметрів продовження для  $\theta^\alpha = 0$ .

6. Були й (аналітично необґрунтовані) спроби задавати неголономну поверхню в  $E_3$  системою

диференціальних рівнянь є така:

$$\omega_2^3 = g\omega^1 + c\omega^2 + q\omega^3. \quad (4)$$

4. Лисняк В.С. Репераж неголономной поверхности конформного пространства // Докл. Болгарской АН, 1966, Т. 19, 2, с. 89-92.

5. Лисняк В.С. Инвариантные образы неголономной поверхности // Доповіді АН УРСР, 1970, 1, с. 13-15.

6. Лисняк В.С. Геометрия векторных полей в движущемся твердом теле. – М., 1975. – 56 с. / Деп. в ВИНТИ 20.10.75, № 3228.

7. Лисняк В.С. Дослідження Г.С. Польщі з геометрії однорідних просторів. К., 1983 – 1993. – 22 с. / Деп. у ДНТБ України 05.07.93, № 1373.

8. Лисняк В.С. Дослідження з неголономної геометрії. – 1994. – 23 с. / Деп. у ДНТБ України 20.07.94, № 1318.

9. Лисняк В.С. Неголономна геометрія пфаф-фових диференціальних систем // Теорія еволюційних рівнянь. Міжнародна конференція. П'яті Боголюбовські читання. – Кам'янець-Подільський, 2002. – с. 102.

10. Лисняк В.С. З історії неголономної геометрії / IX Міжнародна наук. конф. Матеріали конференції. КПІ. – Київ, 2002. – с. 518.

11. Лисняк В.С. Диференціальна геометрія неголономних аналогів класичних многовидів // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. Вип. 4, 2006 р., (8 с.)

12. Польща Г.С., Лисняк В.С. Проективно-диференціальна геометрія розподілів точок // Вісник Київського університету, серія фіз.-мат. науки, вип. № 2, 2000 р., с. 91-101.

13. Польща Г.С., Лисняк В.С. Обчислювальні аспекти диференціальної геометрії многовидів // Журнал обчислювальної та прикладної математики, Київський університет, № 2(91), 2004 р., с. 121.

14. Польща Г.С., Лисняк В.С. Дослідження з диференціальної геометрії многовидів, векторних полів і розподілів // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. Вип. 3, 2005 р., с. 163-171.

15. Синцов Д.М. Работы по неголономной геометрии. – К.: Вища школа, 1972. – 296 с.

16. Шутц Б. Геометрические методы математической физики. – М.: Мир, 1984. – 304 с.

Надійшла до редколегії 16 листопада 2006 р.



УДК 539.376

Василь В. Михайленко, д.ф.-м.н., професор,  
Василь О. П'ятецький, к.ф.-м.н, доцент,  
Олександр В. Лушиков, аспірант

### Рівняння одночастотного наближення стаціонарних коливань непружних п'єзоелектричних тіл в потенціалах

Показано, що визначальні рівняння непружних фізично нелінійних п'єзоелектричних тіл при моногармонічному навантаженні у межах гіпотези одночастотності коливань можна виразити через потенціали.

Ключові слова: п'єзоелектричні тіла, одночастотне наближення, амплітудні рівняння.

Припустимо, що в результаті дії гармонічного навантаження з круговою частотою  $\omega$  в п'єзоелектричному тілі встановлюється одночастотний (моногармонічний) напружено-деформований і електричний стан виду [1, 2]

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= \sigma'_{ij} \cos \omega t - \sigma''_{ij} \sin \omega t, \\ \varepsilon_{ij} &= \varepsilon'_{ij} \cos \omega t - \varepsilon''_{ij} \sin \omega t, \\ E_j &= E'_j \cos \omega t - E''_j \sin \omega t, \\ D_j &= D'_j \cos \omega t - D''_j \sin \omega t.\end{aligned}\quad (1)$$

Виберемо за незалежні змінні амплітуди  $\varepsilon'_{ij}$ ,  $\varepsilon''_{ij}$  механічної деформації і  $D'_j$ ,  $D''_j$  індукції електричного поля. Тоді амплітуди  $\sigma'_{ij}$ ,  $\sigma''_{ij}$  механічного напруження і  $E'_j$ ,  $E''_j$  напруженості електричного поля розглядаються як нелінійні функції незалежних змінних

$$\begin{aligned}\sigma'_{ij} &= \sigma'_{ij}(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, D'_k, D''_k), \\ \sigma''_{ij} &= \sigma''_{ij}(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, D'_k, D''_k), \\ E'_j &= E'_j(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, D'_k, D''_k), \\ E''_j &= E''_j(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, D'_k, D''_k).\end{aligned}\quad (2)$$

Ці функції повинні задовольняти умову інваріантності відносно перетворення зсуву в часі, тобто відносно заміни в (1)  $\omega t$  на  $\omega t + \varphi$ . Цю умову можна записати у матричному вигляді

$$QS(A) = S(QA),$$

де

$$S = (\sigma'_{ij}, \sigma''_{ij}, E'_j, E''_j)^T, \quad A = (\varepsilon'_{ij}, \varepsilon''_{ij}, D'_k, D''_k)^T,$$

V.V. Mikhailenko, D.Sci. (Phys.-Math.),  
V.O. Pyatetsky, Cand.Sci (Phys.-Math.),  
O.V. Lushchikov, PhD student

### Potential equations of one-frequency approach to stationary oscillations of inelastic piezoelectric solids

This paper proposes a proof of possibility to express constitutive equations of physically nonlinear piezoelectric solids under monoharmonic loading in potentials in case of one-frequency oscillations.

Key Words: piezoelectric solids, monoharmonic approach, amplitude equations.

$$Q = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

Функції (2) вважаються диференційовними по  $\varepsilon'_{kl}$ ,  $\varepsilon''_{kl}$ ,  $D'_k$ ,  $D''_k$ . Тоді шляхом виключення параметра  $\varphi$  умову інваріантності можна записати в диференціальній формі

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}} \varepsilon''_{kl} - \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \varepsilon''_{kl}} \varepsilon'_{kl} + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial D'_k} D''_k - \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial D''_k} D'_k + i \bar{\sigma}_{ij} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{E}_j}{\partial \varepsilon'_{kl}} \varepsilon''_{kl} - \frac{\partial \bar{E}_j}{\partial \varepsilon''_{kl}} \varepsilon'_{kl} + \frac{\partial \bar{E}_j}{\partial D'_k} D''_k - \frac{\partial \bar{E}_j}{\partial D''_k} D'_k + i \bar{E}_j &= 0,\end{aligned}$$

де введені позначення

$$\bar{\sigma}_{ij} = \sigma'_{ij} + i \sigma''_{ij}, \quad \bar{E}_k = E'_k + i E''_k, \quad i = \sqrt{-1}.$$

Розглянемо функції дисипації [1, 4]

$$\bar{D} = \sigma''_{ij} \varepsilon'_{ij} - \sigma'_{ij} \varepsilon''_{ij} + E''_k D'_k - E'_k D''_k \quad (3)$$

і накопичення

$$\bar{U} = \sigma'_{ij} \varepsilon'_{ij} + \sigma''_{ij} \varepsilon''_{ij} + E'_k D'_k + E''_k D''_k. \quad (4)$$

Безпосередньою підстановкою (з врахуванням умови інваріантності) можна перевірити, що ці функції задовольняють рівнянню

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \varepsilon'_{kl}} \varepsilon''_{kl} - \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \varepsilon''_{kl}} \varepsilon'_{kl} + \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial D'_k} D''_k - \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial D''_k} D'_k = 0, \quad (5)$$



Подальший виклад спирається на наступну теорему.

**Теорема.** Нехай  $\bar{X}$  – елемент  $N$ -мірного векторного простору  $E_N$  з внутрішнім добутком  $\bar{A} \otimes \bar{B}$ ,  $\bar{Y}(\bar{X})$  – неперервно-диференційовне відображення  $E_N \rightarrow E_N$ , а  $F(\bar{X})$  – скалярна неперервно-диференційовна функція. Тоді будь-який розв'язок рівняння

$$\bar{X} \otimes \bar{Y}(\bar{X}) = F(\bar{X}) \quad (6)$$

можна подати у вигляді

$$\begin{aligned} \bar{Y}(\bar{X}) &= \text{grad} \Psi(\bar{X}) + \bar{U}(\bar{X}); \\ \Psi(\bar{X}) &= \int_0^1 F(\lambda \bar{X}) \frac{d\lambda}{\lambda}; \\ U_i(\bar{X}) &= \int_0^1 \lambda X_i \left[ \frac{\partial Y_i(\lambda \bar{X})}{\partial(\lambda X_j)} - \frac{\partial Y_j(\lambda \bar{X})}{\partial(\lambda X_i)} \right] d\lambda; \\ \bar{U}(\bar{X}) \otimes \bar{X} &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Твердження теореми перевіряється шляхом диференціювання рівності

$$\int_0^1 \bar{X} \otimes \bar{Y}(\lambda \bar{X}) d\lambda = \Psi(\bar{X}),$$

яка утворюється з (6), якщо замінити  $\bar{X}$  на  $\lambda \bar{X}$  і скористатись позначенням функції  $\Psi(\bar{X})$  з (7).

Розглянемо функції (3) і (4)

$$\sigma_{ij}' \varepsilon_{ij}' - \sigma_{ij}'' \varepsilon_{ij}'' + E_k' D_k' - E_k'' D_k'' = \bar{D}(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', D_l', D_l''), \quad (8)$$

$$\sigma_{ij}' \varepsilon_{ij}' + \sigma_{ij}'' \varepsilon_{ij}'' + E_k' D_k' + E_k'' D_k'' = \bar{U}(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', D_l', D_l''). \quad (9)$$

Введемо позначення  $\bar{X} = (\varepsilon_{ij}', \varepsilon_{ij}'', D_k', D_k'')$ ,  $\bar{Y} = (\sigma_{ij}', -\sigma_{ij}'', E_k', -E_k'')$ . Тоді розв'язок рівняння (8) згідно з наведеною вище теоремою можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}' &= -\frac{\partial D}{\partial \varepsilon_{ij}''} - D_{ij}'', \quad \sigma_{ij}'' = \frac{\partial D}{\partial \varepsilon_{ij}'} + D_{ij}', \\ E_k' &= -\frac{\partial D}{\partial D_k''} - R_k'', \quad E_k'' = \frac{\partial D}{\partial D_k'} + R_k', \end{aligned} \quad (10)$$

де функція  $D$  визначається співвідношенням

$$D = \int_0^1 \bar{D}(\lambda \varepsilon_{ij}', \lambda \varepsilon_{ij}'', \lambda D_k', \lambda D_k'') \frac{d\lambda}{\lambda}, \quad (11)$$

Для функцій  $D_{ij}', D_{ij}'', R_k', R_k''$  маємо

$$D_{ij}' \varepsilon_{ij}' + D_{ij}'' \varepsilon_{ij}'' + R_k' D_k' + R_k'' D_k'' = 0. \quad (12)$$

Підставляючи (10) в рівняння (9), отримуємо

$$\begin{aligned} D_{ij}' \varepsilon_{ij}' - D_{ij}'' \varepsilon_{ij}'' + R_k' D_k' - R_k'' D_k'' &= \\ &= \bar{U}(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', D_l', D_l''). \end{aligned} \quad (13)$$

Тут враховано, що функція  $D$  (11), як і функція  $\bar{D}$ , задовольняє диференціальному рівнянню (5).

Введемо позначення  $\bar{X} = (\varepsilon_{ij}', \varepsilon_{ij}'', D_k', D_k'')$ ,  $\bar{Y} = (-D_{ij}'', D_{ij}', -R_k'', R_k')$ . Застосувавши знову наведену вище теорему, приходимо до розв'язку рівняння (13)

$$\begin{aligned} D_{ij}' &= \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}''} + g_{ij}'', \quad D_{ij}'' = -\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}'} - g_{ij}', \\ R_k' &= \frac{\partial U}{\partial D_k''} + g_k'', \quad R_k'' = -\frac{\partial U}{\partial D_k'} - g_k'. \end{aligned} \quad (14)$$

Функція  $U$  визначається співвідношенням

$$U = \int_0^1 \bar{U}(\lambda \varepsilon_{ij}', \lambda \varepsilon_{ij}'', \lambda D_k', \lambda D_k'') \frac{d\lambda}{\lambda}$$

і тому також задовольняє диференціальне рівняння (5).

Об'єднуючи (10) і (11), отримуємо сумісний розв'язок системи рівнянь (8) і (9) у вигляді

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}' &= \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}''} - \frac{\partial D}{\partial \varepsilon_{ij}''} + g_{ij}'', \quad \sigma_{ij}'' = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}'} + \frac{\partial D}{\partial \varepsilon_{ij}'} + g_{ij}', \\ E_k' &= \frac{\partial U}{\partial D_k''} - \frac{\partial D}{\partial D_k''} + g_k'', \quad E_k'' = \frac{\partial U}{\partial D_k'} + \frac{\partial D}{\partial D_k'} + g_k'. \end{aligned} \quad (15)$$

Функції  $g_{ij}', g_{ij}'', g_k', g_k''$  задовольняють умовам

$$\begin{aligned} g_{ij}' \varepsilon_{ij}' + g_{ij}'' \varepsilon_{ij}'' + g_k' D_k' + g_k'' D_k'' &= 0, \\ g_{ij}'' \varepsilon_{ij}' - g_{ij}' \varepsilon_{ij}'' + g_k'' D_k' - g_k' D_k'' &= 0, \end{aligned} \quad (16)$$

причому перша з них є наслідком теореми, застосованої до рівняння (13), а друга – наслідком рівнянь (13), (14) і (5).

Підставимо рівняння (15) у (8) і (9), враховуючи при цьому рівності (5) і (16). В результаті отримаємо вирази для функцій дисипації  $\bar{D}$  і накопичення  $\bar{U}$  через потенціали відповідно  $D$  і  $U$

$$\bar{D} = \frac{\partial D}{\partial \varepsilon_{ij}'} \varepsilon_{ij}' + \frac{\partial D}{\partial \varepsilon_{ij}''} \varepsilon_{ij}'' + \frac{\partial D}{\partial D_k'} D_k' + \frac{\partial D}{\partial D_k''} D_k'',$$



$$\bar{U} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon'_{ij}} \varepsilon'_{ij} + \frac{\partial U}{\partial \varepsilon''_{ij}} \varepsilon''_{ij} + \frac{\partial U}{\partial D'_k} D'_k + \frac{\partial U}{\partial D''_k} D''_k.$$

Таким чином, умови (16) призводять до того, що функції  $g'_{ij}, g''_{ij}, g'_k, g''_k$  в рівняннях (15) не дають ніякого внеску ні в функцію дисипації, ні в функцію накопичення. Скориставшись третім із співвідношень (7) і умовами інваріантності відносно перетворення зсуву в часі в диференціальній формі, можна показати, що достатніми умовами рівностей

$$g'_{ij} = 0, g''_{ij} = 0, g'_k = 0, g''_k = 0$$

і тим самим зображення амплітудних рівнянь в потенціалах

$$\begin{aligned} \sigma'_{ij} &= \frac{\partial U}{\partial \varepsilon'_{ij}} - \frac{\partial D}{\partial \varepsilon'_{ij}}, \quad \sigma''_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon''_{ij}} + \frac{\partial D}{\partial \varepsilon'_{ij}}, \\ E'_k &= \frac{\partial U}{\partial D'_k} - \frac{\partial D}{\partial D'_k}, \quad E''_k = \frac{\partial U}{\partial D''_k} + \frac{\partial D}{\partial D'_k} \end{aligned} \quad (17)$$

є такі умови симетрії

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}} - \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial \varepsilon'_{ij}} &= \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial \varepsilon'_{ij}} - \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}}, \\ \frac{\partial E'_k}{\partial D'_l} - \frac{\partial E'_l}{\partial D'_k} &= \frac{\partial E'_l}{\partial D'_k} - \frac{\partial E'_k}{\partial D'_l}, \\ \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial D'_k} - \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial D'_j} &= \frac{\partial E'_k}{\partial \varepsilon'_{ij}} - \frac{\partial E'_j}{\partial \varepsilon'_{kl}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Диференціюючи рівності (17), легко переконатися, що ці умови є і необхідними.

Подібним чином можна отримати аналогічні результати для інших наборів незалежних змінних. Відповідна консервативна характеристика знаходиться шляхом розписування виразу для функції дисипації з використанням відповідних умов інваріантності відносно перетворення зсуву в часі в диференціальній формі. Наприклад, у випадку залежностей

$$\begin{aligned} \sigma'_{ij} &= \sigma'_{ij}(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, E'_k, E''_k), \\ \sigma''_{ij} &= \sigma''_{ij}(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, E'_k, E''_k), \\ D'_j &= D'_j(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, E'_k, E''_k), \\ D''_j &= D''_j(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, E'_k, E''_k) \end{aligned} \quad (19)$$

розв'язок системи рівнянь

$$\begin{aligned} \sigma'_{ij} \varepsilon'_{ij} - \sigma'_{ij} \varepsilon''_{ij} + D'_k E'_k - D''_k E'_k &= \bar{D}(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, E'_l, E''_l), \\ \sigma'_{ij} \varepsilon'_{ij} + \sigma'_{ij} \varepsilon''_{ij} - D'_k E'_k - D''_k E'_k &= \bar{H}(\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, E'_l, E''_l) \end{aligned}$$

однозначно визначений і зображається у вигляді

$$\begin{aligned} \sigma'_{ij} &= \frac{\partial H}{\partial \varepsilon'_{ij}} - \frac{\partial D}{\partial \varepsilon'_{ij}}, \quad \sigma''_{ij} = \frac{\partial H}{\partial \varepsilon''_{ij}} + \frac{\partial D}{\partial \varepsilon'_{ij}}, \\ D'_k &= -\frac{\partial H}{\partial E'_k} + \frac{\partial D}{\partial E'_k}, \quad D''_k = -\frac{\partial H}{\partial E''_k} - \frac{\partial D}{\partial E'_k} \end{aligned} \quad (21)$$

тоді і тільки тоді, коли виконуються такі умови симетрії:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}} - \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial \varepsilon'_{ij}} &= \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial \varepsilon'_{ij}} - \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}}, \\ \frac{\partial D'_k}{\partial E'_l} - \frac{\partial D'_l}{\partial E'_k} &= \frac{\partial D'_l}{\partial E'_k} - \frac{\partial D'_k}{\partial E'_l}, \\ \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial E'_k} - \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial E'_j} &= -\left( \frac{\partial D'_k}{\partial \varepsilon'_{ij}} - \frac{\partial D'_j}{\partial \varepsilon'_{kl}} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

при цьому

$$\begin{aligned} H &= \int_0^1 \bar{H}(\lambda \varepsilon'_{ij}, \lambda \varepsilon''_{ij}, \lambda E'_k, \lambda E''_k) \frac{d\lambda}{\lambda}, \\ D &= \int_0^1 \bar{D}(\lambda \varepsilon'_{ij}, \lambda \varepsilon''_{ij}, \lambda E'_k, \lambda E''_k) \frac{d\lambda}{\lambda}. \end{aligned}$$

У загальному випадку розв'язок системи рівнянь (20) містить складові, аналогічні функціям  $g'_{ij}, g''_{ij}, g'_k, g''_k$  в рівняннях (15). Однак вони також не дають ніякого внеску в дисипативну  $\bar{D}$  і консервативну  $\bar{H}$  характеристики. Сказати щонебудь більше про ці функції, як і про функції  $g'_{ij}, g''_{ij}, g'_k, g''_k$  з (15), не можна.

Якщо амплітудні рівняння отримані в результаті усереднення по Гальоркіну (перша інтерпретація амплітудних рівнянь [5]) яких-небудь загальних визначальних рівнянь, умова інваріантності амплітуд відносно зсуву в часі виконується автоматично. При цьому виникає питання про виконання умов симетрії типу (18) і (22). Якщо в якості загальних виступають кратноїнтегральні співвідношення електров'язкопружності, для ядер яких постулюється «принцип взаємності», рівності (18) або (22) виконуються [3]. Більше того, мають місце сильніші рівності, наприклад

$$\frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}} = \frac{\partial \sigma'_{kl}}{\partial \varepsilon'_{ij}}, \quad \frac{\partial \sigma''_{ij}}{\partial \varepsilon'_{kl}} = \frac{\partial \sigma''_{kl}}{\partial \varepsilon'_{ij}},$$

які є достатніми, але не необхідними для рівностей (18). Отже умови симетрії (18) допускають ширший клас амплітудних залежностей



тей, що виражаються через потенціали, ніж припущення про виконання «принципу взаємності» для ядер загальної кратноінтегральної теорії електров'язкопружності.

У загальному випадку питання про симетрію типу (18) або (22), як і питання про виконання «принципу взаємності», залишається відкритим. Незважаючи на це, будь-які амплітудні рівняння, отримані в результаті усереднення по Гальоркіну загальних рівнянь, допускають виділення потенціальної частини. Решта членів цих рівнянь типу функцій  $g'_{ij}, g''_{ij}, g'_k, g''_k$  в (15) не будуть впливати на дисипацію та накопичення і тому, як це робиться в подібних випадках в класичній континуальній механіці, можуть бути відкинуті.

У лінійному випадку рівняння (17) і (21) є точними.

Наведені результати отримані незалежно від типу матеріальної симетрії середовища. При їх використанні для середовищ з конкретною симетрією можна виходити з тих чи інших зображень скалярних функцій тензорних аргументів в рівняннях (17) і (21). Це дозволяє конкретизувати амплітудні рівняння безпосередньо за результатами експериментів на гармонічне навантаження.

Якщо покласти

$$\tilde{U} = U + iD,$$

то рівняння (17) можна записати в комплексному вигляді

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \epsilon'_{ij}} + i \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \epsilon''_{ij}}, \quad \tilde{E}_k = \frac{\partial \tilde{U}}{\partial D'_k} + i \frac{\partial \tilde{U}}{\partial D''_k}.$$

Аналогічне співвідношення можна отримати для рівнянь (21).

### Список використаних джерел

1. Карнаухов В.Г., Киричок И.Ф. Электротермовязкоупругость: Механика связанных полей в элементах конструкций. – Киев: Наук. Думка, 1988. – Т. 4. – 320 с.
2. Митропольский Ю.А. Нелинейная механика. Одночастотные колебания. – К.: Ин-т математики НАН Украины, 1997. – 344 с.
3. Михайленко В.В. О потенциальности определяющих уравнений для неупругих пьезоэлектрических материалов при моногармонических воздействиях // Прикл. механика. – 1997. – 33, N 6. – С. 49-51.
4. Karnaukhov V.G., Mikhailenko V.V. Nonlinear single-frequency vibrations and dissipative heating of inelastic piezoelectric bodies // Int. Appl. Mech. – 2002. – 38, N 5. – P. 521-547.
5. Senchenkov I.K., Karnaukhov V.G. Thermomechanical behaviour of nonlinear viscoelastic materials under harmonic loading // Int. Appl. Mech. – 2001. – 37, N 11. – P. 1400 - 1432.

Надійшла до редколегії 20.01.2007



УДК 539.3

Леонід В. Мольченко, д.ф.-м.н., професор,  
Ірина І. Лоос, к.ф.-м.н.,  
Равшан Ш. Індіамінов, к.ф.-м.н.

**Розв'язуюча система нелінійних рівнянь  
магнітопружності для одношарових  
ізотропних оболонок обертання змінної  
жорсткості.**

*В даній статті отримана розв'язуюча  
система нелінійних рівнянь магнітопружності  
для ізотропних оболонок обертання, які  
знаходяться під дією нестационарних  
механічних і електромагнітних полів.*

*Ключові слова: оболонка, магнітне поле,  
магнітопружність.*

Чисельні конструктивні елементи машин і  
апаратів сучасної техніки являють собою  
оболонки різної форми та структури зі змінними  
геометричними і механічними параметрами.

Для дослідження несучої здатності  
конструкцій із оболонок, які працюють при  
нестационарних силових і електромагнітних  
впливах, в першу чергу потрібно знання їх  
напружено-деформівного стану і  
електромагнітних ефектів, що приводить до  
необхідності розробки ефективних і достатньо  
точних методів розв'язання нелінійних крайових  
задач магнітопружності.

Будемо розглядати гнучкі оболонки  
обертання змінної товщини у яких координатна  
поверхня має форму замкнену в коловому  
напрямку.

Припускаємо, що оболонка знаходиться під  
дією несиметричного нестационарного  
механічного і магнітного впливів. Процесами  
поляризації і намагнічування, а також  
температурними напруженнями нехтуємо.  
Розглядувані оболонки вважаються  
однорідними і ізотропними, матеріал підлягає  
узагальненому закону Гука і має скінченну  
електропровідність.

Всередині оболонки передбачається  
справедливість рівнянь Максвелла. Координату  
поверхню в недеформованому стані віднесемо  
до криволінійної системи координат  $s$  і  $\theta$ ,

I. V. Mol'chenko, D.Sci. (Phys.-Math.), Full  
Professor,  
I. I. Loos, Cand.Sci. (Phys.-Math.),  
R. Sh. Indiaminov, Cand.Sci. (Phys.-Math.)

**The solving system of nonlinear  
equations of magnetoelasticity for one-layer  
isotropic rotation shells of variable hard.**

*In the present paper the solving system of  
nonlinear equations of magnetoelasticity for  
isotropic rotation shells under the action of  
mechanic and magnetic loads has been obtained.*

*Key Words: shell, magnetic field,  
magnetoelasticity.*

де  $s$  - довжина дуги твірної (меридіану), яка  
відраховується від деякої фіксованої точки,  $\theta$  -  
центральный кут у паралельному колі, який  
відраховується від обраної площини.  
Координатні лінії  $s = \text{const}$  и  $\theta = \text{const}$  є лініями  
головних кривизн координатної поверхні.  
Обираючи координату  $\xi$  за нормаллю до  
координатної поверхні обертання, відносимо  
оболонку до координатної просторової системи  
координат  $s, \theta, \xi$ .

Товщина оболонки є функцією  $s, \theta$ ,  
 $h = h(s, \theta)$ .

В декартовій системі координат  $x, y, z$   
рівняння координатної поверхні має вигляд

$$x = r(s) \cos \theta, \quad y = r(s) \sin \theta, \quad z = z(s), \quad (1)$$

$$(s_0 \leq s \leq s_N, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi)$$

де  $r = r(s)$  - радіус паралельного кола;  $z(s)$   
- відстань за віссю обертання від початкової  
площини  $z = z_0$ .

Вісь  $oz$  співпадає з віссю обертання  
координатної поверхні, а рівняння

$$x = r(s), \quad z = z(s), \quad (2)$$

є параметричними рівняннями твірної в  
площині  $xoz$ , яку надалі будемо називати  
меридіаном.

Параметри Ламе в цьому випадку приймають



вигляд

$$A=l, \quad B=r, \quad (3)$$

а радіуси головних кривизн  $R_s$  и  $R_\theta$  дорівнюють відповідно радіусам кривизн меридіана і довжині відрізка, паралельного нормалі, обмеженого координатною поверхнею і віссю обертання. Якщо  $\varphi$  - кут між нормаллю до координатної поверхні і віссю обертання, то

$$\frac{1}{R_\theta} = \frac{\sin \varphi}{r}, \quad \frac{dz}{ds} = \sin \varphi. \quad (4)$$

Перше рівняння Кодаці-Гаусса з врахуванням (4) можна записати у наступному вигляді:

$$\frac{dr}{ds} = \cos \varphi. \quad (5)$$

Припустимо, що геометричні та механічні характеристики розглядуваних оболонок такі, що для опису процесу деформування застосовується варіант геометрично нелінійної теорії тонких оболонок у квадратичному наближенні [1], в основу якої покладена гіпотеза недеформованих нормалей Кірхгофа-Лява.

Враховуючи описану геометрію оболонки обертання змінної у двох координатних напрямках жорсткості, основні рівняння отримаємо з загальних співвідношень, які наведені в роботі [3].

Перейдемо до виводу розв'язуючої системи нелінійних диференціальних рівнянь, які описують деформацію гнучких струмонесучих оболонок обертання змінної жорсткості, які знаходяться під дією несиметричного нестационарного механічного і магнітного полів.

Враховуючи наведений нижче метод розв'язання, а також простоту представлення параметрів геометрії та структури оболонки і зручність формулювання граничних умов на її контурах, приводимо вихідні співвідношення до системи диференціальних рівнянь в частинних похідних у нормальній формі Коші відносно однієї з незалежних змінних, тобто довжини дуги меридіану  $S$ .

Оскільки оболонка замкнена у коловому напрямку, в якості розв'язуючих функцій обираємо наступні:

$$u, v, w, \vartheta_s, N_s, \bar{S}, \bar{Q}_s, M_s, E_\theta, B_\xi, \quad (6)$$

де

$$\bar{S} = S + \frac{2 \sin \varphi}{r} H, \quad (7)$$

$$\bar{Q}_s = Q_s + \left( N_s - \frac{\sin \varphi}{r} M_\theta \right) \vartheta_s +$$

$$+ S \vartheta_\theta + \frac{1}{r} \frac{\partial H}{\partial \theta}.$$

Використовуючі основні рівняння, після відповідних перетворень [3], отримуємо розв'язуючу нелінійну систему гіперболо-параболічних рівнянь десятого порядку у формі Коші. Векторна форма системи має вигляд (8):

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial s} = \bar{F} \left( s, \theta, t, \bar{N}, \frac{\partial \bar{N}}{\partial \theta}, \frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial \theta^2}, \frac{\partial^3 \bar{N}}{\partial \theta^3}, \frac{\partial^4 \bar{N}}{\partial \theta^4}, \frac{\partial \bar{N}}{\partial t}, \frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial t^2} \right),$$

де

$\bar{N} = \bar{N} \{ u, v, w, \vartheta_s, N_s, \bar{S}, \bar{Q}_s, M_s, E_\theta, B_\xi \}^T$  – вектор стовпець шуканих функцій.

Компоненти вектора

$$\bar{F} = \bar{F} \{ f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7, f_8, f_9, f_{10} \}^T$$

мають вигляд (9).

Компоненти сили Лоренца мають вигляд [3].

Отримана зв'язана двовимірною нелінійною системою гіперболо-параболічних рівнянь десятого порядку в частинних похідних зі змінними коефіцієнтами, яка описує несиметричну деформацію гнучких струмонесучих оболонок обертання змінної у двох координатних напрямках жорсткості.

Компоненти сили Лоренца вміщують нелінійні члени, обумовлені врахуванням переміщення оболонки при її деформуванні.

Для визначення довільностей, що містяться у загальному розв'язку системи диференціальних рівнянь (8), на граничних контурах  $s = s_0$  і  $s = s_N$  необхідно задавати умови їх навантаження чи закріплення. На кожному контурі повинні бути задані п'ять граничних умов. Таким чином, задача динаміки гнучких струмонесучих оболонок обертання змінної в двох координатних напрямках жорсткості, які знаходяться під дією нестационарних механічних та електромагнітних сил, зведена до нелінійної крайової задачі, яку можна сформулювати наступним чином.

$$\text{В області } R = \left\{ s_0 \leq s \leq s_N, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi \right\}$$

потрібно знайти розв'язок  $\bar{N}(s, \theta, t)$  нелінійної системи диференціальних рівнянь в частинних похідних зі змінними коефіцієнтами (11):

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial s} = \bar{F} \left( s, \theta, t, \bar{N}, \frac{\partial \bar{N}}{\partial \theta}, \frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial \theta^2}, \frac{\partial^3 \bar{N}}{\partial \theta^3}, \frac{\partial^4 \bar{N}}{\partial \theta^4}, \frac{\partial \bar{N}}{\partial t}, \frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial t^2} \right),$$



$$\begin{aligned}
 f_1 &= \varphi_4 - \frac{w}{R_s} - \frac{1}{2} \vartheta_s^2, & f_2 &= \varphi_7 + \frac{\cos \varphi}{r} v - \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} - \varphi_1 \vartheta_s, \\
 f_3 &= \frac{u}{R_s} - \vartheta_s, & f_4 &= \varphi_5 + \frac{1}{2R_s} \varphi_1^2, \\
 f_5 &= -\frac{\cos \varphi}{r} N_s - \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{S}}{\partial \theta} + \frac{2 \sin \varphi}{r^2} \varphi_8 + \frac{\cos \varphi}{r} \varphi_9 - \frac{1}{R_s} \bar{Q}_s + \frac{1}{R_s} N_s \vartheta_s - \\
 &\quad - \frac{\sin \varphi}{r R_s} \varphi_{10} \vartheta_s + \frac{1}{R_s} \varphi_1 \bar{S} - \frac{2 \sin \varphi}{r R_s} \varphi_1 \varphi_6 - r(P_s + \rho F_s^{\wedge}) + r \rho h \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \\
 f_6 &= -\frac{1}{r} \varphi_{13} - \frac{2 \cos \varphi}{r} \bar{S} - \frac{\sin \varphi}{r^2} \varphi_{14} + \frac{\sin \varphi}{r} \varphi_1 \varphi_9 - \frac{\sin \varphi}{r R_s} \varphi_1 M_s + \\
 &\quad + \frac{\sin \varphi}{r} \bar{S} \vartheta_s - \frac{2 \sin^2 \varphi}{r^2} \varphi_6 \vartheta_s - r(P_\theta + \rho F_\theta^{\wedge}) + r \rho h \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}, \\
 f_7 &= \frac{1}{R_s} N_s + \frac{\sin \varphi}{r} \varphi_9 + f_4 N_s + f_5 \vartheta_s - \frac{\cos \varphi}{r R_s} \varphi_{10} \vartheta_s - \frac{\sin \varphi}{r} \varphi_{10} \vartheta_s - \\
 &\quad - \frac{\sin \varphi}{r} \varphi_{10} f_4 + \varphi_1 f_6 - \frac{2 \cos \varphi}{r R_s \varphi_1 \varphi_6} - \frac{2 \sin \varphi}{r} \varphi_1 \varphi_{11} + \varphi_{15} \bar{S} - \frac{2 \sin \varphi}{r} \varphi_6 \varphi_{15} - \\
 &\quad - \frac{\cos \varphi}{r} \bar{Q}_s + \frac{\cos \varphi}{r} N_s \vartheta_s + \frac{\cos \varphi}{r} \varphi_1 \bar{S} - \frac{1}{r^2} \varphi_{19} - \frac{2 \cos \varphi}{r^2} \varphi_8 + \frac{1}{r} \varphi_1 \varphi_{13} - \\
 &\quad - \frac{1}{r R_s} \varphi_1 \frac{\partial M_s}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \varphi_9 \varphi_{16} - \frac{1}{r R_s} \varphi_{16} M_s + \frac{1}{r} \vartheta_s \frac{\partial \bar{S}}{\partial \theta} - \frac{2 \sin \varphi}{r^2} \varphi_8 \vartheta_s + \frac{1}{r} \bar{S} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} - \\
 &\quad - \frac{2 \sin \varphi}{r^2} \varphi_6 \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} - r(P_\xi + \rho F_\xi^{\wedge}) + r \rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \\
 f_8 &= -\frac{\cos \varphi}{r} M_s + \bar{Q}_s + \frac{\cos \varphi}{r} \varphi_{10} - \frac{2}{r} \varphi_8, \\
 f_9 &= -\sigma \mu \left[ E_\theta + 0.5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_s^+ + B_s^-) - \frac{\partial u}{\partial t} B_\xi \right] + \frac{1}{h} (B_s^+ - B_s^-), \\
 f_{10} &= \frac{\partial B_s}{\partial t} - \frac{\cos \varphi}{r} E_\theta + \\
 &\quad + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \frac{\mu}{\sigma} \left( \frac{\partial B_\xi}{\partial \theta} + \frac{r}{h} (B_\theta^+ - B_\theta^-) \right) - \frac{\partial v}{\partial t} B_\xi + 0.5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_\theta^+ - B_\theta^-) \right],
 \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 &= -\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{r} v, & \varphi_2 &= \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r} u + \frac{\sin \varphi}{r} w + \frac{1}{2r^2} \left( \frac{\partial w}{\partial \theta} \right)^2 - \\
 &\quad - \frac{\sin \varphi}{r^2} v \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{\sin^2 \varphi}{2r^2} v^2, \\
 \varphi_3 &= -\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r} \vartheta_s - \frac{\sin \varphi}{2r} \vartheta_s^2,
 \end{aligned}$$



$$\varphi_4 = d_{11}N_s + d_{13}\varphi_2, \quad \varphi_5 = d_{32}M_s + d_{34}\varphi_3,$$

$$\varphi_6 = d_{61}\bar{S} + \frac{d_{62}}{r} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} + \frac{d_{62} \cos \varphi}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} - \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \theta} +$$

$$+ \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \vartheta_s \frac{\partial w}{\partial \theta} - \frac{d_{62} \sin^2 \varphi}{r^2} v \vartheta_s,$$

$$\varphi_7 = \left( d_{21} - \frac{d_{22}d_{61}}{d_{62}} \right) \bar{S} + \frac{d_{22}}{d_{62}} \varphi_6,$$

$$\varphi_8 = \frac{\partial d_{61}}{\partial \theta} \bar{S} + d_{61} \frac{\partial \bar{S}}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial d_{62}}{\partial \theta} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} + \frac{d_{62}}{r} \frac{\partial^2 \vartheta_s}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial \theta} \frac{\partial w}{\partial \theta} +$$

$$+ \frac{d_{62} \cos \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial \theta} \frac{\partial u}{\partial \theta} - \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} +$$

$$+ \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial \theta} \vartheta_s \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \vartheta_s \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} -$$

$$- \frac{\sin^2 \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial \theta} v \vartheta_s - \frac{d_{62} \sin^2 \varphi}{r^2} v \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} - \frac{d_{62} \sin^2 \varphi}{r^2} \vartheta_s \frac{\partial v}{\partial \theta},$$

$$\varphi_9 = d_{41}N_s + d_{43}\varphi_2, \quad \varphi_{10} = d_{52}M_s + d_{54}\varphi_3,$$

$$\varphi_{11} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \frac{\partial w}{\partial \theta} -$$

$$- \frac{\sin \varphi}{r^2} v \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \varphi}{r^2} v \frac{\partial v}{\partial \theta},$$

$$\varphi_{12} = -\frac{1}{r^3} \frac{\partial^3 w}{\partial \theta^3} + \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r} \vartheta_s \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta},$$

$$\varphi_{13} = \frac{\partial d_{43}}{\partial \theta} \varphi_2 + d_{41} \frac{\partial N_s}{\partial \theta} + d_{43} \varphi_{11}, \quad \varphi_{14} = \frac{\partial d_{54}}{\partial \theta} \varphi_3 + d_{52} \frac{\partial M_s}{\partial \theta} + d_{54} \varphi_{12},$$

$$\varphi_{14} = \frac{\partial d_{54}}{\partial \theta} \varphi_3 + d_{52} \frac{\partial M_s}{\partial \theta} + d_{54} \varphi_{12},$$

$$\varphi_{15} = \frac{\cos \varphi}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} - \frac{1}{rR_s} \frac{\partial u}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2} v + \frac{\sin \varphi}{r} f_2,$$

$$\varphi_{16} = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta},$$

$$\varphi_{17} = \frac{1}{r} \frac{\partial^3 v}{\partial \theta^3} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} \frac{\partial^3 w}{\partial \theta^3} -$$

$$- \sin \varphi \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} v \frac{\partial^3 w}{\partial \theta^3} \right) +$$

$$+ \frac{\sin^2 \varphi}{r^2} \left( \frac{\partial v}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\sin^2 \varphi}{r} v \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2},$$



$$\varphi_{18} = \frac{1}{r^3} \frac{\partial^4 w}{\partial \theta^4} + \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial^3 v}{\partial \theta^3} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial^2 g_s}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \varphi}{r} \left( \frac{\partial^2 g_s}{\partial \theta} \right)^2 - \frac{\sin \varphi}{r} g_s \frac{\partial^2 g_s}{\partial \theta^2}, \quad (10)$$

$$\varphi_{19} = d_{52} \frac{\partial^2 M_s}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 d_{54}}{\partial \theta^2} \varphi_3 + 2 \frac{\partial d_{54}}{\partial \theta} \varphi_{12} + d_{54} \varphi_{18},$$

$$\varphi_{20} = -\frac{\partial^2 g_s}{\partial \theta^2} + \frac{1}{R_s} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2}, \quad \varphi_{21} = \frac{\partial d_{11}}{\partial \theta} N_s + d_{11} \frac{\partial N_s}{\partial \theta} + d_{13} \varphi_{11},$$

$$\varphi_{22} = \varphi_{21} - g_s \frac{\partial g_s}{\partial \theta} - \frac{1}{R_s} \frac{\partial w}{\partial \theta}, \quad \varphi_{23} = -\frac{\partial g_s}{\partial \theta} + \frac{1}{R_s} \frac{\partial u}{\partial \theta},$$

$$\varphi_{24} = \frac{\partial d_{32}}{\partial \theta} M_s + d_{32} \frac{\partial M_s}{\partial \theta} + d_{34} \varphi_{12}, \quad \varphi_{25} = \varphi_{24} + \frac{1}{R_s} \varphi_1 \varphi_{16},$$

$$\varphi_{26} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left( d_{21} - \frac{d_{22} d_{61}}{d_{62}} \right) \bar{S} + \left( d_{21} - \frac{d_{22} d_{61}}{d_{62}} \right) \frac{\partial \bar{S}}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{d_{22}}{d_{62}} \right) \varphi_6 + \frac{d_{22}}{d_{62}} \varphi_8,$$

$$\varphi_{27} = \varphi_{26} - \varphi_1 \frac{\partial g_s}{\partial \theta} - \varphi_{16} g_s - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta},$$

$$\begin{aligned} \varphi_{28} = & -\frac{\cos \varphi}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \varphi_{27} - \left( \frac{\sin \varphi}{r R_s} + \frac{\cos^2 \varphi}{r^2} \right) u + \frac{\cos \varphi}{r} f_1 + \\ & + \left( \frac{\cos \varphi}{r R_s} - \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2} \right) w + \frac{\sin \varphi}{r} f_3 - \frac{\cos \varphi}{r^3} \left( \frac{\partial w}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \varphi_{23} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \\ & + \frac{\sin 2\varphi}{r^3} v \frac{\partial w}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r^2} f_2 \frac{\partial w}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r^2} \varphi_{23} v + \frac{\sin 2\varphi}{2r^2} \left( \frac{1}{R_s} - \frac{\sin \varphi}{r} \right) v^2 + \\ & + \frac{\sin^2 \varphi}{r^2} f_2 v - \frac{\cos \varphi}{r^2 R_s} v \frac{\partial w}{\partial \theta}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_{29} = & \frac{2 \cos \varphi}{r^3} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} \varphi_{20} + \left( \frac{\cos \varphi}{r^2 R_s} - \frac{\sin 2\varphi}{r^3} \right) \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{r^2} \varphi_{27} - \\ & - \left( \frac{\sin \varphi}{r R_s} + \frac{\cos^2 \varphi}{r^2} \right) g_s + \frac{\cos \varphi}{r} f_4 - \left( \frac{\cos \varphi}{2r R_s} - \frac{\sin 2\varphi}{4r^2} \right) g_s^2 - \frac{\sin \varphi}{r} f_4 g_s, \end{aligned}$$

$$\varphi_{30} = \frac{\partial d_{54}}{\partial \bar{S}} \varphi_3 + d_{52} f_8 + d_{54} \varphi_{24},$$

$$\begin{aligned} \varphi_{31} = & \frac{\partial d_{61}}{\partial \bar{S}} \bar{S} + d_{61} f_6 + \frac{1}{r} \frac{\partial d_{62}}{\partial \bar{S}} \frac{\partial g_s}{\partial \theta} - \frac{d_{62} \cos \varphi}{r^2} \frac{\partial g_s}{\partial \theta} + \frac{d_{62}}{r} \varphi_{25} + \\ & + \left( \frac{\cos \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial \bar{S}} - \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2 R_s} - \frac{2d_{62} \cos^2 \varphi}{r^3} \right) \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{d_{62} \cos \varphi}{r^2} \varphi_{23} - \\ & - \left( \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial \bar{S}} + \frac{d_{62} \cos \varphi}{r^2 R_s} - \frac{d_{62} \sin 2\varphi}{r^3} \right) \frac{\partial u}{\partial \theta} - \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \varphi_{22} + \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 & + \left( \frac{\sin \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial s} + \frac{d_{62} \cos \varphi}{r^2 R_s} - \frac{d_{62} \sin 2\varphi}{r^3} \right) g_s \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} f_4 \frac{\partial w}{\partial \theta} + \\
 & - \left( \frac{\sin^2 \varphi}{r^2} \frac{\partial d_{62}}{\partial s} + \frac{d_{62} \sin^2 \varphi}{r^2 R_s} - \frac{d_{62} \sin \varphi \sin 2\varphi}{r^3} \right) v g_s + \\
 & + \frac{d_{62} \sin \varphi}{r^2} \varphi_{23} g_s - \frac{d_{62} \sin^2 \varphi}{r^2} f_2 g_s - \frac{d_{62} \sin^2 \varphi}{r^2} f_4 v .
 \end{aligned}$$

які задовольняють граничним і початковим умовам відповідно

$$B_1(\bar{N}(s_0, \theta, t)) = \bar{b}_1, B_2(\bar{N}(s_N, \theta, t)) = \bar{b}_2 \quad (12)$$

$$\bar{N} = 0, \quad \frac{\partial \bar{N}}{\partial t} = 0 \quad \text{при} \quad t = 0 \quad (13)$$

і умові періодичності за  $\theta$  з періодом  $2\pi$ , де  $\bar{N} = \bar{N} \{u, v, w, g_s, N_s, \bar{S}, \bar{Q}_s, M_s, E_\theta, B_\xi\}^T$  - вектор функція;  $B_1, B_2$  - відомі прямокутні матриці;  $\bar{b}_1, \bar{b}_2$  - задані вектори.

В наведених співвідношеннях використані загальноприйняті в теорії оболонок і теорії електромагнітопружності позначення. Крім того, тут введені такі позначення:  $B_s^\pm, B_\theta^\pm$  - відомі тангенційні складові магнітного поля на поверхні оболонки.

В подальшому, при розв'язанні крайової задачі, пропонується використовувати методику роботи [2].

### Список використаних джерел

1. Григоренко Я. М., Мольченко Л. В. Основи теорії пластин та оболонок. - Київ: Либідь, 1993. - 231 с.
2. Мольченко Л.В. Методика решения двумерных нелинейных краевых задач магнитоупругости тонких оболочек. // Прикл. механика. - 2005. Том 41, № 5. - с. 32-39.
3. Улітко А.Т., Мольченко Л.В., Ковальчук В.Ф. Магнітопружність при динамічному навантаженні. - Київ: Либідь, 1994. - 155 с.

Надійшла до редколегії 26.12.2006



УДК 539.3

Віктор М. Січко, к.ф.-м.н., доцент  
Юрій Г. Золотий,  
Ірина Ю. Жук

**Метод визначення деформацій поверхні оболонки довільної форми при її резонансній вібрації на основі голографічної інтерферометрії.**

В даній статті пропонується методика розшифровки стробо-голографічних інтерферограм оболонок та лопаток ГТД при резонансних коливаннях. Розроблена оптична схема, яка дозволяє реалізувати багато-голограмний метод при послідовній реєстрації інтерферограм.

Ключові слова: оболонка, інтерферограма, коливання.

Victor M. Sichko, Cand.Sci. (Phys.-Math.),  
Associate Professor  
Yuriy G. Zolotoy,  
Irina Y. Zhuk

**Technique to define deformations of surface casing of arbitrary form at its resonance vibration based on holographic interferometry.**

In work there is the offered concrete method of decoding of stroboscopic holographic interference holograms shells and the GTE shoulder-blades at resonance vibrations. Developed optical chart which allows to realize much a hologram method during successive registration of interference holograms.

Key Words: shell, interference hologram, vibration.

### Постановка проблеми.

В арсеналі сучасної експериментальної механіки одним з ефективних методів дослідження власних коливань оболонкових конструкцій є метод голографічної інтерферометрії [1]. Голографічний інтерферометр має високу чутливість по переміщенням, дозволяє проводити безконтактне вимірювання амплітуд коливань в широкому діапазоні частот на великій ділянці візуально спостерігаємої поверхні з малим кроком її дискретизації.

Велика кількість робіт присвячена загальним принципам розшифровки голографічних інтерферограм, тобто визначенню розподілу переміщень по досліджуваній поверхні [2]. Найбільш прийнятним для отримання кількісної інформації є трьохголограмний двоекспозиційний метод, що базується на використанні системи рівнянь:

$$\vec{K}_i \vec{U} = N_i \lambda \quad (i = 1, 2, 3 \dots) \quad (1)$$

де  $\vec{U}(x, y, z)$  – вектор переміщення точки досліджуваної поверхні в декартовій системі координат;

$\vec{K}_i$  – вектор чутливості інтерферометра, що відповідає цій точці на  $i$ -й інтерферограмі і визначається, як різниця одиничних векторів спостереження  $\vec{K}_e$  та освітлення  $\vec{K}_o$ ;

$N_i$  – порядки інтерференційних смуг в цій точці на відповідних інтерферограмах;

$\lambda$  – довжина хвилі випромінювання лазера.

В загальному випадку реалізація такого підходу до розшифровки інтерферограм є достатньо складною, бо вимагає одночасної реєстрації трьох, а то і чотирьох інтерферограм (якщо порядки  $N_i$  визначені з точністю до знаку). Оптична схема голографічного стенду стає надзвичайно громіздкою, а експеримент дуже трудомістким.

Друга проблема, що виникає при дослідженні деформованого стану поверхні оболонки, полягає в тому, що її поверхня може не мати аналітичного визначення а бути заданою поточною у вигляді таблиці в своїй системі координат (наприклад, лопатка газотурбінного двигуна (ГТД)). При цьому з'являються складні прив'язки



геометричних параметрів інтерферометра до глобального базису оболонки.

Проблематичним є також обчислення деформацій поверхні, що задана дискретно.

**Ціль роботи** – розробка оптимальної оптичної схеми голографічного стенду, придатної для дослідження резонансних коливань оболонкових конструкцій і створення методики визначення деформованого стану вібруючої поверхні по даним голографічного експерименту.

**Методика розшифровки голографічних інтерферограм** по визначенню вібропереміщень точок поверхні вібруючої оболонки створювалась на основі співвідношення (1) в припущенні, що інтерферограми реєструються при стробованому освітленні і можуть розглядатись, як двоекспозиційні [3]. Освітлення моделі та спостереження інтерферограм передбачаються точковими, бо розміри оболонки суттєво ускладнюють реалізацію декількох колімованих освітлюючих пучків та телескопічну систему спостереження інтерферограф. Окрім того, в загальному випадку напрямок вектора  $\vec{U}$  не є апіорі відомим, а порядки інтерференційних смуг визначаються з точністю до знаку. Тому, в системі (I) треба мати чотири рівняння, причому, ніякі три з чотирьох  $\vec{K}_i$  не повинні бути компланарними.

Згідно цих вимог розроблена оптична схема голографічної установки, представлена на рис.1. В ній досліджувана оболонка (1) закріплена на горизонтальній платформі обертального пристрою, який дозволяє повернути її навколо вертикальної вісі на заданий кут і відновити в попередньому положенні з інтерферометричною точністю.

Для встановлення відповідності між картиною інтерференції та координатами точок поверхні на оболонку нанесена розміткова сітка. Лінії розмітки відповідають лініям головних кривизн при аналітично визначеній поверхні, або перерізам теоретичного креслення у випадку, коли поверхня задана дискретно.

Джерелом когерентного випромінювання служить He-Ne лазер ЛГН-222 (2). Його промінь проходить через електрооптичний модулятор МЛ-3 (3) і дзеркалом (4)

напрямається на світлоподілювач (5). Відбитий від нього промінь дзеркалом (6) та мікрооб'єктивом (7) формує опорну світлову хвилю (8), що падає на фотопластинку (9), де фіксується голограма. З променя, який пройшов через світлоподілювач, дзеркалами (10), (11) та мікрооб'єктивом (12) формується пучок освітлення (13). Дзеркало (10) змонтоване на циліндричній шарнірній опорі, яка дозволяє вивести його з променя, а потім знову відновити в попередньому положенні. Тобто є можливість оперативно за допомогою дзеркал (14), (15) та мікрооб'єктива (16) замінити освітлюючий пучок (13) на пучок (17) і навпаки.

При проведенні експерименту спочатку послідовно записуються дві інтерферограми з векторами освітлення  $\vec{K}_{O_1}$  і  $\vec{K}_{O_2}$  та вектором спостереження  $\vec{K}_C$ . Після повороту оболонки на заданий кут фіксуються ще дві інтерферограми (тепер заміна освітлюючих пучків проводиться в зворотньому порядку), котрим відповідають вектори освітлення  $\vec{K}_{O_3}$  і  $\vec{K}_{O_4}$  та вектор спостереження  $\vec{K}_C$ . Особливістю оптичної схеми голографічного стенду є наявність ще одного шарнірно закріпленого дзеркала (19). В робочому положенні це дзеркало спрямовує все випромінювання лазера в оптичний тракт (дзеркало (10) та об'єктив (21)), що дозволяє відновити дійсне зображення інтерферограми, яке точно співпадає з поверхнею оболонки.

При фотографуванні такої інтерферограми за допомогою стаціонарно встановленої цифрової фотокамери з'являється можливість точного (попиксельного) суміщення зображення оболонки, отриманого в білому світлі, з зображенням картини полос інтерференції в світлі лазерного випромінювання. Тобто, якщо розміткову сітку на поверхню оболонки нанести фарбою, що відповідає кольору лазерного променя, то на зображенні інтерферограми вона стає невидимою, що дозволяє спростити комп'ютерну обробку інтерферограм. В той же час цю сітку легко зафіксувати фотокамерою при звичайному освітленні, а її суміщення з інтерферограмою провести програмними засобами.



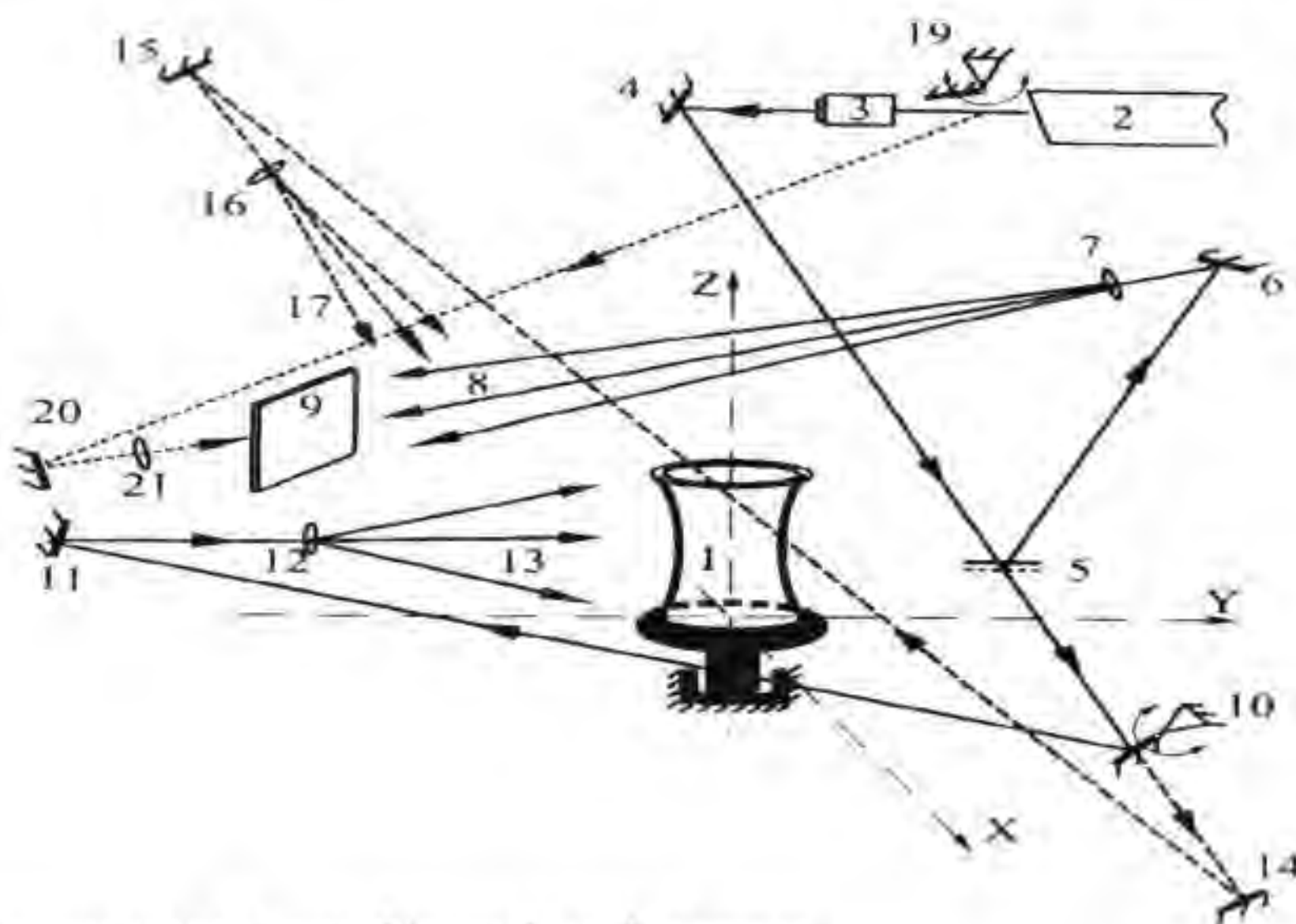


Рис.1 Оптична схема голографічного інтерферометра

Таким чином, маємо чотири напрямки освітлення оболонки при двох напрямках спостереження, які для кожної реперної точки дають змогу скласти систему рівнянь:

$$\begin{cases} \bar{U}(\bar{K}_{c1} - \bar{K}_{01}) = N_1 \cdot \lambda \\ \bar{U}(\bar{K}_{c1} - \bar{K}_{02}) = N_2 \cdot \lambda \\ \bar{U}(\bar{K}_{c2} - \bar{K}_{03}) = N_3 \cdot \lambda \\ \bar{U}(\bar{K}_{c2} - \bar{K}_{04}) = N_4 \cdot \lambda \end{cases} \quad (2)$$

В декартових координатах глобального базису оболонки ці рівняння мають вигляд:

$$\begin{cases} U_x \left( \frac{x_{c1} - x}{r_{c1}} + \frac{x_{01} - x}{r_{01}} \right) + U_y \left( \frac{y_{c1} - y}{r_{c1}} + \frac{y_{01} - y}{r_{01}} \right) + U_z \left( \frac{z_{c1} - z}{r_{c1}} + \frac{z_{01} - z}{r_{01}} \right) = N_1 \lambda \\ U_x \left( \frac{x_{c1} - x}{r_{c1}} + \frac{x_{02} - x}{r_{02}} \right) + U_y \left( \frac{y_{c1} - y}{r_{c1}} + \frac{y_{02} - y}{r_{02}} \right) + U_z \left( \frac{z_{c1} - z}{r_{c1}} + \frac{z_{02} - z}{r_{02}} \right) = N_2 \lambda \\ U_x \left( \frac{x_{c2} - x}{r_{c2}} + \frac{x_{03} - x}{r_{03}} \right) + U_y \left( \frac{y_{c2} - y}{r_{c2}} + \frac{y_{03} - y}{r_{03}} \right) + U_z \left( \frac{z_{c2} - z}{r_{c2}} + \frac{z_{03} - z}{r_{03}} \right) = N_3 \lambda \\ U_x \left( \frac{x_{c2} - x}{r_{c2}} + \frac{x_{04} - x}{r_{04}} \right) + U_y \left( \frac{y_{c2} - y}{r_{c2}} + \frac{y_{04} - y}{r_{04}} \right) + U_z \left( \frac{z_{c2} - z}{r_{c2}} + \frac{z_{04} - z}{r_{04}} \right) = N_4 \lambda \end{cases} \quad (3)$$



де  $U_x, U_y, U_z$  – проекції вектора вібропереміщення досліджуваної точки на осі координат;

$$r_i = \sqrt{(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2 + (z_i - z)^2}$$

– модуль вектора, що з'єднує  $i$ -ту точку спостереження з досліджуваною точкою,

$$r_0 = \sqrt{(x_0 - x)^2 + (y_0 - y)^2 + (z_0 - z)^2}$$

– модуль вектора, який з'єднує  $i$ -ту точку освітлення з досліджуваною точкою.

Коефіцієнти лівої частини рівнянь (3) визначаються геометрією оболонки та оптичної схеми, тобто, вони повинні бути визначені в загальній системі координат. З цією метою спроектований та виготовлений спеціальний координатний пристрій. Його рухома каретка виконує два поступальних ортогональних переміщення, а в якості "щупів" використовуються зондуючі промені лазерних діодів. Досвід показав зручність та достатньо високу точність таких вимірювань.

Порядки інтерференційних смуг  $N_i$  визначалися за допомогою комп'ютерної програми обробки інтерферограм в напівавтоматичному режимі. З метою зменшення випадкових осциляцій при визначенні дрібних частин смуг проводилась апроксимація та згладжування масивів  $N_i$  варіаційною кубічною сплайн-функцією [4].

Слід зазначити, що в випадку, коли  $N_i$  визначені тільки по модулю, то з системи рівнянь (3) будь-які три розв'язуються сумісно для визначення  $U_x, U_y, U_z$  при різних комбінаціях знаків при  $N_i$ , а четверте рівняння служить для вибору істинної комбінації знаків смуг (по мінімуму його нев'язки після підстановки розв'язань). Коли ж знаки смуг інтерференції відомі, то система (3) розв'язується методом найменших квадратів.

Розв'язавши систему (3) для кожного з вузлів розміткової сітки, отримаємо три прямокутних матриці переміщень  $U_x, U_y, U_z$ , які апроксимуються вздовж розміткових ліній степеневими поліномами. Це дає можливість обчислити похідні від переміщень по координатам для визначення деформацій.

#### Методика визначення деформацій.

При створенні методики ставилась задача зробити її універсальною незалежно від способу задання поверхні оболонки. На рис. 2 показана клітинка ABCD розміткової сітки,

через точку A якої проведемо загальний базис  $Axyz$ .

Місцевий базис виберемо так, щоб вісь  $x_1$  проходила через точки A і B, вісь  $z_1$  через точки A і C, а одиничний орт осі  $y_1$  був перпендикулярний площині векторів  $\overline{AB}$  і  $\overline{AC}$ .

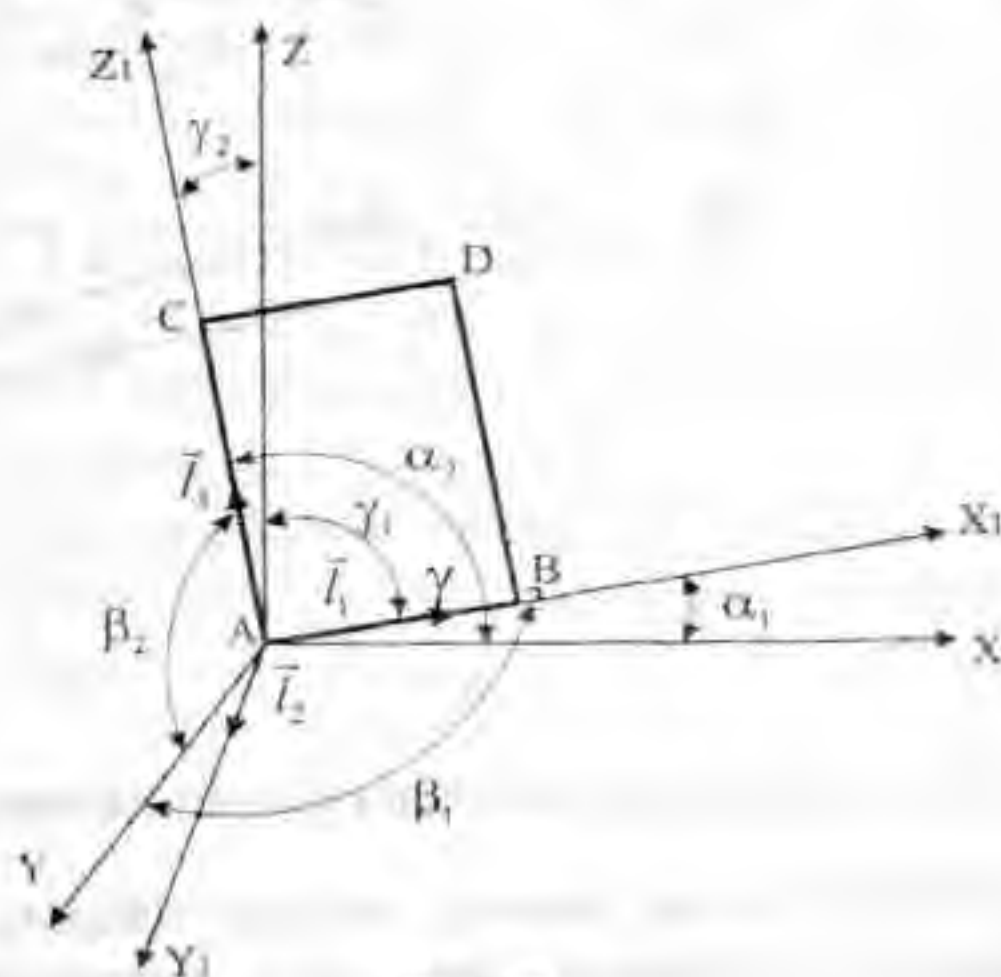


Рис. 2

Оскільки експериментальні значення інтерференційних смуг задаються в загальному базисі, а величини деформації і напружень визначаються у місцевому, установимо між ними зв'язок. Знаючи координати точок A, B, C, D в базисі  $Axyz$  запишемо напрямні косинуси осей  $x_1$  і  $z_1$  у загальному базисі:

$$\begin{aligned} \cos \alpha_1 &= \frac{X_B - X_A}{|\overline{AB}|} \\ \cos \alpha_2 &= \frac{X_C - X_A}{|\overline{AC}|} \end{aligned} \quad (4)$$

Напрямні косинуси  $\cos \beta_1, \cos \gamma_1, \cos \beta_2, \cos \gamma_2$  обчислюються аналогічно.

Запишемо одиничні вектори  $\overline{e}_1, \overline{e}_3$  осей  $x_1$  і  $z_1$ , які задані координатами в загальному базисі:

$$\begin{aligned} \overline{e}_1 &= \{\cos \alpha_1, \cos \beta_1, \cos \gamma_1\}; \\ \overline{e}_3 &= \{\cos \alpha_2, \cos \beta_2, \cos \gamma_2\} \end{aligned}$$

Нехай в базисі  $Axyz$  задано вектор переміщення точки A



$$\bar{U} = \{U_x, U_y, U_z\}$$

Знайдемо проекції цього вектора на вісі  $x_1$  і  $z_1$

$$U_{X1} = \bar{U} \cdot \bar{e}_1 = U_X \cos \alpha_1 + U_Y \cos \beta_1 + U_Z \cos \gamma_1$$

$$U_{Z1} = \bar{U} \cdot \bar{e}_3 = U_X \cos \alpha_2 + U_Y \cos \beta_2 + U_Z \cos \gamma_2$$

Напружено-деформований стан в місцевому базисі вважається плоским. Деформації в точці  $A$  визначимо за формулами Коші [5]:

$$\varepsilon_{x_1} = \frac{\partial U_{X1}}{\partial x_1}; \quad \varepsilon_{z_1} = \frac{\partial U_{Z1}}{\partial z_1};$$

$$\gamma_{x_1 z_1} = \frac{\partial U_{X1}}{\partial z_1} + \frac{\partial U_{Z1}}{\partial x_1} \quad (5)$$

Після диференціювання переміщень  $U_{X1}$  та  $U_{Z1}$  по відповідним координатам отримаємо вираз для деформацій розтягу і зсуву:

$$\varepsilon_{x_1} = \frac{\partial U_X}{\partial x} \cdot \cos^2 \alpha_1 + \frac{\partial U_Y}{\partial x} \cdot \cos \alpha_1 \cdot \cos \beta_1 + \frac{\partial U_Z}{\partial x} \cdot \cos \alpha_1 \cdot \cos \gamma_1;$$

$$\varepsilon_{z_1} = \frac{\partial U_X}{\partial z} \cdot \cos^2 \gamma_2 \cdot \cos \alpha_2 + \frac{\partial U_Y}{\partial z} \cdot \cos \gamma_2 \cdot \cos \beta_2 + \frac{\partial U_Z}{\partial z} \cdot \cos^2 \gamma_2;$$

$$\gamma_{x_1 z_1} = \frac{\partial U_X}{\partial x} \cdot \cos \alpha_1 \cdot \cos \alpha_2 + \frac{\partial U_Y}{\partial x} \cdot \cos \alpha_1 \cdot \cos \beta_2 + \frac{\partial U_Z}{\partial x} \cdot \cos \alpha_1 \cdot \cos \gamma_2 +$$

$$+ \frac{\partial U_X}{\partial z} \cdot \cos \gamma_2 \cdot \cos \alpha_1 + \frac{\partial U_Y}{\partial z} \cdot \cos \gamma_2 \cdot \cos \beta_1 + \frac{\partial U_Z}{\partial z} \cdot \cos \gamma_2 \cdot \cos \gamma_1.$$

Напруження в вузлах визначається за формулами:

$$\sigma_{x_1} = \frac{E}{1-\mu^2} (\varepsilon_{x_1} + \mu \varepsilon_{z_1});$$

$$\sigma_{z_1} = \frac{E}{1-\mu^2} (\varepsilon_{z_1} + \mu \varepsilon_{x_1});$$

$$\tau_{x_1 z_1} = \frac{E}{2(1+\mu)} \cdot \gamma_{x_1 z_1} \quad (7)$$

вібродоформаций  $\varepsilon_z$  вздовж вхідної кромки лопатки, визначені по даним голографічного експерименту за приведеною методикою. Для порівняння приведена епюра розподілу  $\varepsilon_z$ , визначена методом електротензометрії. Очевидною є хороша кореляція результатів.

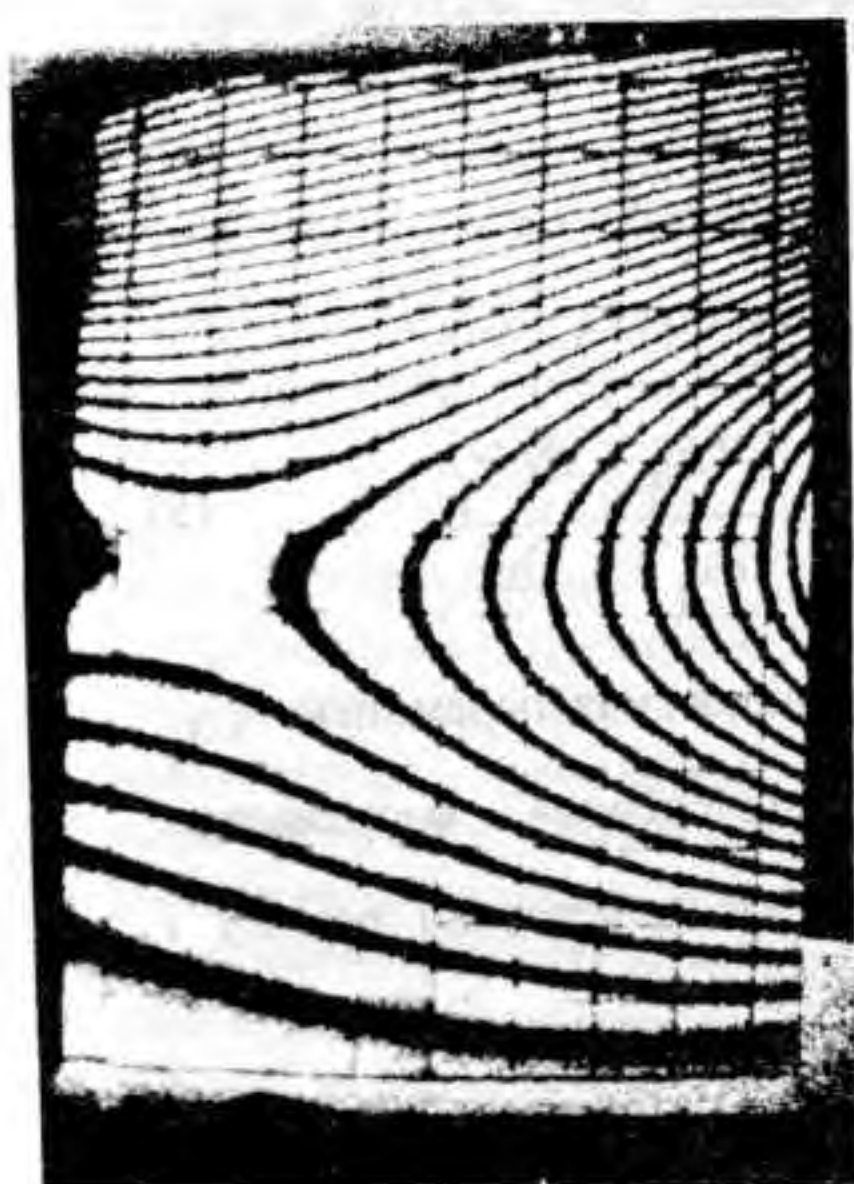
#### Висновки:

Розроблена оптична схема та запропонована методика визначення вібропереміщень та деформацій може успішно використовуватися для дослідження віброрезонансних явищ в оболонкових конструкціях. Особлива доцільність їх застосування виникає при дослідженнях високочастотних форм коливань з великими градієнтами вібропереміщень, коли застосування класичних методів вібродіагностики є проблематичним

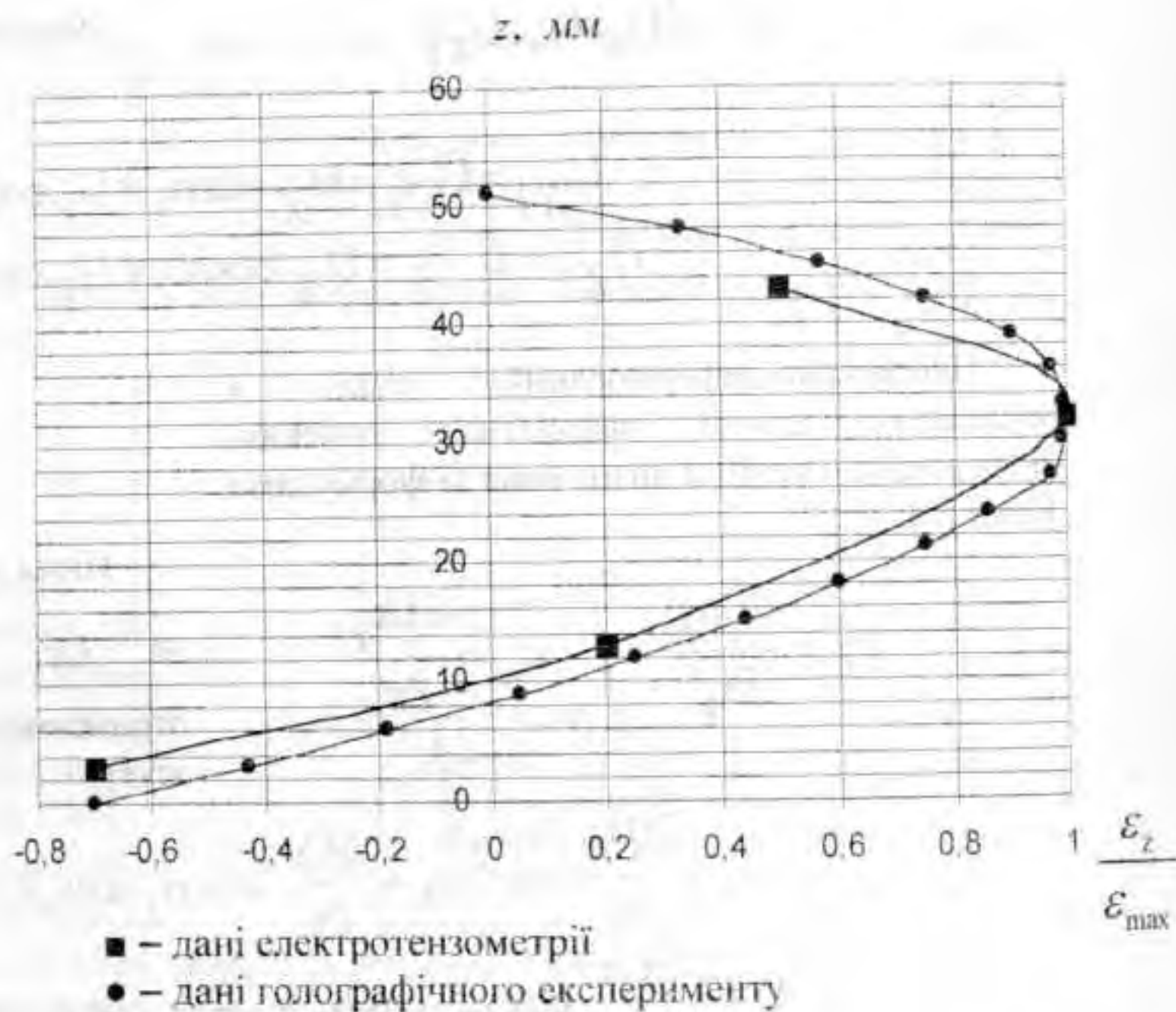
Тут  $E$  – модуль пружності,  $\mu$  – коефіцієнт Пуассона.

Для прикладу на рис. 3 (а) показана одна з інтерферограм лопатки ГТД, що коливається на другій згинній формі. На рис. 3 (б) приведена епюра пронормованих до одиниці





(a)



(б)

Рис.3

#### Список використаних джерел

1. Казачек А.Г. Голографические методы исследования в экспериментальной механике, «Машиностроение», М., 1984, с. 175.
2. Кобаяси А. Экспериментальная механика, «Мир», М., 1990.
3. Островский Ю.И., Бутусов М.М., Островская Г.В., Голографическая интерферометрия, «Наука», М., 1977
4. Вест Ч. Голографическая интерферометрия, «Мир», М., 1982, с. 504.
5. Лурье А.И., Теория упругости, «Наука», М., 1970.

Надійшла до редколегії 26.12.2006



УДК 517.946

Ткач А.Б.

# Періодичні розв'язки деяких систем інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням

За допомогою узагальнення чисельно-аналітичного методу А.М.Самойленка знайдено достатні умови існування періодичних по  $t$  з періодом  $T$  розв'язків деяких систем інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням.

**Ключові слова:** інтегро-диференціальні рівняння з частинними похідними, імпульсне збурення, періодичні розв'язки.

E-mail us\_ukr@yahoo.com

**Вступ.** Чисельно-аналітичний метод знаходження періодичних розв'язків, запропонований А.М.Самойленком [1] має багато узагальнень. В роботах М.О.Перестюка, Г.Х.Сарафовой, М.А.Хекімової, Б.Є.Турбасва [2,3] цей метод використовується для досліджень періодичних розв'язків інтегро-диференціальних рівнянь. У роботі [4] за допомогою чисельно-аналітичного методу вивчаються періодичні розв'язки систем

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial t \partial x} &= A(t, x) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} + f(t, x, u(t, x), u'_t(t, x), u'_x(t, x), \\ &\int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)) ds d\eta), \\ \Delta \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} \Big|_{t=\tau_i} &= D_i(x) \frac{\partial u(\tau_i, x)}{\partial x} + q_i(x, u(\tau_i, x), u'_t(\tau_i, x), u'_x(\tau_i, x), \\ &\int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} h(\tau_i, s, x, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)) ds d\eta), i = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1)$$

$$\Delta \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} \Big|_{t=\tau_i} = D_i(x) \frac{\partial u(\tau_i, x)}{\partial x} + q_i(x, u(\tau_i, x), u'_t(\tau_i, x), u'_x(\tau_i, x), \int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} h(\tau_i, s, x, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)) ds d\eta), i = 1, 2, \dots \quad (2)$$

Тут вектор-функції  $f, g, q_i, h \in E_n$ , функції  $a(t), b(t)$  та  $(n \times n)$  - матриці  $A(t, x), D_i(x), i \in Z$ , неперервні по своїх аргументах. Крім того, вектор-функція  $f$  та матриця  $A(t, x)$  періодичні по  $t$  з періодом  $T$ , вектор-функції  $g$  та  $h$  періодичні по першим двом аргументам  $t$  і  $s$  з періодом  $T$  і функції  $a(t), b(t)$  періодичні з періодом  $T$ .

Припускаємо, що моменти часу  $\tau_i$  задовольняють нерівності  $\tau_{i+1} - \tau_i \geq h > 0$  та існує таке додатне натуральне число  $p$ , що

$$D_{i+p} = D_i, q_{i+p} = q_i \quad (3)$$

A.B. Tkach

# Periodic solutions for some systems of partial integro-differential equations with pulse

By generalization of A.M.Samoylenko's numerical-analytic method the sufficient conditions of the existence of periodic in  $t$  with period  $T$  solutions for some systems of partial integro-differential equations with pulse are found.

**Keywords:** partial integro-differential equations, pulse, periodic solution.

інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням.

**Постановка задачі та формулювання основного результату.** У роботі узагальнюється чисельно-аналітичний метод знаходження періодичних розв'язків на системи інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням виду

Будемо шукати періодичний по  $t$  з періодом  $T$  розв'язок системи рівнянь (1)-(2), який задовольняє умови

$$u(t, 0) = u_0(t) + v(0), u(0, x) = u_0(0) + v(x) \quad (4)$$

Вектор-функція  $u_0(t)$  задана, неперервна, періодична з періодом  $T$ , має неперервну похідну та задовольняє нерівності

$$|u_0(t)| \leq N, \quad |u'_0(t)| \leq N_1 \quad (5)$$

а вектор-функція  $v(x)$  знаходиться в процесі відшукування періодичного розв'язку.



Припускаємо, що матриці  $A(t, x)$ ,  $D_i(x)$  та вектор-функції  $f(t, x, u, u'_t, u'_x, z)$ ,  $g(t, s, x, \eta, u, u'_t, u'_x, z)$ ,  $h(t, s, x, \eta, u, u'_t, u'_x, z)$ ,  $i \in Z$ , задовольняють такі умови:

I. Матриця  $A(t, x)$  визначена і неперервна в області  $\Omega_0: (t, x) \in (-\infty, +\infty) \times [-a, a]$ , періодична по  $t$  з періодом  $T$  і елементи матриці  $\overline{A}$  визначаються співвідношеннями

$$\overline{A}_y = \sup_{(t, x) \in \Omega_0} |\{A(t, x)\}_y| \quad (6)$$

$$(A_0)_y = \sup_{x \in [-a, a]} \left| \left[ \frac{1}{T} \int_0^T A(t, x) dt + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p D_i(x) \right]^{-1} \right|_y. \quad (8)$$

IV. Вектор-функція  $f(t, x, u_1, u_2, u_3, u_4)$  визначена в області  $\Omega$ ,  $\Omega: (t, x, u_1, u_2, u_3, u_4) \in (-\infty, +\infty) \times [-a, a] \times D_1 \times D_2 \times D_3 \times D_4$ , де  $D_1 = \{u_1 : b \leq u_1 \leq c\}$ ,  $D_2 = \{u_2 : |u_2| \leq b_1\}$ ,

II. Матриці  $D_i(x)$ ,  $i \in Z$ , визначені і неперервні при  $x \in [-a, a]$  і  $D_0$  - матриця з елементами

$$(D_0)_{kj} = \sup_{x \in [-a, a]} |\{D_i(x)\}_{kj}| \quad (7)$$

III. Матриця  $\frac{1}{T} \int_0^T A(t, x) dt + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p D_i(x)$  не вироджена і елементи матриці  $A_0$  визначаються співвідношеннями

$D_3 = \{u_3 : |u_3| \leq b_2\}$ ,  $D_4 = \{u_4 : |u_4| \leq b_3\}$ , неперервна по всім аргументам у цій області, періодична по  $t$  з періодом  $T$  та задовольняє нерівності

$$\left| f(t, x, u_0(t), u'_0(t), 0, \int_0^t \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, u_0(s), u'_0(s), 0) ds d\eta) \right| \leq M_0 \quad (9)$$

і умову Ліпшиця

$$\begin{aligned} & |f(t, x, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3, \bar{u}_4) - f(t, x, u_1, u_2, u_3, u_4)| \leq \\ & \leq K_1 |\bar{u}_1 - u_1| + K_2 |\bar{u}_2 - u_2| + K_3 |\bar{u}_3 - u_3| + K_4 |\bar{u}_4 - u_4|. \end{aligned} \quad (10)$$

Тут елементи матриць  $K_1, \dots, K_4$  невід'ємні,  $b, c, b_1, b_2, b_3$  - векторні сталі, причому вектори  $b_1, b_2, b_3$  визначені нижче.

визначені в області  $\Omega_1, \Omega_1: (x, u_1, u_2, u_3, u_4) \in [-a, a] \times D_1 \times D_2 \times D_3 \times D_4$ , неперервні по своїм аргументам в області  $\Omega_1$  та задовольняють нерівності:

V. Вектор-функції  $q_i(x, u_1, u_2, u_3, u_4)$ ,  $i \in Z$ ,

$$\begin{aligned} & |q_i(x, u_1, u_2, u_3, u_4)| \leq M_1; \\ & \left| q_i(x, u_0(\tau_i), u'_0(\tau_i), 0, \int_0^{\tau_i} \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, x, \eta, u_0(s), u'_0(s), 0) ds d\eta) \right| \leq M_0, \\ & |q_i(x, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3, \bar{u}_4) - q_i(x, u_1, u_2, u_3, u_4)| \leq \\ & \leq L_1 |\bar{u}_1 - u_1| + L_2 |\bar{u}_2 - u_2| + L_3 |\bar{u}_3 - u_3| + L_4 |\bar{u}_4 - u_4|. \end{aligned} \quad (11)$$

Тут елементи матриць  $L_1, \dots, L_4$  невід'ємні.

VI. Вектор-функції

$$\begin{aligned} & g(t, s, x, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)), \\ & h(t, s, x, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)) \end{aligned}$$

періодичні по першим двом аргументам з періодом  $T$  та задовольняють нерівності

$$\begin{aligned} & |g(t, s, x, \eta, u_1, u_2, u_3)| \leq \bar{M}; \\ & |h(t, s, x, \eta, u_1, u_2, u_3)| \leq \bar{M}; \end{aligned} \quad (12)$$

визначені і неперервні в області  $\Omega_2$ ,

$\Omega_2: (t, s, x, \eta, u_1, u_2, u_3) \in (-\infty, +\infty) \times (-\infty, +\infty) \times [-a, a] \times [-a, a] \times D_1 \times D_2 \times D_3$  і умови Ліпшиця



$$\begin{aligned} & |g(t, s, x, \eta, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3) - g(t, s, x, \eta, u_1, u_2, u_3)| \leq \\ & \leq K_5 |\bar{u}_1 - u_1| + K_6 |\bar{u}_2 - u_2| + K_7 |\bar{u}_3 - u_3|, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & |h(t, s, x, \eta, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3) - h(t, s, x, \eta, u_1, u_2, u_3)| \leq \\ & \leq L_5 |\bar{u}_1 - u_1| + L_6 |\bar{u}_2 - u_2| + L_7 |\bar{u}_3 - u_3| \end{aligned} \quad (14)$$

Тут елементи матриць  $K_5, K_6, K_7, L_5, L_6, L_7$  невід'ємні.

VII. Власні числа матриці  $R$  знаходяться у крузі одиничного радіуса.

$$\begin{aligned} R = & (K_1 + alK_4K_5 + \frac{2pL_1}{T} + \frac{2palL_4L_5}{T})(a\frac{T}{2}(E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T})A_0) + aA_0 + \beta E) + \\ & + (K_2 + alK_4K_6 + \frac{2pL_2}{T} + \frac{2palL_4L_6}{T})a(E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T})A_0) + \\ & (K_3 + alK_4K_7 + \bar{A} + \frac{2p(L_3 + D_0)}{T} + \frac{2palL_4L_7}{T})(\frac{T}{2}(E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T})A_0) + A_0), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{Тут } l = \sup_t |b(t) - a(t)|, \text{ а додатня стала } \beta \quad b + SM_0 \leq u_0(t) + v_0(x) \leq c + SM_0. \quad (16)$$

вибирається такою, щоб виконувалася умова VII. де матриця  $S$  і вектор-функція  $v_0(x)$  визначаються

VIII. Векторні сталі  $b, c$  і вектор-функція  $u_0(t)$  задовольняють нерівність

рівностями

$$\begin{aligned} S = & a\frac{T}{2}(E + (\bar{A} + \frac{2pD}{T})A_0)(E - R)^{-1}Q + \\ & + (aA_0 + \beta E)(E - R)^{-1}Q + a\frac{T}{2}B_1 + apB_2 + aA_0Q + \beta Q, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} v_0(x) = & - \int_0^x \{ [\frac{1}{T} \int_0^T A(t, x) dt + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p D_i(x)]^{-1} [\frac{1}{T} \int_0^T f(t, x, u_0(t), u_0'(t), 0, \\ & \int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, u_0(s), u_0'(s), 0) ds d\eta) dt + \\ & + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p q_i(x, u_0(\tau_i), u_0'(\tau_i), 0, \int_0^x \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, x, \eta, u_0(s), u_0'(s), 0) ds d\eta)] \} dx + C_0 \end{aligned} \quad (18)$$

Тут стала  $C_0$  задовольняє нерівність  $|C_0| \leq \beta M_0$ , а матриці  $Q, B_1, B_2$  мають вигляд

$$\begin{aligned} Q = & (K_1 + alK_4K_5 + \frac{2pL_1}{T} + \frac{2palL_4L_5}{T})(a\frac{T}{2}B_1 + apB_2 + aA_0(1 + \frac{p}{T}) + \beta E) + \\ & + (K_2 + alK_4K_6 + \frac{2pL_2}{T} + \frac{2palL_4L_6}{T})aB_1 + (K_3 + \bar{A} + alK_4K_7 + \frac{2p(L_3 + D_0)}{T} + \\ & + \frac{2palL_4L_7}{T})(\frac{T}{2}B_1 + pB_2 + A_0(1 + \frac{p}{T})), \\ B_1 = & E + \bar{A}A_0(1 + \frac{p}{T}), \quad B_2 = E + D_0A_0(1 + \frac{p}{T}). \end{aligned} \quad (19)$$

Послідовність періодичних по  $t$  з періодом  $T$  вектор-функцій вибирається у вигляді



$$u_0(t, x) = u_0(t) + v_0(x),$$

$$\begin{aligned} u_{n+1}(t, x) = & u_0(t) + v_0(x) + \sum_{i=1}^{n+1} \delta_i(x) + \int_0^t \int_0^x \left\{ \left[ A(t, x) \frac{\partial u_n(t, x)}{\partial x} + f(t, x, \bar{u}_n(t, x), \bar{u}'_{n,t}(t, x), \right. \right. \\ & \left. \bar{u}'_{n,x}(t, x), \int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, \bar{u}_n(s, \eta), \bar{u}'_{n,s}(s, \eta), \bar{u}'_{n,\eta}(s, \eta)) ds d\eta) \right] - \left[ A(t, x) \frac{\partial u_n(t, x)}{\partial x} + \right. \\ & \left. + f(t, x, \bar{u}_n(t, x), \bar{u}'_{n,t}(t, x), \bar{u}'_{n,x}(t, x), \int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, \bar{u}_n(s, \eta), \bar{u}'_{n,s}(s, \eta), \bar{u}'_{n,\eta}(s, \eta)) ds d\eta) \right] \} dt dx + \\ & + \int_0^x \left[ \sum_{0 \leq \tau_i \leq t} D_i(x) \bar{u}'_{n,x}(\tau_i, x) + q_i(x, \bar{u}_n(\tau_i, x), \bar{u}'_{n,t}(\tau_i, x), \bar{u}'_{n,x}(\tau_i, x), \int_0^x \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, x, \eta, \right. \\ & \left. \bar{u}_n(s, \eta), \bar{u}'_{n,s}(s, \eta), \bar{u}'_{n,\eta}(s, \eta)) ds d\eta) \right] dx - \int_0^x \left[ \sum_{0 \leq \tau_i \leq t} D_i(x) \bar{u}'_{n,x}(\tau_i, x) + q_i(x, \bar{u}_n(\tau_i, x), \bar{u}'_{n,t}(\tau_i, x), \right. \\ & \left. \bar{u}'_{n,x}(\tau_i, x), \int_0^x \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, x, \eta, \bar{u}_n(s, \eta), \bar{u}'_{n,s}(s, \eta), \bar{u}'_{n,\eta}(s, \eta)) ds d\eta) \right] dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (20)$$

Тут

$$\bar{u}_n(t, x) = u_n(t, x) - \delta_n(x), \quad \bar{f} = \frac{1}{T} \int_0^T f dt, \quad \sum_{0 \leq \tau_i \leq t} q_i = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p q_i. \quad (21)$$

Вектор-функції  $v_0(x)$ ,  $\delta_1(x)$ ,  $\delta_2(x), \dots$  визначаються із співвідношень

$$\begin{aligned} & \frac{1}{T} \int_0^T \left[ A(t, x) \frac{\partial u_n(t, x)}{\partial x} + f(t, x, \bar{u}_n(t, x), \bar{u}'_{n,t}(t, x), \bar{u}'_{n,x}(t, x), \right. \\ & \left. \int_0^x \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, \bar{u}_n(s, \eta), \bar{u}'_{n,s}(s, \eta), \bar{u}'_{n,\eta}(s, \eta)) ds d\eta) \right] dt + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p \left[ D_i(x) \bar{u}'_{n,x}(\tau_i, x) + \right. \\ & \left. + q_i(x, \bar{u}_n(\tau_i, x), \bar{u}'_{n,t}(\tau_i, x), \bar{u}'_{n,x}(\tau_i, x), \int_0^x \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, x, \eta, \bar{u}_n(s, \eta), \bar{u}'_{n,s}(s, \eta), \bar{u}'_{n,\eta}(s, \eta)) ds d\eta) \right] = 0, \\ & i = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (22)$$

Мають місце такі теореми.

**Теорема 1.** Нехай система інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням (1), (2) задовольняє умови I-VIII.

Тоді існує єдиний періодичний по  $t$  з

періодом  $T$  розв'язок системи (1), (2).

Цей розв'язок є рівномірною в області  $\Omega$  границею послідовності (19)-(20) періодичних по  $t$  з періодом  $T$  функцій  $u_n(t, x)$  та задовольняє систему інтегро-диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} u(t, x) = & u_0(t) + v(x) + \int_0^t \int_0^x \left[ A(\xi, \zeta) \frac{\partial u(\xi, \zeta)}{\partial \zeta} + f(\xi, \zeta, u(\xi, \zeta), u'_\xi(\xi, \zeta), u'_\zeta(\xi, \zeta), \right. \\ & \left. \int_0^\xi \int_{a(\xi)}^{b(\xi)} g(\xi, s, \zeta, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)) ds d\eta) \right] d\xi d\zeta + \int_0^x \left[ \sum_{0 \leq \tau_i \leq t} D_i(\zeta) \frac{\partial u(\tau_i, \zeta)}{\partial \zeta} + \right. \\ & \left. + q_i(\zeta, u(\tau_i, \zeta), u'_\xi(\tau_i, \zeta), u'_\zeta(\tau_i, \zeta), \int_0^\xi \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, \zeta, \eta, u(s, \eta), u'_s(s, \eta), u'_\eta(s, \eta)) ds d\eta) \right] d\zeta, \end{aligned} \quad (23)$$



де  $v(x)$  є рівномірна по  $x \in [-a, a]$  границя послідовності функцій

$$\{v_0(x) + \sum_{i=1}^n \delta_i(x)\},$$

$$v(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} [v_0(x) + \sum_{i=1}^n \delta_i(x)] \quad (24)$$

**Теорема 2.** Нехай система інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням (1) - (4) задовольняє умови I- VIII. Тоді існує множина  $m$  початкових функцій  $v(x)$ , які забезпечують періодичність по  $t$  з періодом  $T$  розв'язків системи рівнянь (1)-(4). Ця множина залежить від векторних сталих  $C_0, C_1, C_2, \dots$ , що задовольняють нерівності

$$|C_0| \leq \beta M_0, |C_n| \leq \beta R^{n-1} Q M_0, n=1, 2, \dots$$

де стала  $\beta$  визначена умовою VII.

$$\begin{aligned} v_0'(x) = & -\left[\frac{1}{T} \int_0^T A(t, x) dt + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p D_i(x)\right]^{-1} \times \left[\frac{1}{T} \int_0^T f(t, x, u_0(t), u_0'(t), 0, \right. \\ & \left. \int_0^t \int_{a(t)}^{b(t)} g(t, s, x, \eta, u_0(s), u_0'(s), 0) ds d\eta) dt + \frac{1}{T} \sum_{i=1}^p q_i(x, u_0(\tau_i), u_0'(\tau_i), 0, \right. \\ & \left. \left. \int_0^{\tau_i} \int_{a(\tau_i)}^{b(\tau_i)} h(\tau_i, s, x, \eta, u_0(s), u_0'(s), 0) ds d\eta) \right] \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

Використовуючи співвідношення (8), оцінки де матриці  $B_1$  і  $B_2$  визначені в (19), а (5) і (9), маємо нерівності

$$\begin{aligned} |v_0'(x)| & \leq A_0 \left(1 + \frac{p}{T}\right) M_0, \\ |v_0(x)| & \leq a A_0 \left(1 + \frac{p}{T}\right) M_0 + |C_0|, \end{aligned} \quad (26)$$

де сталу  $C_0$  вибираємо такою, щоб  $|C_0| \leq \beta M_0$ , причому  $\beta$  є додатною сталою. Тоді з урахуванням співвідношень (6), (7), позначень (19), (20), леми 1 [5] та оцінок (26) отримуємо оцінки

$$\begin{aligned} |\bar{u}_1(t, x) - u_0(t, x)| & \leq a \alpha(t) B_1 M_0 + a p B_2 M_0, \\ |\bar{u}_{1,t}'(t, x) - u_{0,t}'(t, x)| & \leq a B_1 M_0, \\ |\bar{u}_{1,x}'(t, x) - u_{0,x}'(t, x)| & \leq \alpha(t) B_1 M_0 + p B_2 M_0, \end{aligned} \quad (27)$$

$$|\bar{u}_{n+1}(t, x) - u_n(t, x)| \leq a \frac{T}{2} \left(E + \left(\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}\right) A_0\right) R^{n-1} Q M_0,$$

$$|\bar{u}_{(n+1),t}'(t, x) - u_{n,t}'(t, x)| \leq a \left(E + \left(\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}\right) A_0\right) R^{n-1} Q M_0,$$

$$|\bar{u}_{(n+1),x}'(t, x) - u_{n,x}'(t, x)| \leq \frac{T}{2} \left(E + \left(\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}\right) A_0\right) R^{n-1} Q M_0,$$

$$|\delta_{n+1}'(x)| \leq A_0 R^n Q M_0, |\delta_{n+1}(x)| \leq a A_0 R^n Q M_0 + |C_{n+1}|, \quad (29)$$

**Доведення теореми 1.** Із структури послідовності (19) - (20) випливає періодичність по  $t$  з періодом  $T$  вектор-функцій  $u_n(t, x)$ .

Для доведення рівномірної збіжності послідовності  $\{u_n(t, x)\}$  спочатку оцінюємо різницю  $u_1(t, x) - u_0(t, x)$ . Із співвідношення (21) при  $n=0$  для знаходження  $v_0(x)$  отримуємо систему диференціальних рівнянь

Для оцінки  $\delta_1(x)$  ми із співвідношення (22) при  $n=1$  віднімаємо це співвідношення при  $n=0$ . Після цього, використовуючи співвідношення (7) - (8), лему 1 [5], нерівності (9) - (14), оцінки (27) і позначення (19), одержуємо

$$|\delta_1'(x)| \leq A_0 Q M_0, |\delta_1(x)| \leq a A_0 Q M_0 + |C_1|, \quad (28)$$

причому вибираємо сталу  $C_1$  такою, щоб  $|C_1| \leq \beta Q M_0$ .

Продовжуючи процес оцінювання, одержуємо



причому  $|C_{n+1}| \leq \beta R^n Q M_0$  і матриця  $R$  Запишемо тепер оцінки для  $u_{n+k}(t, x) - u_n(t, x)$ . Маємо визначена співвідношенням (15).

$$|u_{n+k}(t, x) - u_n(t, x)| \leq (aA_0 + \beta E) R^n \sum_{i=0}^{k-1} R^i Q M_0 + a \frac{T}{2} (E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) R^{n-1} \sum_{i=0}^{k-1} R^i Q M_0,$$

$$|\bar{u}_{(n+k)'}(t, x) - u_{n'}'(t, x)| \leq a(E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) R^{n-1} \sum_{i=0}^{k-1} R^i Q M_0,$$

$$|\bar{u}_{(n+k)'}(t, x) - u_{n'}'(t, x)| \leq A_0 R^n \sum_{i=0}^{k-1} R^i Q M_0 + \frac{T}{2} (E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) R^{n-1} \sum_{i=0}^{k-1} R^i Q M_0, \quad (30)$$

$$\sum_{i=1}^{n+1} |\delta_i(x)| \leq (aA_0 + \beta E) \sum_{i=0}^n R^i Q M_0. \quad (31)$$

Із оцінок (30) та умови VII випливає, що частинних похідних. послідовність вектор-функцій  $u_n(t, x)$  та Із нерівностей (30) при  $k \rightarrow \infty$  одержуємо послідовності їх частинних похідних  $u_{n'}'(t, x)$ , оцінки для різниці  $u_\infty(t, x) - u_n(t, x)$  та її  $u_{n'}'(t, x)$  рівномірно збігаються в області  $\Omega_0$  до частинних похідних вектор-функції  $u_\infty(t, x)$  та її відповідних

$$|u_\infty(t, x) - u_n(t, x)| \leq (aA_0 + \beta E) R^n (E - R)^{-1} Q M_0 + a \frac{T}{2} (E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) R^{n-1} (E - R)^{-1} Q M_0,$$

$$|u_{\infty'}'(t, x) - u_{n'}'(t, x)| \leq a(E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) R^{n-1} (E - R)^{-1} Q M_0,$$

$$|u_{\infty'}'(t, x) - u_{n'}'(t, x)| \leq A_0 R^n (E - R)^{-1} Q M_0 + \frac{T}{2} (E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) R^{n-1} (E - R)^{-1} Q M_0. \quad (32)$$

Існування початкової функції  $v(x)$  впливає з  $u_\infty(t, x)$  задовольняє систему інтегро-нерівностей (31) при  $n \rightarrow \infty$ , диференціальних рівнянь (23).

$$v(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} [v_0(x) + \sum_{i=1}^n \delta_i(x)] \quad (33)$$

Легко бачити, що

$$u_{\infty'}'(t, x) \in D_2, u_{\infty'}'(t, x) \in D_3,$$

При  $n \rightarrow \infty$  із (20), (22) випливає, що якщо вибрати

$$b_1 = N_1 + a(E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) (E - R)^{-1} Q M_0 + a B_1 M_0,$$

$$b_2 = A_0 (E - R)^{-1} Q M_0 + \frac{T}{2} (E + (\bar{A} + \frac{2pD_0}{T}) A_0) (E - R)^{-1} Q M_0 + \frac{T}{2} B_1 M_0 +$$

$$+ p B_2 M_0 + A_0 Q M_0 + A_0 (1 + \frac{p}{T}) M_0,$$

$$b_3 = a l \bar{M}. \quad (34)$$

Для доведення єдиності періодичного по  $t$  з періодом  $T$  розв'язку системи (1) -(4) ми припускаємо, що існують два розв'язки:  $u(t, x)$  та  $z(t, x)$ .

Використовуючи інтегральне представлення розв'язку (23) і співвідношення (22) при  $n \rightarrow \infty$ , ми одержуємо після  $k$  ітерацій такі оцінки:

$$|u(t, x) - z(t, x)| \leq a \frac{T}{2} R^k G,$$

$$|u'_t(t, x) - z'_t(t, x)| \leq a \times R^k G, \quad (35)$$

$$|u'_x(t, x) - z'_x(t, x)| \leq \frac{T}{2} R^k G.$$

де матриця  $R$  визначена співвідношенням (15), а сталий вектор  $G$  визначається рівністю



$$G = (K_1 + aL_4K_5 + \frac{2p}{T}L_1 + \frac{2p}{T}aL_4L_5)u(t, x) - z(t, x)|_0 + \\ + (K_2 + aL_4K_6 + \frac{2p}{T}L_2 + \frac{2p}{T}aL_4L_6)u'_1(t, x) - z'_1(t, x)|_0 + \\ + (\bar{A} + K_3 + aL_4K_7 + \frac{2p(D_0 + L_3)}{T} + \frac{2p}{T}aL_4L_7)u'_2(t, x) - z'_2(t, x)|_0.$$

де

$$|u(t, x) - z(t, x)|_0 = \sup_{(t, x) \in \Omega_0} |u(t, x) - z(t, x)|.$$

Завдяки умові VII із оцінок (35) при  $k \rightarrow \infty$  впливає єдиність періодичного по  $t$  з періодом  $T$  розв'язку системи рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням (1) - (4). Теорема 1 доведена.

Доведення теореми 2 впливає з доведення теореми 1.

**Висновок.** Знайдено достатні умови існування періодичних по  $t$  з періодом  $T$  розв'язків систем інтегро-диференціальних рівнянь з частинними похідними з імпульсним збуренням (1)-(4).

### Список використаних джерел

1. *Самойленко А.М., Перестюк Н.А.* Дифференциальные уравнения с импульсным воздействием. – К., 1987.
2. *Перестюк Н.А., Сарафова Г.Х., Хекимова М.А.* Периодические решения слабо нелинейных интегро-дифференциальных уравнений с импульсным воздействием // Вісник Київського ун-ту. Математика і механіка. – 1980. – Вип. 22. – С. 96-101.
3. *Турбаев Б.Е.* О периодических решениях слабо нелинейных интегро-дифференциальных уравнений с импульсным воздействием // Укр. Мат. журн. – 1986. – 38, №2. – С. 211-214.
4. *Ткач А.Б.* Численно-аналитический метод исследования периодических решений интегро-дифференциальных уравнений с частными производными с импульсным воздействием // Нелінійні коливання. 2005. – 8, №1. – С. 123-131.
5. *Tkach A.B.* Numerical-analytic method of finding periodic solution for systems of partial differential equations with pulse influence // Nonlinear Oscillations. 2001. – 4, N2. – P. 278-288.

Надійшла до редколегії 28.11.06







# КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА







УДК 519.21

Боднар Т.Д.\*

## Формування оптимального портфеля в альтернативних моделях

Розглянуто проблему прийняття оптимального рішення за умови невизначеності. Пораховано моменти оцінок оптимальних портфельних ваг у припущенні, що матриця повернень цінних паперів має матричний еліптичний розподіл.

Ключові слова: портфельний аналіз, матричний еліптичний розподіл, статистичні методи в фінансах.

T.D. Bodnar\*

## Optimal portfolio selection in alternative models

We consider the problem of optimal decision making under parameter uncertainty. The moments of the estimator for the optimal portfolio weights are calculated assuming asset returns to be matrix elliptically contoured distributed.

Key Words: portfolio analysis, matrix elliptically contoured distributions, statistical methods in finance.

\*E-mail: bodnar@euv-frankfurt-o.de, <http://www.stat.euv-ffo.de/tbodnar>

**Вступ.** Проблема прийняття оптимального рішення за умови ризику розглядалася багатьма дослідниками. Перший вагомий вклад у її розв'язання був зроблений Марковіцем [3], який розвинув середньо-варіаційні принципи для пошуку оптимального портфеля за умов невизначеності. Запропоновані принципи визначають поведінку інвестора, яка базується на визначенні функції корисності. Максимізація очікуваної функції корисності є іншою можливістю пояснення процесу оптимальних рішень в портфельному менеджменті. Найбільш поширено в портфельному аналізі є використання квадратичної функції корисності, Самуельсон [5]. Теорія прийняття оптимальних рішень розглядалася в роботі Єлейка і Боднара [1].

Розглянемо портфель, який складається із  $k$  цінних паперів. Через  $p_{i,t}$  позначемо ціну  $i$ -го цінного паперу в момент часу  $t$ . Тоді під вектором повернень ми будемо розуміти наступний  $k$ -вимірний вектор  $X_t = (X_{1,t}, \dots, X_{k,t})$ , де  $X_{k,t} = \ln p_{k,t} - \ln p_{k,t-1}$ . Припускаємо, що випадкові вектори  $X_1, \dots, X_n$  є некорельовані і однаково розподілені з середнім  $\mu$  і коваріаційною матрицею  $\Sigma$ .

Нехай матриця  $X = (X_1, \dots, X_n)$  має матричний еліптичний розподіл,  $X \sim E_{k,n}(\mu \otimes 1_n', \Sigma, \varphi)$  ( $k \times n$  вимірний

еліптичний розподіл з середнім  $\mu \otimes 1_n'$ , дисперсійною матрицею  $\Sigma$ , і характеристичною функцією  $\varphi$ ). Кажемо, що випадкова матриця має матричний еліптичний розподіл, якщо її характеристична функція записується у вигляді

$$\Phi(T) = \exp(i \operatorname{tr}(T' \Omega)) \varphi(\operatorname{tr} T' \Sigma T),$$

де  $T$  і  $\Omega$  є матриці порядку  $k \times n$ ,  $\Sigma$  є додатньо визначенна матриця і  $\varphi: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ .

Оцінки  $\mu$  і  $\Sigma$  визначаються наступними формулами

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} X 1_n, \quad \hat{\Sigma} = \frac{E(R_{(nor)}^2)}{(n-1)E(R^2)} X \left( I_n - \frac{1}{n} 1_n 1_n' \right) X', \quad (1)$$

де  $1_n$  є вектор порядку  $n$ , всі елементи якого є 1 і  $I_n$  є одинична матриця порядку  $n$ .

Випадкові величини  $R_{(nor)}^2$  і  $R^2$  є генеруючими величинами нормального і еліптичного розподів, які відіграють важливу роль у теорії еліптичних розподілів. Генеруюча змінна випадкового вектора  $Y \sim E_k(\mu, \Sigma, \varphi)$  є випадковою величиною, яка задається за допомогою наступної рівності  $R = (Y - \mu)' \Sigma^{-1} (Y - \mu)$  і повністю визначає тип еліптичного розподілу випадкового вектора  $Y$ , тобто функцію  $\varphi$ .

З роботи [4] випливає, що оцінка вектора оптимальних ваг, які максимізують очікувану



квадратичну функцію корисності, задається наступною формулою

$$\hat{w}_{EU} = \frac{\hat{\Sigma}^{-1} 1_k}{1_k' \hat{\Sigma}^{-1} 1_k} + \alpha^{-1} \hat{S} \hat{\mu},$$

$$\hat{S} = \hat{\Sigma}^{-1} - \frac{\hat{\Sigma}^{-1} 1_k 1_k' \hat{\Sigma}^{-1}}{1_k' \hat{\Sigma}^{-1} 1_k}. \quad (2)$$

В роботі середнє, варіація та коваріація елементів вектора  $\hat{w}_{EU}$  пораховані. Обчислення проводяться припускаючи еліптичний розподіл матриці  $X$ . Зауважимо, що припущення теорем не вимагає існування щільності даної матриці і моментів порядку вищого ніж два. Достатньою умовою є існування другого моменту випадкової величини  $R$ , яка впливає із оцінки дисперсійної матриці (1). Також припущення незалежності елементів вибірки замінюється на більш слабше некорельованості.

**Основні результати.** Так як матриця  $\Sigma$  є додатньо визначенна, то представляється у вигляді  $\Sigma = AA'$ . Через  $u^{(q)}$  позначимо  $q$ -вимірний випадковий вектор, який має однорідний розподіл на одиничній сфері в  $R^q$  і через  $\omega_q(\|t\|^2)$  його характеристичну функцію. Нехай  $\Phi_{m_1, \dots, m_n}$  позначає клас функцій, визначених на  $[0, \infty) \rightarrow R^1$  таких, що  $\varphi(\|t_1\|^2, \dots, \|t_n\|^2)$  є характеристичною функцією, де  $t_1, \dots, t_n \in m_1 \times 1, \dots, m_n \times 1$  вимірні вектори відповідно. В роботі [6] показано, що  $\varphi \in \Phi_{m_1, \dots, m_n}$  тоді і тільки тоді, коли

$$\varphi(u_1, \dots, u_n) = \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \omega_q(r_1^2 u_1) \dots \omega_q(r_n^2 u_n) dF(r_1, \dots, r_n)$$

для деякої функції розподілу  $F(r_1, \dots, r_n)$  заданої на  $[0, \infty)^n \rightarrow R^1$ . У випадку  $n=1$  остання рівність спроститься до наступної

$$\varphi(u) = \int_0^\infty \omega_q(r^2 u) dF(r) \quad (3)$$

У роботі [6] показано, що  $\Phi_m \supset \Phi_n$ , коли  $m < n$ . Якщо функція розподілу  $F$  випадкової величини  $R$  відноситься до  $\varphi \in \Phi_n$ , як у формулі (3) ( $q=n$ ), то також справедливо, що  $\varphi \in \Phi_m$   $m < n$ , і існує функція розподілу  $F^*$  випадкової величини  $R^*$ , яка відноситься до  $\varphi$

як у рівності (3) з  $q=m$ . У [6] доведено, що  $R^* = Rb$ , де  $b \geq 0$ ,  $b^2 \sim B(\frac{m}{2}, \frac{n-m}{2})$  (бета розподіл із  $\frac{m}{2}$  і  $\frac{n-m}{2}$  ступенями вільності) і  $b$  та  $R$  незалежно розподілені. Для спрощення ми позначимо цей зв'язок через  $R \Leftrightarrow \varphi \in \Phi_n$  і  $R^* = Rb_{\frac{m}{2}, \frac{n-m}{2}} \Leftrightarrow \varphi \in \Phi_m$ .

Наступні три властивості еліптичних розподілів відіграють важливу роль у отриманні результатів статті.

i) Стохастичне представлення випадкової матриці  $X$  ([2])

Нехай  $Z \sim E_{k \times n}(\mu \otimes v', \Sigma \otimes \Phi, \varphi)$ . Тоді  $Z = \mu \otimes v' + RAUB'$ , де  $\Sigma = AA'$ ,  $\Phi = BB'$ ,  $vec(U) = u^{(nk)}$ ,  $R \Leftrightarrow \varphi \in \Phi_{nk}$  і  $R$  та  $U$  незалежно розподілені.

ii) Стохастичне представлення оцінки середнього ([2])

Нехай  $Z \sim E_{k \times n}(\mu \otimes v', \Sigma \otimes \Phi, \varphi)$  з  $n > k$ . Тоді  $\hat{\mu} \sim E_k(\mu, \Sigma, \varphi^*)$  і  $R^* = Rb_{\frac{k}{2}, \frac{nk-k}{2}} \Leftrightarrow \varphi \in \Phi_k$ , де  $b \geq 0$  і  $b^2$  має

бета розподіл із  $\frac{k}{2}$  і  $\frac{nk-k}{2}$  ступенями вільності. Тоді з результатів впливає наступна стохастична презентація

$$\hat{\mu} = \mu + \frac{1}{\sqrt{n}} Rb_{\frac{k}{2}, \frac{nk-k}{2}} Au^{(k)}.$$

iii) Стохастичне представлення оцінки дисперсійної матриці

Нехай  $Z \sim E_{k \times n}(\mu \otimes v', \Sigma \otimes \Phi, \varphi)$ . Тоді  $\hat{\Sigma} = cR^2 A \hat{E} A'$ , де

$$\hat{E} = UB' \left( \Phi^{-1} - \frac{\Phi^{-1} v v' \Phi^{-1}}{v' \Phi^{-1} v} \right) B U',$$

$c = \frac{E(R_{(nor)}^2)}{(n-1)E(R^2)}$ ,  $R \Leftrightarrow \varphi \in \Phi_m$  і  $R$  та  $U$  незалежно розподілені.

$i$ -ий елемент вектора  $\hat{w}_{EU}$  ми позначимо через  $\hat{w}_{EU}^i$ . Нехай  $e_i$  позначає  $k$ -вимірний вектор  $i$ -ий елемент якого рівний 1, а всі інші компоненти нулі. Слід матриці  $A$  ми позначатимемо через  $tr(A)$ , а її ранг через  $rk(A)$ . В теоремі 1 вектор середніх і коваріаційна матриця вектора оптимальних



портфельних ваг в сенсі максимізації очікуваної квадратної функції корисності виведено

**Теорема 1.** Нехай  $X \sim E_{k \times n}(\mu \otimes 1_n', \Sigma, \varphi)$ ,  $\Sigma$  додатньо визначена і уснує другий момент генеруючої змінної,  $E(R^2) < \infty$ .

а) Нехай існує  $E(R^{-2})$ . Припустимо, що одне з наступних тверджень виконується

- i)  $\alpha = \infty$ ,  $n \geq k+1$  і  $k \geq 2$  чи
- ii)  $\alpha < \infty$ ,  $n \geq k+2$  і  $k \geq 3$ .

Тоді математичне сподівання вектора  $\hat{w}_{EU}$  визначається наступною формолою

$$E(\hat{w}_{EU}) = \frac{\Sigma^{-1} 1_k}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k} + \frac{n-1}{n-k-1} \frac{nk-2}{nk+2} \frac{E(R^2)E(R^{-2})}{\alpha} S\mu \quad (4)$$

б) Нехай існує  $E(R^{-4})$  і  $1 \leq i, j \leq k$ . Припустимо, що одне з наступних тверджень виконується

- i)  $\alpha = \infty$ ,  $n \geq k+2$  і  $k \geq 2$  чи
- ii)  $\alpha < \infty$ ,  $1 \leq i = j \leq k$ ,  $n \geq k+4$  і  $k \geq 3$  чи
- iii)  $\alpha < \infty$ ,  $1 \leq i \neq j \leq k$ ,  $n \geq k+4$  і  $k \geq 4$ .

Тоді

$$E(\hat{w}_{EU}) = \frac{1}{n-k-1} \frac{e_i' S e_j}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k} - \alpha^{-2} \left( \frac{nk-2}{nk+2} E(R^2) E(R^{-2}) \right)^2 \mu' M_{ij} \mu + \alpha^{-2} \frac{(nk-2)(nk-4)}{(nk+2)^2} (E(R^2))^2 E(R^{-4}) \mu' \tilde{M}_{ij} \mu + \alpha^{-2} \frac{nk-2}{nk+2} E(R^2) E(R^{-2}) \left( \frac{tr(M_{ij} \Sigma)}{n} + \frac{(n-1)^2}{n(n-k-1)^2} e_i' S e_j \right), \quad (5)$$

де

$$M_{ij} = \frac{(n-1)^2(n-k+1)}{(n-k)(n-k-1)^2(n-k-3)} S e_i e_j' S + \frac{(n-1)^2}{(n-k)(n-k-1)(n-k-3)} e_i' S e_j, \quad (6)$$

$$\tilde{M}_{ij} = \frac{(n-1)^2(3(n-k)-1)}{(n-k)(n-k-1)^2(n-k-3)} S e_i e_j' S + \frac{(n-1)^2}{(n-k)(n-k-1)(n-k-3)} e_i' S e_j, \quad (7)$$

$$M_{ij}^* = M_{ij} - \tilde{M}_{ij} = \frac{(n-1)^2}{(n-k-1)^2} S e_i e_j' S.$$

**Доведення:**

Нехай  $\tilde{\alpha} = \alpha \frac{nk}{E(R^2)}$ . Розглянемо  $i$ -ий

елемент випадкового вектора  $\hat{w}_{EU}$ . Без втрати загальності обмежемося випадком  $i=1$ . З того,

що  $\hat{\mu} \sim E_k(\mu, \Sigma, \varphi^*)$  з  $R^* = R b_{\frac{k}{\Sigma^{-1} 1_k}} \Leftrightarrow \varphi \in \Phi_k$  (властивість  $\hat{\mu}$ ) ми отримаємо

$$\hat{w}_{EU}^1 = \frac{e_1' \hat{\Sigma}^{-1} 1_k}{1_k' \hat{\Sigma}^{-1} 1_k} + \alpha^{-1} e_1' \hat{S} \mu + \alpha^{-1} e_1' \hat{S} \hat{\gamma} = I + \alpha^{-1} II + \alpha^{-1} III,$$

де ми використали факт, що

$$\hat{\mu} \stackrel{d}{=} \mu + \hat{\gamma} \sim E_k(\mu, \Sigma, \varphi^*) \text{ з } \hat{\gamma} \sim E_k(\mu, \Sigma, \varphi^*).$$

З властивостей  $i$ ,  $ii$  і  $iii$  випливає, що

$$\hat{w}_{EU}^1(\hat{\mu}, \hat{\Sigma}) = \frac{e_1' (A \hat{E} A')^{-1} 1_k}{1_k' (A \hat{E} A')^{-1} 1_k} + \tilde{\alpha}^{-1} R^{-2} e_1' \left( (A \hat{E} A')^{-1} - \frac{(A \hat{E} A')^{-1} 1_k 1_k' (A \hat{E} A')^{-1}}{1_k' (A \hat{E} A')^{-1} 1_k} \right) \mu$$

$$+ \tilde{\alpha}^{-1} R^{-4} e_1' \left( (A \hat{E} A')^{-1} - \frac{(A \hat{E} A')^{-1} 1_k 1_k' (A \hat{E} A')^{-1}}{1_k' (A \hat{E} A')^{-1} 1_k} \right) \mu + \tilde{\alpha}^{-1} R^{-2} e_1' \left( (A \hat{E} A')^{-1} - \frac{(A \hat{E} A')^{-1} 1_k 1_k' (A \hat{E} A')^{-1}}{1_k' (A \hat{E} A')^{-1} 1_k} \right) \mu = I + \tilde{\alpha}^{-1} II + \tilde{\alpha}^{-1} III.$$

а) Отже,

$$E(\hat{w}_{EU}^1) = E(I) + \tilde{\alpha}^{-1} E(II) + \tilde{\alpha}^{-1} E(III). \quad (8)$$

**Лема 1.** Нехай  $X_1, \dots, X_n$  незалежно розподілені випадкові вектори і  $X_i \sim N(\mu, \Sigma)$  для  $i=1, \dots, n$ . Нехай  $\Sigma$  додатньо визначена. Нехай виконується одна із наступних умов

- i)  $\alpha = \infty$ ,  $n \geq k+1$  і  $k \geq 2$  чи
- ii)  $\alpha < \infty$ ,  $n \geq k+2$  і  $k \geq 3$ .

Тоді

$$E(I_{(nor)}) = \frac{e_1' \Sigma^{-1} 1_k}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k},$$

$$E(II_{(nor)}) = \frac{n-1}{n-k-1} e_1' S \mu, \quad E(III_{(nor)}) = 0.$$

де індекс  $(nor)$  показує, що відповідні елементи у рівності (8) беруться у випадку нормального розподілу повернень цінних паперів портфелю.

Доведення леми 1 випливає з доведення теореми 1 ([4]).

а<sub>1</sub>)  $E(I)$  є те саме, як у випадку нормального розподілу, оскільки  $I$  незалежить від  $R$ . Тоді

$$E(I) = \frac{e_1' \Sigma^{-1} 1_k}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k}.$$

а<sub>2</sub>) Розглянемо  $E(II)$ . Так як  $R$  і  $\hat{E}$  незалежні ([2]) отримаємо



$$E(II) = \frac{E(R^{-2})}{E(R_{(nor)}^{-2})} E(R_{(nor)}^{-2}) E \left[ e_1' \left( (A\hat{E}A')^{-1} - \frac{(A\hat{E}A')^{-1} 1_k 1_k' (A\hat{E}A')^{-1}}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} \right) \mu \right]$$

$$= \frac{E(R^{-2})}{E(R_{(nor)}^{-2})} E(II_{(nor)})$$

з  $R_{(nor)}^2 \sim \chi_{nk}^2$  отримуємо  $E(R_{(nor)}^{-2}) = \frac{1}{nk-2}$  і

$E(R_{(nor)}^2) = nk + 2$ . Тоді з результатів леми 1 знаходимо

$$E(II) = (nk-2)E(R^{-2}) \frac{n-1}{n-k-1} e_1' S\mu.$$

$a_3$ ) з  $E(III_{(nor)}) = 0$  випливає, що  $E(III) = 0$ .

Отже,

$$E(\hat{w}_{EU}^1(\hat{\mu}, \hat{\Sigma})) = \frac{e_1' \Sigma^{-1} 1_k}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k} + (nk-2)E(R^{-2}) \frac{n-1}{n-k-1} \tilde{\alpha}^{-1} e_1' S\mu$$

в) Маємо, що

$$Var(\hat{w}_{EU}^1(\hat{\mu}, \hat{\Sigma})) = Var(I) + \tilde{\alpha}^{-2} Var(II) + \tilde{\alpha}^{-2} Var(III) + 2\tilde{\alpha}^{-1} Cov(I, II) + 2\tilde{\alpha}^{-2} Cov(I, III) + 2\tilde{\alpha}^{-2} Cov(II, III)$$

**Лема 2.** Нехай  $X_1, \dots, X_n$  незалежно розподілені випадкові вектори і  $X_i \sim N(\mu, \Sigma)$  для  $i=1, \dots, n$ . Нехай  $\Sigma$  додатньо визначена. Нехай виконуються одна із наступних умов

- i)  $\alpha = \infty$ ,  $n \geq k+2$  і  $k \geq 2$  чи
- ii)  $\alpha < \infty$ ,  $1 \leq i=j \leq k$ ,  $n \geq k+4$  і  $k \geq 3$  чи
- iii)  $\alpha < \infty$ ,  $1 \leq i \neq j \leq k$ ,  $n \geq k+4$  і  $k \geq 4$ .

Тоді

$$Var(I_{(nor)}) = \frac{1}{n-k-1} \frac{e_1' Se_1}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k},$$

$$E(II_{(nor)}^2) = \frac{(n-1)^2}{(n-k)(n-k-1)(n-k-3)}$$

$$\times \left( \frac{3(n-k)-1}{n-k-1} (e_1' S\mu)^2 + \mu' S\mu e_1' Se_1 \right)$$

$$Var(III_{(nor)}) = E(III_{(nor)}^2) = \frac{(n-1)^2(n^2-k^2+1)}{n(n-k)(n-k-1)^2(n-k-3)} e_1' Se_1 + \frac{(n-1)^2}{n(n-k-1)^2} e_1' Se_1,$$

$$Cov(I_{(nor)}, II_{(nor)}) = Cov(I_{(nor)}, III_{(nor)}) = Cov(II_{(nor)}, III_{(nor)}) = 0.$$

Доведення леми випливає з теореми 1 ([4]).

$b_1$ )  $E(I)$  таке саме як і у випадку нормальності, так як  $I$  незалежить від  $R$ . Тоді

$$Var(I_{(nor)}) = \frac{1}{n-k-1} \frac{e_1' Se_1}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k}.$$

$b_2$ ) Отримаємо

$$E(II^2) = \frac{E(R^{-4})}{E(R_{(nor)}^{-4})} E(R_{(nor)}^{-4})$$

$$\times E \left[ \left\{ e_1' \left( (A\hat{E}A')^{-1} - \frac{(A\hat{E}A')^{-1} 1_k 1_k' (A\hat{E}A')^{-1}}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} \right) \mu \right\}^2 \right]$$

$$= (nk-2)(nk-4)E(R^{-4})E(II_{(nor)}^2),$$

де ми використали факт, що

$$\frac{\Gamma(\frac{nk}{2})}{\Gamma(\frac{nk}{2}-2)} = (nk-2)(nk-4).$$

Тоді,

$$Var(II) = (nk-2)(nk-4)E(R^{-4}) \frac{(n-1)^2}{(n-k)(n-k-1)(n-k-3)}$$

$$\times \left( \frac{3(n-k)-1}{n-k-1} (e_1' S\mu)^2 + \mu' S\mu e_1' Se_1 \right) - \left( (nk-2)E(R^{-2}) \frac{n-1}{n-k-1} e_1' S\mu \right)^2.$$

Аналогічно з  $E(III) = 0$  випливає, що

$$Var(III_{(nor)}) = (nk-2)E(R^{-2}) \left( \frac{(n-1)^2(n^2-k^2+1)}{n(n-k)(n-k-1)^2(n-k-3)} e_1' Se_1 + \frac{(n-1)^2}{n(n-k-1)^2} e_1' Se_1 \right)$$

$b_3$ ) Оскільки  $Cov(I_{(nor)}, II_{(nor)}) = 0$  і

$$E(I \cdot II) = \frac{E(R^{-2})}{E(R_{(nor)}^{-2})} E(I_{(nor)} \cdot II_{(nor)}), \text{ то ми отримаємо}$$

$$E(I \cdot II) = E(I_{(nor)}) \frac{E(R^{-2})}{E(R_{(nor)}^{-2})} E(II_{(nor)}) = E(I)E(II).$$

Тому  $Cov(I, II) = 0$ . Аналогічно  $Cov(I, III) = 0$  і  $Cov(II, III) = 0$ .

с) Розглянемо  $Cov(\hat{w}_{EU}^j, \hat{w}_{EU}^i)$ . Отримаємо, що коваріація рівна коваріації між першим, другим і третім елементом наступних векторів

$$\hat{w}_{EU}^j(\hat{\mu}, \hat{\Sigma}) = \frac{e_j' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} + \tilde{\alpha}^{-1} R^{-2} e_j' \left( (A\hat{E}A')^{-1} - \frac{(A\hat{E}A')^{-1} 1_k 1_k' (A\hat{E}A')^{-1}}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} \right) \mu$$



$$+ \tilde{\alpha}^{-1} R^{-2} e_i' \left( (A\hat{E}A')^{-1} - \frac{(A\hat{E}A')^{-1} 1_k 1_k' (A\hat{E}A')^{-1}}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} \right) b_{\frac{k+2}{2}} A u^{(k)}$$

$$= I_i + \tilde{\alpha}^{-1} II_i + \tilde{\alpha}^{-1} III_i$$

$$\hat{w}_{EV}(\hat{\mu}, \hat{\Sigma}) = \frac{e_j' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k}$$

$$+ \tilde{\alpha}^{-1} R^{-2} e_i' \left( (A\hat{E}A')^{-1} - \frac{(A\hat{E}A')^{-1} 1_k 1_k' (A\hat{E}A')^{-1}}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} \right) \mu$$

$$+ \tilde{\alpha}^{-1} R^{-2} e_i' \left( (A\hat{E}A')^{-1} - \frac{(A\hat{E}A')^{-1} 1_k 1_k' (A\hat{E}A')^{-1}}{1_k' (A\hat{E}A')^{-1} 1_k} \right) b_{\frac{k+2}{2}} A u^{(k)}$$

$$= I_j + \tilde{\alpha}^{-1} II_j + \tilde{\alpha}^{-1} III_j$$

**Лема 3.** Нехай  $X_1, \dots, X_n$  незалежно розподілені випадкові вектори і  $X_i \sim N(\mu, \Sigma)$  для  $i=1, \dots, n$ . Нехай  $\Sigma$  додатньо визначена. Нехай виконується одна із наступних умов

- i)  $\alpha = \infty$ ,  $n \geq k+2$  і  $k \geq 2$  чи
- ii)  $\alpha < \infty$ ,  $1 \leq i = j \leq k$ ,  $n \geq k+4$  і  $k \geq 3$  чи
- iii)  $\alpha < \infty$ ,  $1 \leq i \neq j \leq k$ ,  $n \geq k+4$  і  $k \geq 4$ .

Тоді

$$Cov(I_{i(nor)}, I_{j(nor)}) = \frac{1}{n-k-1} \frac{e_j' Se_i}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k}$$

$$E(II_{i(nor)} \cdot II_{j(nor)}) = \mu' \tilde{M}_{ij} \mu$$

$$Cov(III_{i(nor)}, III_{j(nor)}) = E(III_{i(nor)} \cdot III_{j(nor)})$$

$$= \frac{tr(M_{ij} \Sigma)}{n} + \frac{(n-1)^2}{n(n-k-1)^2} e_j' Se_i$$

$$Cov(I_{i(nor)}, II_{j(nor)}) = Cov(I_{i(nor)}, III_{j(nor)})$$

$$= Cov(II_{i(nor)}, I_{j(nor)}) = 0,$$

$$Cov(II_{i(nor)}, III_{j(nor)}) = Cov(III_{i(nor)}, I_{j(nor)})$$

$$= Cov(III_{i(nor)}, II_{j(nor)}) = 0.$$

Доведення леми випливає з результатів [4].

$c_1$ ) Маємо, що  $I_i, I_j, I_i$  і  $I_j$  незалежні від

$R$ . Отже,

$$Cov(I_i, I_j) = Cov(I_{i(nor)}, I_{j(nor)}) = \frac{1}{n-k-1} \frac{e_j' Se_i}{1_k' \Sigma^{-1} 1_k}$$

$c_2$ ) Обчислення  $Cov(II_i, II_j)$ .

Маємо, що

$$E(II_i \cdot II_j) = \frac{E(R^{-2})}{E(R_{(nor)}^{-2})} E(II_{i(nor)} \cdot II_{j(nor)})$$

Отже,

$$Cov(II_{i(nor)}, II_{j(nor)}) = (nk-2)(nk-4)E(R^{-4})\mu' \tilde{M}_{ij} \mu$$

$$- ((nk-2)E(R^{-2}))^2 e_i' S \mu \mu' S e_j$$

$c_3$ ) Отримаємо, що

$$E(III_i \cdot III_j) = \frac{E(R^{-2})}{E(R_{(nor)}^{-2})} E(III_{i(nor)} \cdot III_{j(nor)})$$

Тому

$$Cov(III_i, III_j) = (nk-2)E(R^{-2}) \left( \frac{tr(M_{ij} \Sigma)}{n} \right.$$

$$\left. + \frac{(n-1)^2}{n(n-k-1)^2} e_j' Se_i \right)$$

$c_4$ ) Аналогічно до  $b_3$ ) отримаємо

$$Cov(I_i, II_j) = Cov(I_i, III_j) = Cov(II_i, I_j) = 0,$$

$$Cov(II_i, III_j) = Cov(III_i, I_j) = Cov(III_i, II_j) = 0,$$

що завершує доведення теореми.

#### Список використаних джерел

1. Єлейко Я.І., Боднар Т.Д. Про використання векторів функцій розподілів стратегій для пошуку оптимальних рішень // Економічна кібернетика. – 2002. – № 5-6. – С. 49-56.
2. Gupta, A.K. and T. Varga. Elliptically contoured models in statistics. – Kluwer Academic Publishers, 1993. – P. 327.
3. Markowitz, H. Portfolio selection // The Journal of Finance. – 1952. – № 7. – P. 77-91.
4. Okhrin, Ya and W. Schmid. Distributional properties of portfolio weights // EUV Working Paper. – 2002. – № 9.
5. Samuelson, P.A. The Fundamental approximation theorem of portfolio analysis in terms of means, variances, and higher moments // Review of Economical Studies. – 1970. – № 36. – P. 537-542.
6. Schoenberg, I.J. Metric space and completely monotone functions // Ann. of Math. – 1938. – № 39. – P. 811-841.

Надійшла до редколегії 06.11.2006



УДК 519.21

Андрій М. Братійчук, аспірант

**Система  $M^b/G/1/b$  з відновлюючим рівнем вхідного потоку.**

Розглядається система обслуговування типу  $M^b/G/1/b$  з груповим впливом вимог в якій вхідний потік регулюється за допомогою деякого порогового рівня. Знайдено вигляд ергодичного розподілу довжини черги та запропоновано алгоритм його обчислення.

Ключові Слова: система обслуговування, процес Пуассона, ергодичний розподіл, метод потенціалу

E-mail: [basic@ks.net.ua](mailto:basic@ks.net.ua)

**Вступ**

Розглянемо систему типу  $M^b/G/1/b$  яка формально може бути описана наступним чином. Нехай задані послідовності випадкових величин  $\{\tau_n\}$ ,  $\{\theta_n\}$ ,  $\{\beta_n\}$ ,  $n \geq 1$  які репрезентують час між надходженням груп вимог до системи, розмір груп та час обслуговування відповідно. В момент часу  $\sum_{i=1}^n \tau_i$  до системи надходить  $n$ -та група замовлень яка містить  $\theta_n$  вимог.  $\beta_n$  є час обслуговування  $n$ -тої вимоги і дисципліна обслуговування є типу FCFS. Якщо в момент надходження вимог обслуговуючий пристрій зайнятий, то вимоги стають в чергу і спосіб організації черги всередині групи не є для нас суттєвим оскільки характеристики які будуть вивчатись в даній праці не будуть залежати від цього. Всі наведені вище випадкові величини є незалежними з однаковим розподілом для кожної послідовності і  $P\{\tau_n > x\} = e^{-\lambda x}$ ,  $x > 0$ . Кількість вимог які можуть знаходитись в системі обмежена числом  $b$ . Тобто в працюючій системі в черзі можуть знаходитись максимально  $b-1$  вимог. Отже якщо чергова група вимог об'єму  $\theta_n$  впливає до системи де вже є  $k$  вимог, то лише  $\min\{b-k, \theta_n\}$  з них приєднуються до черги, а решта

Andrij M. Bratiychuk, post-graduate student

**System  $M^b/G/1/b$  with a resume level of the input stream.**

The paper deals with a finite capacity batch arrival type queuing system of the type  $M^b/G/1/b$ . The input flow is regulated by some level. The form of ergodic distribution of the queue length is found and an efficient algorithm for computing that distribution is proposed.

Key Words: queuing system, Poisson process, ergodic distribution, potential method.

втрачається. Процес надходження вимог має одну особливість яка полягає в тому, що якщо кількість вимог в системі досягла рівня  $b$ , то їх надходження блокується і відновлюється знову лише тоді коли їх загальна кількість в системі зменшиться до деякого рівня  $a \in [0, b]$ . Випадок коли  $b = \infty$ , відповідає системі  $M^b/G/1/\infty$ , тобто системі з груповим надходженням вимог та нескінченною чергою. Зрозуміло що в цій ситуації присутність відновлюючого рівня не впливає на працю системи.

Необхідність розгляду таких систем може бути пояснена тим фактом, що у випадку обмежень на довжину черги деякі з вимог будуть втрачатись і було б бажано кількість таких вимог скоротити користуючись таким правилом: краще заздалегідь попередити про переповнення системи ніж прийняти вимогу, а потім її втратити. Цьому і служить введення відновлюючого рівня. Наскільки автору відомо така ідея була вперше запропонована в [1] (у випадку коли вимоги надходять по одній), а в [2] можна знайти формули для ергодичного розподілу  $\pi_k$ ,  $0 \leq k \leq b$  - довжини черги в такій системі. Незручність тих формул полягає в тому, що обчислення конкретного  $\pi_k$  неможливе без



обчислення всіх  $\pi_k$ . Цей недолік особливо помітний, якщо ми змінюємо рівні  $a, b$ , а така ситуація є типовою при вивченні оптимізаційних схем. В цій статті ми пропонуємо інший підхід який базується на методі потенціалу Королюка [3] і який, крім того що дає можливість обчислення індивідуальних  $\pi_k$ , фактично не робить різниці між системами з індивідуальним чи груповим впливом вимог.

Наведемо тепер деякі позначення які будуть використовуватись на протязі всієї статті. Позначимо  $P\{\beta_i \leq x\} = F(x)$ ,  $P\{\theta_i = k\} = a_k$ ,  $x \geq 0$ ,  $k = 1, 2, \dots$

$$f(s) = \int_0^\infty e^{-sx} dF(x),$$

$$\alpha(z) = \sum_{k=1}^\infty z^k a_k,$$

$$\operatorname{Re} s \geq 0, \quad |z| \leq 1.$$

Нехай  $\xi(t)$ ,  $t \geq 0$  позначає число вимог в системі в момент часу  $t$  а символи  $E_n$  та  $P_n$  позначають відповідно умовне математичне сподівання та умовну ймовірність при умові, що  $\xi(0) = n \geq 0$ , а  $F^{k*}(x)$  та  $a_i^{k*}$  позначають  $k$ -кратні згортки розподілів  $F(x)$  та  $\{a_k\}$  самих з собою.

За звичай система починає працювати, коли впливає перша група вимог і в цьому випадку ми будемо писати просто  $E$  та  $P$ .

Якщо  $\eta(x)$  позначає число вимог які вплинули до системи на інтервалі  $[0; x]$ , то легко зрозуміти, що

$$\sum_{i=0}^\infty z^i P\{\eta(x) = i\} = e^{-\lambda x(1-\alpha(z))}, \quad (1)$$

Головне завдання цієї роботи полягає в знаходженні зручних формул (з точки зору їх застосувань в розрахунках) для ергодичного розподілу кількості замовлень в системі, тобто для  $\pi_k = \lim_{t \rightarrow \infty} P\{\xi(t) = k\}$ ,  $0 \leq k \leq b$ . Відмітимо відразу, що існування ергодичного розподілу у випадку  $b < \infty$ , легко випливає з вузлової теореми теорії відновлення.

Ми також будемо вважати, що  $f(s) < 1$  для всіх  $s > 0$ . Ця умова є несуттєвою але допоможе скоротити доведення головного результату.

#### Рівняння на відрізку.

В цьому параграфі ми розглянемо рівняння розв'язком якого будуть характеристики які нас цікавлять.

Нехай  $p_i$ ,  $i = -1, 0, 1, \dots$  є деяким розподілом причому  $p_{-1} > 0$ . Такий розподіл відповідає неперервному знизу випадковому блуканню  $S_n$ ,  $n \geq 0$  такому, що  $P\{S_{n+1} - S_n = i\} = p_i$ ,  $n \geq 0$ . Позначимо

$$\sum_{i=-1}^\infty z^i p_i = Ez^{S_{n+1}-S_n} = k(z), \quad 0 < |z| \leq 1.$$

Для  $0 < v < 1$  розглянемо наступне рівняння

$$\phi(n) - v \sum_{i=1}^{b-n-2} p_i \phi(n+i) = f_n, \quad 1 \leq n \leq b-1, \quad (2)$$

де  $f_n$ ,  $1 \leq n \leq b-1$ , є деякою відомою послідовністю, а послідовність  $\phi(n)$ ,  $0 \leq n \leq b-1$  вважається невідомою. Означимо послідовність  $B_k(v)$ ,  $k = 1, 2, \dots$  за допомогою рівності

$$\sum_{k=1}^\infty z^k B_k(v) = \frac{1}{k(z) - 1 - v}, \quad (3)$$

і оскільки  $p_{-1} > 0$ , то таке визначення є коректним для всіх достатньо малих  $|z|$ . В праці [3] послідовність  $B_k(v)$ ,  $k = 1, 2, \dots$  була названа *резольвентою* блукання  $S_n$  і в цій же праці можна знайти цілий ряд властивостей резольвенти.

Оскільки, як в цьому легко переконатись, рівняння  $k(z) - 1 = v$  має єдиний корінь  $z(v) \in (0; 1)$ , то (3) справедливо для  $0 < |z| < z(v)$ .

В [3] отримано такий результат

**Теорема 1.** Для довільного  $0 < v < 1$  та довільної послідовності  $\{f_n\}$ ,  $|f_n| < \infty$ ,  $n \geq 0$ , загальний розв'язок рівняння

$$v \sum_{i=1}^n p_i \phi(n-i) - w(n) = f_n, \quad n \geq 0$$

може бути записаний у вигляді

$$w(n) = CB_{n+1}(\mu) + v^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} B_{n-k}(\mu) f_k, \quad n \geq 0,$$



де  $\mu = \nu^{-1} - 1$ , а  $C$  є деякою сталою.

Цю теорему ми використаємо для знаходження загального розв'язку рівняння (2). Має місце наступний результат.

**Теорема 2.** Загальний розв'язок рівняння (2) можна подати у вигляді

$$\phi(n) = (1 + \tilde{Q}_{b-n}(\nu))\phi(b-1) - \nu^{-1} \sum_{k=0}^{n-2} B_{n-k}(\nu) f_k$$

$$0 \leq n \leq b-1 \quad (4)$$

$$\text{де } \tilde{Q}_n(\nu) = \nu^{-1} \sum_{k=0}^{n-2} B_{n-1-k}(\mu) d_k(\nu), \quad \mu = \nu^{-1} - 1,$$

$$d_k(\nu) = 1 - \nu \sum_{i=1}^{k-1} p_i,$$

Відмітимо, що розв'язок (4) визначений з докладністю до величини  $\phi(b-1)$  яка для конкретних функціоналів визначається з відповідної граничної умови в точці  $n=0$ .

*Доведення.* Неважко зрозуміти, що рівняння (2) є еквівалентним наступному

$$\phi(n) - \nu \sum_{i=1}^{\infty} p_i \phi(n+i) = f_n - \nu \bar{p}_{b-n-1} \phi(b-1),$$

$$1 \leq n \leq b-1, \quad (5)$$

з такою граничною умовою

$$\phi(n) = \phi(b-1), \quad n \geq b-1. \quad (6)$$

Перетворення  $\tilde{\phi}(n) = \phi(b-n-1) - \phi(b-1)$  зводить (5), (6) до граничної задачі

$$\begin{cases} \nu \sum_{i=1}^n p_i \tilde{\phi}(n-i) - \tilde{\phi}(n) = \Psi_n(b), & 0 \leq n \leq b-2, \\ \tilde{\phi}(0) = 0, \end{cases} \quad (7)$$

де  $\Psi_n(b) = \phi(b-1) d_n(\nu) - f_{b-n-1}$ . З Теорема 1 випливає, що загальний розв'язок рівняння в (7) може бути записаний у вигляді

$$\tilde{\phi}(n) = C B_{n+1}(\mu) + \nu^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} B_{n-k}(\mu) \Psi_k(b),$$

$$\mu = \nu^{-1} - 1.$$

Гранична умова  $\tilde{\phi}(0) = 0$  дає  $C = 0$ , а тому

$$\tilde{\phi}(n) = \nu^{-1} \phi(b-1) \sum_{k=0}^{n-1} B_{n-k}(\mu) d_k(\mu) -$$

$$- \nu^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} B_{n-k}(\mu) f_{b-1-k}$$

$$\phi(b-n-1) - \phi(b-1) = \phi(b-1) \tilde{Q}_{n+1}(\nu) -$$

$$- \nu^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} B_{n-k}(\mu) f_{b-1-k}$$

що, очевидно, рівноважне (4).

**Довжина черги на періоді зайнятості**

Позначимо  $\tau_b = \inf\{t \geq 0; \xi(t) = 0\}$ ,

$\phi_n(t, k) = P_n\{\xi(t) = k, \tau_b > t\}$ ,  $1 \leq n, k \leq b$  і нехай

$$\tilde{\phi}_n(s, k) = \int_0^{\infty} e^{-sx} \phi_n(t, k) dt, \quad \operatorname{Re} s > 0.$$

В цьому параграфі головним об'єктом дослідження буде функція  $\tilde{\phi}_n(s, k)$ , тобто довжина черги на періоді зайнятості.

Якщо система починає працювати, коли впливає перша група вимог, то очевидно

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} e^{-st} P\{\xi(t) = k, \tau > t\} dt = \\ & = \sum_{n=1}^{b-1} a_n \int_0^{\infty} e^{-st} P_n\{\xi(t) = k, \tau > t\} dt + \bar{a}_b \phi_b(s, k) = \\ & = \sum_{n=1}^{b-1} a_n \int_0^{\infty} e^{-st} P_n\{\xi(t) = k, \tau > t\} dt + \\ & + \bar{a}_b \left( f^{b-a}(s) \phi_a(s, k) + I\{a \leq k \leq b\} \frac{f^{b-k}(s)(1-f(s))}{s} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

Останній доданок в цій формулі відповідає ситуації, коли в початковий момент поступило більше ніж  $b$  вимог. Тоді подальше надходження вимог блокується і відновиться лише тоді, коли до моменту  $t$  буде обслуговано  $b-a$  вимог (цьому відповідає вираз  $f^{b-a}(s) \phi_a(s, k)$ ) або до моменту  $t$  відновлення не відбудеться і черга в цей момент буде рівна  $k$ .

Нехай

$$p_l(s) \equiv f^{-1}(s) \sum_{i=0}^{l+1} a_{i+1}^* \int_0^{\infty} e^{-(\lambda+s)x} \frac{(\lambda x)^i}{i!} dF(x),$$



$$l = -1, 0, 1, \dots \quad (9)$$

Оскільки  $p_i(s) > 0$ ,  $s > 0$  і  $\sum_{i=-1}^{\infty} p_i(s) = 1$ , то числа  $p_i(s)$ ,  $i \geq -1$  можемо інтерпретувати як розподіл скачків деякого блукання неперервного знизу і якщо ми позначимо  $a(s, z) = s + \lambda(1 - \alpha(z))$ , то неважко переконатись що

$$\sum_{i=-1}^{\infty} z^i p_i(s) = \frac{f(a(s, z))}{zf(s)}, \quad |z| \leq 1.$$

Для цього блукання послідовність  $B_k(\nu, s)$ ,  $k = 1, 2, \dots$  яка була визначена в (3) (але тепер ми добавили змінну  $s$  оскільки наше блукання залежить від цього параметра) визначається так

$$\sum_{k=1}^{\infty} z^k B_k(\nu, s) = \frac{zf(s)}{f(a(s, z)) - (1 + \nu)zf(s)}. \quad (10)$$

Надалі нам буде зручніше мати справу з функцією  $R_k(s) = f^{-1}(s)B_k(f^{-1}(s) - 1, s)$  для якої, враховуючи (10), маємо

$$\sum_{k=1}^{\infty} z^k R_k(s) = \frac{z}{f(a(s, z)) - z}, \quad |z| < \nu_-(s), \quad (11)$$

де  $\nu_-(s)$  є єдиним коренем рівняння  $f(a(s, z)) - z = 0$ ,  $0 < z < 1$  на інтервалі  $[0; 1]$ . Рівність (11) будемо вважати за означення функції  $R_k(s)$ .

Позначимо

$$Q_n(s) = \sum_{k=0}^{n-2} R_{n-k-1}(s)d_k(s),$$

$$d_k(s) = 1 - f(s) \sum_{i=-1}^{k-1} p_i(s), \quad \bar{p}_n(s) = \sum_{i=n}^{\infty} p_i(s),$$

$$g_n(s, k) = g(s, k)\bar{p}_{b-n-1}(s) + \bar{g}_n(s, k), \quad (12)$$

де

$$\bar{g}_n(s, k) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i (I\{n \leq k \leq b-1\} a_{k-n}^{\epsilon} + I\{k = b\} \bar{a}_{b-n}^{\epsilon}).$$

$$\sum_{l=t+1}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{e^{-(\lambda+s)t} t^l}{l!(\lambda+s)^{l-t-1}} dF(t)$$

$$g(s, k) = I\{a \leq k \leq b-1\} \frac{f^{b-k}(s)(1-f(s))}{s},$$

$$\bar{a}_k^{\epsilon} = \sum_{j=k}^{\infty} a_j^{\epsilon}$$

і нехай також

$$\Delta(s) = \begin{vmatrix} 1 + f^{b-a}(s) \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) & 1 + Q_{b-a}(s) \\ f^{b-a}(s) \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) & 1 + Q_b(s) \end{vmatrix}$$

$$\Delta_1(s, k) = \begin{vmatrix} 1 + Q_{b-a}(s) & \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) g_i(s, k) \\ 1 + Q_b(s) & 1 + \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) g_i(s, k) \end{vmatrix};$$

$$\Delta_2(s, k) = \begin{vmatrix} 1 + f^{b-a}(s) \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) & \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) g_i(s, k) \\ f^{b-a}(s) \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) & \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) g_i(s, k) \end{vmatrix}.$$

**Теорема 3.** Для довільних  $1 \leq k \leq b$ ,  $1 \leq n \leq b-1$  та  $s > 0$  має місце зображення

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-st} P_n\{\xi(t) = k, \tau > t\} dt &= (1 + Q_{b-n}(s)) \phi_{b-1}(s, k) - \\ &- f^{b-a}(s) \phi_a(s, k) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) - \\ &- \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) g_i(s, k), \end{aligned} \quad (13)$$

де функції  $\phi_a(s, k)$  і  $\phi_{b-1}(s, k)$  визначаються так

$$\phi_a(s, k) = \frac{\Delta_1(s, k)}{\Delta(s)}, \quad \phi_{b-1}(s, k) = \frac{\Delta_2(s, k)}{\Delta(s)}. \quad (14)$$

**Доведення.** Використовуючи формулу повної ймовірності маємо

$$\begin{aligned} \phi_n(t, k) &= \sum_{l=0}^{b-n-1} \int_0^t P\{\eta(x) = l\} \phi_{n+l-1}(t-x, k) dF(x) + \\ &+ \int_0^t P\{\eta(x) \geq b-n\} \int_0^{t-x} P\left\{\sum_{i=1}^{b-n-1} \beta_i \in dv\right\} \phi_a(t-x-v, k) dF(x) \end{aligned}$$



$$+ I\{a \leq k \leq b-1\}.$$

$$\begin{aligned} & \cdot \int_0^t P\{\eta(x) \geq b-n\} \cdot P\left\{\sum_{i=1}^{b-k-1} \beta_i < t-x \leq \sum_{i=1}^{b-k} \beta_i\right\} dF(x) + \\ & + (I\{n \leq k \leq b-1\} P\{\eta(t) = k-n\} + \\ & + I\{k=b\} P\{\eta(t) \geq b-n\}) \bar{F}(t) \end{aligned} \quad (15)$$

для  $1 \leq n \leq b-1$  і  $\phi_0(t, k) = 0$ . Тут  $I\{A\}$  рівне 0 чи 1 в залежності від того чи відбулась подія  $A$  чи ні.

Пояснимо тепер імовірнісний зміст доданків в наведеній вище рівності.

Доданок

$$\sum_{l=0}^{b-n-1} \int_0^t P\{\eta(x) = l\} \phi_{n+l-1}(t-x, k) dF(x)$$

відповідає ситуації, що перша обслуга була завершена до часу  $t$  (включаючи само  $t$ ) і за час коли обслуговуючий пристрій був зайнятий обсергою першої вимоги розмір черги не перевищив  $b-1$ .

Доданок

$$\int_0^t P\{\eta(x) \geq b-n\} \int_0^{t-x} P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dv\right\} \phi_a(t-x-v, k) dF(x)$$

відповідає ситуації, що перша обслуга була завершена до часу  $t$  і за час коли обслуговуючий пристрій був зайнятий обсергою першої вимоги розмір черги досягнув рівня  $b$ , але потім після завершення обслуговування першої вимоги (скажемо в момент  $x$ ) довжина черги досягла рівня  $a-1$  перед моментом  $t$ .

Доданок

$$I\{a \leq k \leq b-1\} \int_0^t P\{\eta(x) \geq b-n\} P\left\{\sum_{i=1}^{b-k-1} \beta_i < t-x \leq \sum_{i=1}^{b-k} \beta_i\right\} dF(x)$$

відповідає ситуації, що перша обслуга була завершена до часу  $t$  і за час коли обслуговуючий пристрій був зайнятий обсергою першої вимоги розмір черги досягнув рівня  $b-1$ , але потім після завершення обслуговування першої вимоги довжина черги не досягла рівня  $a-1$  перед моментом  $t$ . Зрозуміло що цей доданок буде нульовим якщо  $k < a$ , що і пояснює присутність множника  $I\{a \leq k \leq b-1\}$ .

Останній доданок в (15) відповідає ситуації, що перша обслуга була завершена після часу  $t$  і щоб цей доданок був ненульовим потрібно, по-перше, щоб виконувалась умова  $k \geq n$ , а, по-друге, якщо

$n \leq k \leq b-1$ , то на інтервалі  $[0; t]$  мусить надійти лише  $k-n$  вимог, а якщо  $k=b$ , то на інтервалі  $[0; t]$  може надійти  $\geq b-n$  вимог.

Перейдемо в (15) до перетворення Лапласа враховуючи формулу (1) та позначення (9). Виконаємо необхідні обчислення

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-sx} P\{\eta(x) = l\} dF(x) &= \sum_{i=0}^l a_i^* \int_0^\infty e^{-(s+\lambda)x} \frac{(\lambda x)^i}{i!} dF(x) = \\ &= p_{l-1}(s) f(s). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} \int_0^t P\{\eta(x) \geq b-n\} \int_0^{t-x} P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dv\right\} \phi_a(t-x-v, k) dF(x) dt = \\ = f^{b-a}(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) \tilde{\phi}_a(s, k). \end{aligned}$$

Оскільки

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} P\left\{\sum_{i=1}^{b-k-1} \beta_i < t \leq \sum_{i=1}^{b-k} \beta_i\right\} dt = \\ = \int_0^\infty e^{-st} \int_0^t P\{\beta_{b-k} > t-z\} dP\left\{\sum_{i=1}^{b-k-1} \beta_i < z\right\} dt = \\ = \frac{f^{b-k-1}(s)(1-f(s))}{s}, \end{aligned}$$

то

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} \int_0^t P\{\eta(x) \geq b-n\} P\left\{\sum_{i=1}^{b-k-1} \beta_i < t-x \leq \sum_{i=1}^{b-k} \beta_i\right\} dF(x) dt = \\ = \frac{f^{b-k}(s)(1-f(s)) \bar{p}_{b-n-1}(s)}{s}. \end{aligned}$$

І, нарешті, для  $m \geq 0$  маємо

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} P\{\eta(t) = m\} \bar{F}(t) dt = \\ = \sum_{i=0}^{k-n} a_{k-n-i}^* \int_0^\infty e^{-(s+\lambda)t} \frac{(\lambda t)^i}{i!} \bar{F}(t) dt = \\ = \sum_{i=0}^m a_m^* \int_0^\infty \int_0^t e^{-(s+\lambda)x} \frac{(\lambda x)^i}{i!} dx dF(t) = \\ = \sum_{i=0}^m a_m^* \lambda^i \sum_{l=i+1}^\infty \int_0^\infty \frac{e^{-(s+\lambda)t} t^l}{l!(\lambda+s)^{l-i+1}} dF(t) \end{aligned}$$

З (15) враховуючи наведені вище обчислення отримуємо рівняння



$$\begin{aligned} \phi_n(s, k) - f(s) \sum_{l=1}^{b-n-2} p_l(s) \phi_{n+l}(s, k) = \\ = f^{b-a}(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) \phi_a(s, k) + g_n(s, k), \\ 1 \leq n \leq b-1 \end{aligned} \quad (16)$$

з такою граничною умовою

$$\phi_0(s, k) = 0. \quad (17)$$

Тепер з Теорема 2 дістаємо

$$\begin{aligned} \phi_n(s, k) = (1 + \bar{Q}_{b-n}(f(s))) \phi_{b-1}(s, k) - \\ - f^{b-a-1}(s) \phi_a(s, k) \sum_{i=n+1}^{b-1} B_{i-n}(\mu) \bar{p}_{b-i-1}(s) - \\ - f^{-1}(s) \sum_{i=n+1}^{b-1} B_{i-n}(\mu) g_i(s, k), \end{aligned} \quad (18)$$

де  $\mu = f^{-1}(s) - 1$ , а функція  $B_n(\mu)$  була означена в (3). Якщо тепер врахувати означення функцій  $R_k(s)$  та  $Q_k(s)$  (рівність (11) та перша рівність в (12) відповідно), то співвідношення (18) ми можемо переписати в наступному вигляді

$$\begin{aligned} \phi_n(s, k) = (1 + Q_{b-n}(s)) \phi_{b-1}(s, k) - \\ - f^{b-a}(s) \phi_a(s, k) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) - \\ - \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) g_i(s, k). \end{aligned} \quad (19)$$

Поклавши тут  $n = a$  отримаємо перше рівняння для  $\phi_a(s, k)$  та  $\phi_{b-1}(s, k)$ .

$$\begin{aligned} \phi_a(s, k) (1 + f^{b-a}(s) \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) - \\ - \phi_{b-1}(s, k) (1 + Q_{b-a}(s))) = - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) g_i(s, k). \end{aligned}$$

З (17) маємо друге рівняння

$$\begin{aligned} \phi_a(s, k) f^{b-a}(s) \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) - \phi_{b-1}(s, k) (1 + Q_b(s)) = \\ = - \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) g_i(s, k). \end{aligned}$$

Отже для  $\phi_a(s, k)$  та  $\phi_{b-1}(s, k)$  маємо наступну систему лінійних рівнянь

$$\begin{cases} \phi_a(s, k) \left( 1 + f^{b-a}(s) \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) \right) - \\ - \phi_{b-1}(s, k) (1 + Q_{b-a}(s)) = - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) g_i(s, k), \\ \phi_a(s, k) f^{b-a}(s) \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) - \\ - \phi_{b-1}(s, k) (1 + Q_b(s)) = - \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s) g_i(s, k), \end{cases} \quad (20)$$

і її розв'язок визначається формулами (14) які, разом з (19), дають зображення (13).

Щоб повністю завершити доведення теореми нам залишилось показати, що  $\Lambda(s) \neq 0$  для всіх  $s > 0$ . Це рівнозначне тому, що система рівнянь (20) з  $g_i(s, k) \equiv 0$  має лише нульовий розв'язок.

Отже нехай  $c_1, c_2$  будуть розв'язками однорідної системи яка відповідає (20). Тоді згідно з (19) функція

$$\psi_n(s) = C_1 (1 + Q_{b-n}(s)) - C_2 f^{b-a}(s) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s)$$

буде розв'язком такої граничної задачі

$$\begin{cases} \psi_n(s) - f(s) \sum_{l=1}^{b-n-2} p_l(s) \psi_{n+l}(s) = \\ = f^{b-a}(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) \psi_a(s), & 1 \leq n \leq b-1, \\ \psi_0(s) = 0. \end{cases}$$

Оскільки

$$0 \leq f(s) \sum_{l=1}^{b-n-2} p_l(s) + f^{b-a}(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) < 1 \quad \text{для}$$

всіх  $s > 0$  та  $0 \leq n \leq b-1$ , то з очевидних співвідношень

$$\begin{aligned} \max_{0 \leq n \leq b-1} |\psi_n(s)| &= \\ &= \max_{0 \leq n \leq b-1} \left| f(s) \sum_{l=1}^{b-n-2} p_l(s) \psi_{n+l}(s) + \right. \\ &\quad \left. + f^{b-a}(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) \psi_a(s) \right| \end{aligned}$$



$$\leq \max_{0 \leq n \leq b-1} |\psi_n(s)| \max_{0 \leq n \leq b-1} [f(s) \cdot \sum_{l=n-2}^{b-n-2} p_l(s) + f^{b-a}(s) \bar{p}_{b-n-1}(s)]$$
 маємо  $\psi_n(s) \equiv 0$ . Тепер з тотожності 
$$C_1(1 + Q_{b-n}(s)) - C_2 f^{b-a}(s) \sum_{l=n+1}^{b-1} R_{l-n}(s) \bar{p}_{b-l-1}(s) \equiv 0,$$
  $0 \leq n \leq b-1$  при  $n = b-1$  отримуємо  $C_1 = 0$ , і отже  $C_2 = 0$ . Теорема повністю доведена.

Легко переконатись що  $d_k(s) = 1 - f(s) + f(s) \bar{p}_k(s)$ , а тому 
$$Q_n(s) = (1 - f(s)) \sum_{k=1}^{n-1} R_k(s) + f(s) \sum_{k=0}^{n-2} R_{n-k-1}(s) \bar{p}_k(s), \quad (21)$$

Позначимо

$$D = \begin{vmatrix} \sum_{l=a+1}^{b-1} R_{l-a} \bar{p}_{b-l-1} & \sum_{l=1}^{b-a-1} R_l \\ \sum_{l=1}^{b-1} R_l \bar{p}_{b-l-1} & \sum_{l=1}^{b-1} R_l \end{vmatrix},$$
$$D(k) = \begin{vmatrix} \sum_{l=a+1}^{b-1} R_{l-a} \bar{p}_{b-l-1} & \sum_{l=a+1}^{b-1} R_{l-a} \bar{g}_l(k) \\ \sum_{l=1}^{b-1} R_l \bar{p}_{b-l-1} & \sum_{l=1}^{b-1} R_l \bar{g}_l(k) \end{vmatrix}, \quad (22)$$

де  $R_l = R_l(0)$ ,  $\bar{p}_l = \bar{p}_l(s)$ ,  $\bar{g}_l(k) = \bar{g}_l(0, k)$ . Використовуючи (21) а також очевидне співвідношення

$$\lim_{s \rightarrow 0} g(s, k) = I\{a \leq k \leq b-1\} m, \quad m = \int_0^\infty x dF(x)$$

отримуємо такий результат

**Лема 1.**

$$\Delta = \lim_{s \rightarrow 0} \Delta(s) = 1 + \sum_{l=a+1}^{b-1} R_{l-a} \bar{p}_{b-l-1},$$
$$\Delta_1(k) = \lim_{s \rightarrow 0} \Delta_1(s, k) = \sum_{l=1}^{b-1} (R_l - R_{l-a}) (I\{a \leq k \leq b-1\} m \bar{p}_{b-l-1} + \bar{g}_l(k)) + D(k);$$
$$\Delta_2(k) = \lim_{s \rightarrow 0} \Delta_2(s, k) = \sum_{l=1}^{b-1} R_l (I\{a \leq k \leq b-1\} m \bar{p}_{b-l-1} + \bar{g}_l(k)) + D(k).$$

З цієї леми та Теорема 3 випливає

**Наслідок 1.** Для всіх  $1 \leq k \leq b$  та  $1 \leq n \leq b-1$  справедливо зображення

$$\int_0^\infty P_n\{\xi(t) = k, \tau > t\} dt = \frac{\Delta_2(k) + \sum_{l=n+1}^{b-1} R_{l-n} \bar{p}_{b-l-1} \left( \sum_{j=a+1}^{b-1} R_{j-a}(s) \bar{g}_j(k) - m I\{a \leq k \leq b-1\} \right)}{1 + \sum_{l=a+1}^{b-1} R_{l-a} \bar{p}_{b-l-1}} - \sum_{l=n+1}^{b-1} R_{l-n} \bar{g}_l(k). \quad (23)$$

З цієї формули враховуючи той факт, що (це легко випливає з означення функції  $\bar{g}_l(k)$  (див. (12)))  $\sum_{k=1}^b \bar{g}_l(k) = m$  отримуємо формулу для середньої довжини першого періоду зайнятості.

**Наслідок 2.** Для всіх  $1 \leq n \leq b-1$  справедливим зображення

$$E_n \tau = \frac{(b-a) \sum_{l=1}^{b-1} R_l \bar{p}_{b-l-1} + \sum_{l=1}^{b-1} R_l + D + \sum_{l=n+1}^{b-1} R_{l-n} \bar{p}_{b-l-1} \left( \sum_{j=1}^{b-a-1} R_j - b + a \right)}{1 + \sum_{l=a+1}^{b-1} R_{l-a} \bar{p}_{b-l-1}} - m \sum_{l=1}^{b-n-1} R_l. \quad (24)$$

Використовуючи формулу (8) ми можемо знайти розподіл довжини черги на періоді зайнятості, якщо система починає працювати в момент надходження першої групи вимог. Після чого вже просто знайти зображення для характеристичної функції періоду зайнятості та виписати вигляд ергодичного розподілу довжини черги. Ці формули будуть досить громіздкими і напевно немає сенсу наводити їх в журнальній статті. Тому ми обмежимося випадком системи  $M/G/1/b$ , тобто випадком коли вимоги надходять по одній.

**Ергодичний розподіл довжини черги для системи  $M/G/1/b$**



Нехай  $\theta$  позначає час першого простоя системи, тобто проміжок від моменту  $\tau$  до приходу чергової вимоги. Оскільки вхідний потік є пуасонівським, то цей час має розподіл показниковий з параметром  $\lambda$  і не залежить від  $\tau$ . Якщо позначимо  $P\{\tau + \theta \leq x\} = \Phi(x)$ , а  $H(x)$  є функція віднови яка відповідає  $\Phi(x)$ , то використовуючи факт, що моменти надходження вимог до вільної системи утворюють процес відновлення можемо записати

$$P\{\xi(t) = k\} = \int_0^t P\{\xi(t-v) = k, \tau > t-v\} dH(v)$$

для всіх  $1 \leq k \leq b$ . Для  $k=0$  аналогічно маємо

$$P\{\xi(t) = 0\} = \int_0^t P\{\tau < t-v, \tau + \theta > t-v\} dH(v).$$

Застосовуючи до цих формул вузлову теорему відновлення, а також враховуючи представлення (23) (з  $n=1$ ) отримуємо

$$\pi_k = \lim_{t \rightarrow \infty} P\{\xi(t) = k\} = (M + \lambda^{-1})^{-1} \int_0^\infty P\{\xi(t) = k, \tau > t\} dt =$$

$$\frac{\Delta_2(k) + \sum_{i=2}^{b-1} R_{i-1} \bar{p}_{b-i+1} \left( \sum_{j=a+1}^{b-1} R_{j-a}(s) \bar{g}_i(k) - m \Lambda \{a \leq k \leq b-1\} \right)}{(M + \lambda^{-1}) \left( 1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i+1} \right)} - \frac{\sum_{i=2}^{b-1} R_{i-1} \bar{g}_i(k)}{M + \lambda^{-1}} \quad (25)$$

де (див (24)) (з  $n=1$ )

$$M = \frac{(b-a) \sum_{i=1}^{b-1} R_i \bar{p}_{b-i+1} + \sum_{i=1}^{b-1} R_i + D + \sum_{i=2}^{b-1} R_{i-1} \bar{p}_{b-i+1} \left( \sum_{j=1}^{b-a-1} R_j - b+a \right)}{1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i+1}} - m \sum_{i=1}^{b-2} R_i. \quad (26)$$

Аналогічно маємо

$$\begin{aligned} \pi_0 &= \lim_{t \rightarrow \infty} P\{\xi(t) = 0\} = \\ &= (M + \lambda^{-1})^{-1} \int_0^\infty P\{\tau < t, \tau + \theta > t\} dt = \\ &= (M + \lambda^{-1})^{-1} \int_0^\infty (P\{\tau + \theta > t\} - P\{\tau > t\}) dt = \\ &= \frac{1}{1 + M\lambda}. \end{aligned} \quad (27)$$

Алгоритм для обчислення послідовності  $R_k$  (яка є головною в наведених вище формулах) можна знайти в [3] і відмітимо, що ця послідовність не залежи від рівнів  $a, b$ , а отже може бути знайдена ще до початку функціонування системи. Після цього користуючись зображеннями (25)-(27) ми можемо розрахувати ергодичний розклад для конкретного  $k$  і при цьому інші значення  $\pi$ , нам непотрібні.

### Література

1. Takagi, H. Analysis of finite - capacity M/G/1 queue with a resume level. Performance Evaluation. -1985.- v. 5, N.3.- p. 197-203.
2. Takagi, H. Queueing Analysis.- Elsevier Science Publishers B.V., The Netherlands, v. 2, 1993.
3. Корольок В.С. Граничные задачи для сложных пуассоновских процессов.- Киев: Наукова думка, 1975.

Надійшла до редколегії 26.02.07



УДК 681.3.06

Буй Д.Б., д.ф.-м.н., с.н.с.,  
Шишацька О.В.\*

## UML – сучасна універсальна мова моделювання: історія, специфікація, бібліографія

Зроблено стислий екскурс в історію виникнення та розвитку UML, наведено короткий огляд мови та зроблено спробу систематизувати велику кількість навчально-наукової літератури, присвяченої цій мові.

Ключові слова: UML, об'єктно-орієнтоване проектування, мова моделювання, специфікація, семантика.

Buy D.B., d.ph.-m.s., s.n.s.,  
Shyshats'ka O.V.\*

## UML – contemporary universal modeling language: history, specification, bibliography

The short digression is done in history of UML origin and development, the brief review of language is resulted and an attempt to systematize a plenty of the educational and scientific literature devoted to this language is done.

Key Words: UML, object-oriented design, modeling language, specification, semantics.

\*E-mail: [buy@unicyb.kiev.ua](mailto:buy@unicyb.kiev.ua), [shyshatskaja@unicyb.kiev.ua](mailto:shyshatskaja@unicyb.kiev.ua).

Останнім часом великої популярності набула мова моделювання UML (Unified Modeling Language), яка стала "стандартом де-факто" в області розробки програмного забезпечення та застосовується для розв'язання задач інших галузей, наприклад, бізнес-моделювання. У роботі зроблено стислий екскурс в історію виникнення та розвитку UML, наведено короткий огляд мови та зроблено спробу систематизувати велику кількість навчальної та наукової літератури, присвяченої цій мові.

### Виникнення та призначення мови

В основу UML покладено декілька об'єктно-орієнтованих методів, кожен із яких був орієнтований на підтримку окремих етапів об'єктно-орієнтованого аналізу та проектування (ООАП) [1/2]<sup>1</sup>:

– метод Граді Буча (Grady Booch), що одержав умовну назву Booch або Booch'91, Booch Lite (пізніше – Booch'93) і вважався найбільш ефективним на етапах проектування та розробки різних програмних систем [1, 3];

– метод Джеймса Румбаха (James Rumbaugh), що одержав назву Object Modeling Technique – OMT (пізніше – OMT-2) та

найбільше підходив для аналізу процесів обробки даних в інформаційних системах [4];

– метод Айвара Джекобсона (Ivar Jacobson), Object-Oriented Software Engineering – OOSE, що містив засоби подання варіантів використання, які мають істотне значення на етапі аналізу вимог у процесі проектування бізнес-застосувань [5].

Історія розвитку UML датується 1994 роком, коли почалася уніфікація та інтеграція вищевказаних методів їх авторами. Проект уніфікованого методу (Unified Method) версії 0.8 був опублікований в жовтні 1995 року.

Всі питання розробки та супроводження мови UML сконцентровані в рамках консорціуму OMG (Object Management Group) [6]. Хоча консорціум OMG був утворений з метою розробки пропозицій по стандартизації об'єктних і компонентних технологій CORBA, мова UML набула статусу другого стратегічного напрямку в роботі OMG. В листопаді 1997 року OMG оголосив UML стандартною мовою об'єктно-орієнтованого моделювання і прийняв на себе обов'язки по її подальшому розвитку. Відповідна група фахівців забезпечує публікацію матеріалів, що містять опис наступних версій мови UML і запитів пропозицій RFP (Request For Proposals) по її стандартизації. Статус мови UML визначений як відкритий для всіх пропозицій по її доробці та удосконаленню. В 2003 році опубліковано опис мови UML 2.0, що став результатом роботи над набором запитів RFP 2000 року. В описі наводились: інфраструктура UML [7], мова обмежень об'єктів (Object

<sup>1</sup> Тут і надалі запис [а /b/] означатиме, що у списку літератури джерело, що знаходиться під номером b, є російськомовним перекладом джерела з номером a. Оскільки переклад літератури даної галузі не завжди є коректним (неузгодженість термінології, втрачає семантичних відтінків понять та ін.), вважаємо доцільним навести обидва варіанти видань, позаяк, говорити про автентичність перекладу, на жаль, не можна.



Constraint Language – OCL) [8], суперструктура UML [9] та формат обміну діаграм [10].

Основними ініціативами консорціуму OMG в рамках роботи над проектом UML є: (1) моделювання систем реального часу; (2) визначення моделі виконання – точної специфікації поведінки моделей, що підтримуються UML, і семантики виконання моделей; (3) обробка даних підприємства (розподілення об'єктної обробки даних підприємства та інтеграція застосувань підприємства) – визначені так звані *профілі*, що описують способи створення великих розподілених паралельних систем підприємства; (4) визначення процесу розробки програмного забезпечення – специфіковані структури визначення процесів розробки програмного забезпечення; (5) стандарт зберігання даних; (6) співставлення технології CORBA і мови UML; (7) формат XMI (Metadata Interchange) для обміну моделями UML в текстовому форматі [11].

Сама мова UML не є власністю та ніким не запатентована, хоча зазначений вище документ (опис мови в [11]) захищений законом про авторське право. У той же час аббревіатура UML, як і деякі інші (наприклад, OMG, CORBA), є торговельною маркою їхніх законних власників.

Існує консорціум партнерів UML, у який увійшли такі всесвітньовідомі компанії, як Digital Equipment Corp., HP, i-Logix, Intellicorp, IBM, ICON Computing, MCI Systemhouse, Microsoft, Oracle, Rational Software, TI, Unisys та інші. Ці компанії забезпечують підтримку роботи з уточнення визначення нотації, подальшого удосконалення і доповнення мови, а також супроводження розробки інструментальних засобів підтримки мови.

З більш ніж 800 компаній і організацій, що входять до складу консорціуму OMG, особливу роль відіграє Rational Software Corporation [12] – розробник одного з перших інструментальних CASE-засобів Rational Rose 98 [13, 14], у якому реалізована мова UML.

Необхідно відмітити увагу компанії Microsoft до технології, що базується на мові UML (підтримується цією мовою). На основі такої технології Microsoft, Rational Software Corporation та інші постачальники засобів розробки програмних систем створили єдину інформаційну модель, що одержала назву UML Information Model, призначену для подальшого створення стандартного інтерфейсу між засобами розробки застосувань і засобами візуального моделювання.

Слід зазначити, що на даний момент Rational Software Corporation офіційно входить до складу IBM (<http://www-306.ibm.com/software/rational/>).

Мова UML призначена для розв'язання наступних завдань [15/16/]:

- надати у розпорядження користувачів готову до використання виразну потужну мову візуального моделювання, що дозволяє їм розробляти осмислені моделі й обмінюватися ними;

- передбачити внутрішні механізми розширюваності й спеціалізації для розширення базових концепцій мови;

- забезпечити максимальну незалежність проекту створення програмного забезпечення від конкретних мов програмування (цільових мов програмної реалізації) й процесів розробки;

- забезпечити формальну основу для однозначної інтерпретації цієї мови моделювання (мова повинна бути одночасно точною і доступною для розуміння, без надлишкового формалізму);

- стимулювати розширення ринку об'єктно-орієнтованих інструментальних засобів створення програмного забезпечення;

- інтегрувати кращий практичний досвід щодо використання мови та реалізації програмних засобів її підтримки.

Принципи використання UML специфіковані в Rational Unified Process (RUP) – розвиненої методики створення програмного забезпечення, оформленої у вигляді бази знань, яка фізично розміщена на web (<http://www-306.ibm.com/software/awdtools/rup/support/>) та оснащена пошуковою системою [17/18/, 19]. Це комерційний продукт Rational Software Corporation, що визначає строгий регламент розподілу задач і відповідальності між виконавцями в процесі розробки програмного забезпечення.

Основними документами з UML є [20], де описано так звану *метамодель* UML, але дуже мало уваги приділяється саме семантиці мовних конструкцій. Опис поточної версії мови UML [7-10] та приклади розробки програмних систем з використанням CASE-засобу Rational Rose можна знайти на web-вузлі OMG за адресою [www.omg.org](http://www.omg.org). Модифікації мови UML і найновіші її версії, котрі лише повинні побачити світ, наводяться на вузлі [www.celigent.com/uml](http://www.celigent.com/uml).

Зазначимо, що офіційна документація по UML досить важка для розуміння; тому виходить багато книг, котрі описують її з різними акцентами. Наприклад, базова система позначень



UML популярно і доступно викладена в книзі Мартіна Фовлера (Martin Fowler) [21/22/], яка вважається одним з найкращих посібників по вивченню мови. Слід відзначити книги, написані головними авторами UML – Г. Бучем, І. Джекобсоном, Д. Рембо (в іншому перекладі Румбахом або Рамбо): в [15] викладено детальну інформацію про використання UML (покриває близько 80% мови) та проілюстровано застосування мови на великій кількості прикладів; в [19] розглядається процес об'єктно-орієнтованої розробки програмного забезпечення; в довіднику з UML [23/24/] охоплюється вся мова та робиться спроба розкрити її змістовну семантику. Початківцям варто звернути увагу на видання [25], що вийшло у серії "... для чайників"; детальний та повний опис мови також наведено в [26].

Питанням використання продукту Rational Rose присвячені праці [27, 28], але найбільш розгорнуто та доступно моделювання систем засобами UML з використанням Rational Rose описано та проілюстровано великою кількістю прикладів в [29/30/] (перевидання [31] – є розширеним та адаптованим під UML 2.0).

Також необхідно виокремити серію книг під редакцією головних авторів мови: "Серія об'єктні технології" видавництва "Addison Wesley", що розкриває питання застосування мови [17, 32, 33, 34, 35]. Застосуванню UML та шаблонів проектування також присвячені [36, 37].

UML створювалася як мова моделювання загального (універсального) призначення для застосування в таких "дискретних" галузях як програмне забезпечення, апаратні засоби чи цифрова логіка.

В UML наявні структури, що дозволяють фіксувати різноманітні рішення по відображенню (1) функціональності системи [35, 38, 39], (2) динамічної та статичної структури системи, (3) організації елементів системи [40], (4) реалізації системи. Популярності набуває використання UML при проектуванні баз даних [33, 41, 42]. Завдяки відкритості (наявності в мові механізмів розширення) вона надає потужний інструментарій для розв'язання задач інших галузей, наприклад, бізнес-моделювання [44].

### Загальна структура мови

Семантика мови UML визначається для двох видів об'єктних моделей: *структурних моделей* та *моделей поведінки*. Структурні (статичні) моделі описують структуру сутностей або компонентів системи, включаючи їхні класи,

*інтерфейси*, *атрибути* та *зв'язки*. Моделі поведінки (динамічні моделі) описують поведінку або функціонування об'єктів системи, включаючи їхні *методи*, *взаємодію* (співробітництво) між ними, а також процес зміни станів окремих компонентів і системи в цілому [3].

Формальний опис мови UML ґрунтується на наступній загальній ієрархічній структурі модельних подань (представлень), яка складається із чотирьох рівнів абстракції: (1) мета-метамодель, (2) метамодель, (3) модель, (4) об'єкти користувача [7].

Рівень мета-метамоделі утворює базову основу для всіх метамодельних подань та визначає мову для специфікації метамоделі. Мета-метамодель визначає модель мови UML на найвищому рівні абстракції (відповідно на найнижчому рівні конкретизації) і є найбільш компактним її описом. Метамодель – екземпляр або конкретизація мета-метамоделі – визначає мову для специфікації моделей. Всі основні поняття мови UML – це поняття рівня метамоделі. Модель у контексті мови UML є екземпляром (конкретизацією) метамоделі в тому розумінні, що будь-яка (конкретна) модель системи повинна використовувати тільки поняття метамоделі, конкретизувавши їх стосовно до даної ситуації. Змістовно кажучи, рівень моделі призначений для опису конкретної предметної області. Конкретизація понять моделі відбувається на рівні об'єктів, які є екземплярами моделі і містять конкретну інформацію щодо відповідності понять моделі та предметної області.

Основою подання UML на метамодельному рівні є опис трьох його *логічних блоків* (або *пакетів* за іншою термінологією): *основні елементи*, *елементи поведінки* та *загальні механізми* [9].

### Концептуальна модель мови

Концептуальна модель мови включає основні будівельні блоки, правила їх поєднання та деякі загальні для усієї мови механізми [15, 23, 22].

Словник мови UML містить *сутності* – абстракції, що є основними елементами моделі, та *відношення* – основні сполучні будівельні блоки. Сутності та відношення за певними правилами поєднуються в конструкції – *діаграми*.

В UML визначено чотири типи сутностей [15]:

– *структурні сутності*, які розподіляються на *основні сутності*, *різновиди основних сутностей* та решту структурних сутностей; до



основних сутностей відносяться: *клас* (Class), *інтерфейс* (Interface), *кооперація* (Collaboration), *прецедент* (Use case), *активний клас* (Active class), *компонент* (Component), *вузол* (Node); до різновидів основних сутностей відносяться: *актор* (Actor), *сигнал* (Signal), *утиліта* (Utility, утиліти є видами класів); *процес* (Process) і *нитка* (Thread, нитки є видами активних класів); до решти відносяться: *застосування* (Application), *документ* (Document), *файл* (File), *бібліотека* (Library), *сторінка* (Page) та *таблиця* (Table, таблиці є видами компонентів);

– *сутності поведінки* (Behavioral things), до яких відноситься *взаємодія* (Interaction) та *автомат* (State machine);

– *групуючі сутності*, серед яких поки що виділений тільки *пакет* (Packages);

– *анотаційні сутності*, серед яких поки що виділена тільки *примітка* (Note).

Основними типами відношень в UML є відношення: *залежності* (Dependency), *асоціації* (Association) (різновидом асоціації є відношення *агрегування* (Aggregation)), *узагальнення* (Generalization) та *реалізації* (Realization). Існують також їх варіації, наприклад, *уточнення*, *трасування*, *включення* та *розширення* (для залежностей).

Для побудови коректно оформленої моделі в UML визначено правила, що дозволяють коректно і однозначно визначати: (1) імена сутностей, відношень та діаграм, (2) область дії імен (контекст, в якому ім'я має деяке значення), (3) видимість імен (для використання іншими елементами), (4) цілісність (правильність та узгодженість співвідношення елементів), (5) виконання моделі [15].

Ефективність та спрощення застосування мови забезпечується використанням певних угод, так званих, *загальних механізмів*: *специфікацій* (Specifications), *доповнень* (Adornments), *прийнятих розподілів* (Common divisions) та *механізмів розширення* (Extensibility mechanisms) [15, 23, 22].

Кожен елемент нотації UML має унікальне графічне позначення та специфікацію – текстове представлення синтаксису та змістовної семантики відповідного будівельного блоку.

Практично усі будівельні блоки характеризуються дихотомією “клас / об’єкт” та “інтерфейс / реалізація”. Це основні підходи поділу реальності при об’єктно-орієнтованому моделюванні систем.

UML допускає контрольовані розширення (тобто є відкритою мовою) для адаптування мови до конкретних потреб. Наявність внутрішніх

механізмів розширення принципово відрізняє UML від таких засобів моделювання як IDEF0, IDEF1X, IDEF3, DFD та ERM [43], які є замкненими, тобто не допускають розширення засобами самої мови. До *механізмів розширення* UML відносяться: (1) *стереотип* (Stereotype), який розширює словник мови (дозволяє створювати із існуючих блоків нові, специфічні для конкретної розв’язуваної задачі); (2) *тегване значення* (Tagged value), яке розширює властивості будівельного блоку (дає можливість включати нову інформацію в специфікацію елемента; (3) *обмеження* (Constraint), яке розширює семантику будівельного блоку (дозволяє додавати нові або модифікувати існуючі правила за допомогою семантичних обмежень текстового вигляду природною мовою або формальною мовою OCL). Деякі розширення набули такої популярності, що були визначені як стандартні елементи поточної версії UML [15, 23, 22].

### Графічні конструкції мови

У рамках мови UML всі подання про моделі складної системи фіксуються у вигляді спеціальних графічних конструкцій, що одержали назву *діаграм* [8]. Діаграма в UML – це графічне представлення набору елементів, зображуване, як правило, у вигляді зв’язного графу з вершинами (сутностями) і ребрами (відношеннями). Теоретично діаграми можуть містити будь-які комбінації сутностей і відношень. Однак на практиці застосовується порівняно невелика кількість типових комбінацій. У мові UML визначені наступні види діаграм:

– *діаграма варіантів використання* (Use case diagram);

– *діаграма класів* (Class diagram);

– *діаграми поведінки* (Behavior diagrams), до яких відносяться *діаграма станів* (Statechart diagram), *діаграма діяльності* (Activity diagram), *діаграми взаємодії* (Interaction diagrams); в свою чергу до діаграм взаємодії відносяться *діаграма послідовності* (Sequence diagram) та *діаграма кооперації* (Collaboration diagram);

– *діаграми реалізації* (Implementation diagrams), до яких відносяться *діаграма компонентів* (Component diagram) та *діаграма розгортання* (Deployment diagram).

Перелік цих діаграм і їхніх назв є канонічними, вони – невід’ємна частина графічної нотації мови UML. Більше того, процес OOAI нерозривно пов’язаний із процесом побудови цих діаграм. При цьому сукупність побудованих у



такий спосіб діаграм є самодостатньою в тому розумінні, що в них утримується вся інформація, що необхідна для реалізації проекту складної системи.

Кожна із цих діаграм деталізує й конкретизує різні подання про моделі складної системи в термінах мови UML. При цьому діаграма варіантів використання є найбільш загальною концептуальною моделлю складної системи, вихідною (тобто початковою) для побудови всіх інших діаграм. Діаграма класів є, по своїй суті, логічною моделлю, що відбиває *статичні аспекти структурної побудови* складної системи. Діаграми поведінки також є різновидами логічної моделі, які відбивають *динамічні аспекти функціонування* складної системи. І, нарешті, діаграми реалізації слугують для подання фізичних компонентів складної системи, й тому відносяться до її *фізичної моделі*. Таким чином, інтегрована модель складної системи в нотації UML представляється у вигляді сукупності зазначених вище діаграм.

Слід звернути увагу, що при моделюванні системи часто будують діаграму об'єктів (Object diagram), яка представляє множину об'єктів і відношень між ними в заданий момент часу (так званий "знімок системи"). Вона не є канонічною діаграмою UML, але корисна в деталізації системи.

#### Підходи до специфікації семантики мови

Початковою метою розвитку UML було забезпечення більш точного опису мови моделювання – забезпечення формальної основи для розуміння мови моделювання. Однак до цього часу формальна семантика не є частиною стандарту. Огляд декількох пропозицій щодо визначення такої семантики наведено в [45], де розглянуто *теоретико-множинний, трансляційний, метамодельний* підходи та запропоновано так звану "*вільну*" семантику. Слід зазначити, що і в самій специфікації UML існує багато огріхів та протиріч. Так в роботі [46] розглядаються відношення включення та розширення для варіантів використання, в [47] аналізуються стандартні стереотипи метамоделі UML. В роботі [48] пропонується використати RM-ODP (The Reference Model of Open Distributed Processing [49]) для розв'язання проблем мови. Зауважимо, що в специфікації UML модель RM-ODP згадується як структура, що безпосередньо впливає на архітектуру метамоделі мови (розділ "Preface: Relationships to Other Models" [9]). Окрім того RM-ODP використовується в MOF (Meta-Object Facility)

для управління типами. В [48] ідентифікуються три проблеми метамоделі UML та пропонуються їх розв'язки на базі RM-ODP:

- структурний хаос семантики мови – "висока технічність, небагатослівність та складність для розуміння новачками"; розв'язання: використання структури RM-ODP та теорії типів Б. Расела;

- відсутність декларативної семантики, суперечливість семантики мови при описі, по-перше, відношень між моделями, побудованими з використанням мови, та, по-друге, безпосередньо суб'єктів моделювання; розв'язання: реалізація базової концепції моделювання (Basic Modeling Concept);

- недостатнє теоретичне обґрунтування використовуваної метамоделі мови UML; розв'язання: пропонується в статті концепція моделювання на основі RM-ODP, теорії типів Б. Расела та підходу А. Гарського до інтерпретації формальних числень вважається повністю обґрунтованою.

Багато наукових досліджень, присвячених формалізації моделі та метамоделі мови UML, розглядають не саму мову в повному об'ємі, а деяку її підмову (формальну та строго структуровану).

Так, в [50] розглядаються BON (Business Object Notation, об'єктно-орієнтована мова моделювання, що по суті співпадає з підмовою діаграм класів UML [51]) та PVS (Prototype Verification System – мова специфікацій, розроблена для автоматичного аналізу метамodelей мов моделювання [52]). Результатом роботи є повна формальна специфікація метамоделі об'єктно-орієнтованої мови моделювання у формі, придатній до автоматичного аналізу. Однак BON в порівнянні з UML більш формалізована та "підігнана" під умови розв'язуваної задачі. Схожий підхід використаний в роботі [53], де в якості платформи для формалізації мов моделювання вибрано формалізм Boom, що складається з метамоделі і мови формальних специфікацій Odal – простої строго типізованої мови з семантикою, визначеною за допомогою так званого  $\pi$ -числення. В роботі [54] розглядається формалізація мови MML (Metamodelling Language), що є підмножиною UML і запропонована авторами в якості бази для усієї UML 2.0. Формалізація мови MML проводиться за допомогою MML-числення, основою якого є так зване  $\psi$ -числення Cardelli і Abadi [55].

Нарешті, в роботі [56] демонструється застосовність алгебраїчного методу для



формального опису ER-діаграм (Entity-Relationship diagrams), які є аналогами діаграм класів UML.

Підсумовуючи, мова UML є потужним, гнучким засобом моделювання, з відкритим до вдосконалення описом стандарту. Неоднозначність як деяких конструкцій самої мови, так і поглядів на семантику мови та наявність в її специфікації неформальних описів потребує подальшого розвитку формальної основи для повної та несуперечливої інтерпретації мови.

### Список використаних джерел<sup>2</sup>

1. *Booch G.* Object-oriented analysis and design with applications. Second edition. – The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., 1994. – 589 p.
2. *Буч Г.* Объектно-ориентированное проектирование с примерами применения: Пер с англ. – Москва: Конкорд, 1996. – 519 с.
3. *Буч Г.* Объектно-ориентированный анализ и проектирование: с примерами приложений на C++. Пер с англ. – Санкт-Петербург: "Издательство Бином", "Невский диалект", 1998. – 560 с.
4. *Rumbaugh J., Blacha M., Premerlani W., Eddy F., Lorensen W.* Object-Oriented Modeling and Design. – Prentice-Hall Inc., 1991. – 432 p.
5. *Jacobson I.* Object-Oriented Software Engineering. A Use Case Driven Approach. – Addison-Wesley Publishing Company, 1993. – 547 p.
6. Object Management Group, 2003. OMG Unified Modeling Language Specification / [www.omg.org](http://www.omg.org).
7. [www.omg.org/04-10-14pdf](http://www.omg.org/04-10-14pdf).
8. [www.omg.org/05-06-06pdf](http://www.omg.org/05-06-06pdf).
9. [www.omg.org/05-07-04pdf](http://www.omg.org/05-07-04pdf).
10. [www.omg.org/05-06-04pdf](http://www.omg.org/05-06-04pdf).
11. *Рамбо Д.* Тенденции в развитии языка UML и разработки ПО / <http://www.interface.ru/fset.asp?Url=/rational/umlend.htm>.
12. <http://www.rational.com/uml>.
13. *Кумсков М.* Rational Rose 98 – CASE-продукт нового поколения / <http://www.interface.ru/public/rose98/rose98.htm>.
14. *Новичков А.* Rational Rose для разработчиков / <http://www.interface.ru/fset.asp?Url=/rational/xros.htm>.
15. *Booch G., Rumbaugh J., Jacobson I.* The Unified Modeling Language User Guide. – MA.: Addison-Wesley Publishing Co., 1999. – 512 p.
16. *Буч Г., Рамбо Д., Джекобсон А.* UML. Руководство пользователя: Пер. с англ. – Москва: ДМК, 2000. – 432 с.
17. *Kruchten P.* The Rational Unified Process – An Introduction. – MA.: Addison-Wesley, 2000. – 234 p.
18. *Кратчен Ф.* Введение в Rational Unified Process. – Пер. с англ. – Москва: Издательский дом "Вильямс", 2003. – 203 с.
19. *Jacobson I., Booch G., Rumbaugh J.* The Unified Software Development Process. – MA.: Addison-Wesley Publishing Co., 1999. – 512 p.
20. *Booch G., Jacobson I., Rumbaugh J.* The UML specification documents. – Santa Clara, CA.: Rational Software Corp., 1997. (Специфікацію можна знайти за адресою [www.rational.com](http://www.rational.com).)
21. *Fowler M., Scott K.* UML Distilled. – MA.: Addison-Wesley, 2000. – 472 p.
22. *Фаулер М., Скотт К.* UML в кратком изложении. Применение стандартного языка объектного моделирования.: Пер. с англ. – Москва: Мир, 1999. – 416 с.
23. *Rumbaugh J., Jacobson I., Booch G.* Unified Modeling Language Reference Manual. – MA.: Addison-Wesley Publishing Co., 1999. – 576 p.
24. *Рамбо Д., Якобсон А., Буч Г.* UML. Специальный справочник: Пер. с англ. – Санкт-Петербург: Изд. дом "Питер", 2002. – 654 с.
25. *Chonoles M. J., Schardt J.A.* UML 2 for Dummies. – Hungry Minds, 2003. – 412 p.
26. *Kendal S.* Fast Track UML 2.0. – Apress, 2004., 416 p.
27. *Трофимов С. А.* Практическая работа в Rational Rose / <http://oad.asf.ru/Files.aspx>
28. *Вендров А. М.* Объектно-ориентированный анализ и проектирование с использованием языка UML и Rational Rose. Практикум / <http://oad.asf.ru/Files.aspx>
29. *Boggs W., Boggs M.* Mastering UML with Rational Rose. – Sybex Inc., 1999. – 579 p.

<sup>2</sup> Деякі з вказаних джерел можна знайти за адресою <http://oad.asf.ru/Files.aspx>. Зокрема [3], [22], [25], [26], [30], [31], [37], [40], [42].



30. *Boggs W., Boggs M. UML. Rational Rose: Пер. с англ. – Москва: Издательство “Лори”, 2001. – 582 с.*
31. *Boggs W., Boggs M. UML with Rational Rose 2.0. – Sybex Inc., 2002. – 702 p.*
32. *Кватрани Т. Визуальное моделирование с помощью Rational Rose и UML: Пер. с англ. – Москва: Издательский дом “Вильямс”, 2003. – 192 с.*
33. *Нейбург Э., Максимчук Р. Проектирование баз данных с помощью UML: Пер. с англ. – Москва: Издательский дом “Вильямс”, 2002. – 288 с.*
34. *Гома Х. UML. Проектирование систем реального времени, распределенных и параллельных приложений: Пер. с англ. – Москва: ДМК, 2002. – 704 с.*
35. *Розенберг Д., Скотт К. Применение объектно-ориентированного моделирования с использованием UML и анализ прецедентов: Пер. с англ. – Москва: ДМК, 2002. – 160 с.*
36. *Ларман К. Применение UML и шаблонов проектирования. 2-е издание: Пер. с англ. – Москва: Издательский дом “Вильямс”, 2004. – 604 с.*
37. *Gamma E., Helm R., Jonson R., Vissides J. Element of Reusable Object-Orient Software. – Addison Wesley Longman Inc., 1994. – 372 p.*
38. *Коберн А. Современные методы описания функциональных требований к системам: Пер. с англ. – Москва: ЛОРИ, 2002. – 262 с.*
39. *Леффингуэлл Д., Уидриг Д. Принципы работы с требованиями к программному обеспечению. Унифицированный подход: Пер. с англ. – Москва: “Вильямс”, 2002. – 448 с.*
40. *Duffy Daniel J. Domain architectures: models and architectures for UML applications. – John Wiley & Sons Ltd, 2004. – 390 p.*
41. *Мюллер Р. Базы данных и UML. Проектирование: Пер. с англ. – Москва: ЛОРИ, 2002. – 420 с.*
42. *Nock C. Data Access Patterns: Database Interactions in Object-Oriented Applications. – Addison Wesley, 2003. – 512 p.*
43. *Маклаков С. В. Создание информационных систем с AllFusion Modeling Suite. – Москва: ДИАЛОГ-МИФИ, 2005. – 432 с.*
44. *Eriksson H.-Erik, Penker M. Business Modeling with UML: Business Patterns at Work. – Wiley Computer Publishing, 2000. – 274 p.*
45. *Husman H. Loose Semantics for UML/OCL // Society for Design and Process Science, 2002. – P. 32-39.*
46. *Genova G., Llorens J., Quintana V. Digging into Use Case Relationships // Lect. Notes Comput. Sci. – 2002. – V. 2460. – P. 115-127.*
47. *Gogolla M., Henderson-Sellera B. Analysis of UML Stereotypes within the UML Metamodel // Lect. Notes Comput. Sci. – 2002. – V. 2460. – P. 84-99.*
48. *Naumenko A., Wegmann A. A Metamodel for the Unified Modeling Language // Lect. Notes Comput. Sci. – 2002. – V. 2460. – P. 2-17.*
49. *RM-ODP Open Distributed Processing – Reference Model - ISO, ITU.: ISO/IEC 10746-1, 2, 3, 4 | ITU-T Recommendation X.901, X.902, X.903, X.904, 1995-1998.*
50. *Paige R., Ostroff J. Metamodelling and Conformance Checking with PVS // Lect. Notes Comput. Sci. – 2001. – V. 2029. – P. 2-16.*
51. *Walden K., Nerson J.-M. Seamless Object-Oriented Software Development. – Prentice-Hall, 1995.*
52. *Owre S., Shankar N., Rushby J., Stringer-Calvert D. The PVS Language Reference Version 2.3 – September, 1999. – (Tech. Rep. / SRI International Technical Report).*
53. *Overgaard G. Formal Specification of OO Modeling // Lect. Notes Comput. Sci. – 2000. – V. 1783. – P. 193-207.*
54. *Clark T., Evans A., Kent S. The Metamodelling Language Calculus: Foundation Semantics for UML // Lect. Notes Comput. Sci. – 2001. – V. 2029. – P. 17-31.*
55. *Cardeli L., Abadi M. A theory of Objects. – Springer-Verlag, 1996.*
56. *Lellahi K. Conceptual Data Modeling: An Algebraic Viewpoint // Lect. Notes Comput. Sci. – 2001. – V. 2244. – P. 336-348.*

Надійшла до редколегії 12.03.2007



УДК 681.3.06

Буй Д.Б., д.ф.-м.н., с.н.с.,  
Сільвейструк Л.М.\*

### Модель “сутність-зв’язок”: ролі, сильні та слабкі типи сутностей і типи зв’язків

Розглядаються і формалізуються такі поняття моделі “сутність-зв’язок”: ролі, сильні та слабкі типи сутностей, сильні та слабкі типи зв’язків. Розкрито принципи побудови діаграми сутностей та зв’язків.

Ключові слова: сильний тип сутності, слабкий тип сутності, сильний тип зв’язку, слабкий тип зв’язку, роль, діаграма сутностей та зв’язків.

\*E-mail: buy@unicyb.kiev.ua, slm-klm@rambler.ru

У роботі продовжується розгляд та формалізація моделі “сутність-зв’язок” (entity-relationship model). В працях [1–4] були уточнені сутності, зв’язки та структурні обмеження зв’язків. У цій статті розглядаються такі поняття: ролі, сильні та слабкі типи сутностей, сильні та слабкі типи зв’язків. Також розглядається графічна нотація Чена діаграми сутностей та зв’язків (entity-relationship diagram).

#### Ролі

Семантичне значення входження типу сутності у тип зв’язку називається її *ролюю*. Входженням типів сутностей у тип зв’язку можна надавати *рольові імена* — для уточнення призначення кожного входження (більш неформально: для уточнення призначення кожної сутності-учасниці у зв’язку). Тут треба говорити саме про входження, тому що  $n$ -арний тип зв’язку, де  $n = 2, 3, \dots$ , задається на  $n$  необов’язково різних типах сутностей. Особливе значення мають рольові імена в типах зв’язків на одному типі сутності. В цьому випадку нема інших засобів крім рольових імен для розрізнення різних входжень одного типу сутності в тип зв’язку. Отже, зміст рольових імен полягає в синтаксичному розрізненні входжень одного і того ж типу сутності в тип зв’язку.

Серйозно говорити про семантичний аспект рольових імен, тобто про визначення функцій учасників зв’язку рольовими іменами, не приходить, оскільки вся “семантика” полягає в виборі “мнемонічних” рольових імен, які і повинні відображати семантику.

Можна сказати, що поняття ролі часто допоміжне, воно існує для зручності

Buy D.B., d.ph.-m.s., s.n.s.  
Silveystruk L.N.\*

### Model “entity-relationship”: roles, strong and weak entity types and relationship types

Such notions of model “entity-relationship” are considered and formalized: roles, strong and weak entity types, strong and weak relationship types. The principles of construction entity-relationship diagram are exposed.

Key Words: strong entity type, weak entity type, strong relationship type, weak relationship type, role, entity-relationship diagram.

користувача; тому ролі (рольові імена) можна навіть не вводити, особливо в випадку, коли явне введення цих імен нічого не додає до розуміння моделі.

Рольові імена, які будемо позначати через  $v_1, v_2, \dots$ , дають можливість уточнити тип зв’язку (з мінімальною інтерпретацією).

Типом зв’язку *арності*  $n$  між типами сутностей (який з’єднує типи сутностей)  $E_1, \dots, E_k$ , де  $k \leq n$ , і сутності  $E_1, \dots, E_k$  попарно різні, назвемо сюр’єктивне відображення вигляду  $R: \{v_1, \dots, v_n\} \rightarrow \{E_1, \dots, E_k\}$ , де рольові імена  $v_1, \dots, v_n$  попарно різні.

Рольові імена дають змогу зробити подальший крок в уточненні типу зв’язку, інтерпретуючи його не як відношення [1], а як таблицю [5], схема якої співпадає з множиною рольових імен типу зв’язку.

#### Слабкі та сильні типи сутностей, слабкі та сильні типи зв’язків

Іноді сам факт існування сутностей деякого типу сутності залежить від особливого зв’язку цих сутностей з сутностями інших типів сутностей. Тобто можна сказати, що тип зв’язку вводить тип сутності. Дамо змістовні пояснення.

*Слабким типом сутності (weak entity type)* називають такий тип сутності, існування якого залежить від інших типів сутностей. Тип зв’язку, який з’єднує дані типи сутностей, називається *слабким типом зв’язку (weak relationship type)*, тобто це такий тип зв’язку, який вводить до розгляду *слабкий тип сутності*.

Взагалі будь-який тип зв’язку можна використовувати у якості слабого типу зв’язку



[6], але ми накладемо на ( $n$ -арний) слабкий тип зв'язку такі два обмеження:

– у слабкий тип зв'язку може входити тільки один слабкий тип сутності, який вводиться цим слабким типом зв'язку (і деталізується іншими типами сутностей, які входять у цей слабкий тип зв'язку);

– ступінь участі слабого типу сутності, який вводиться слабким типом зв'язку, повна (тобто сутності слабого типу сутності можуть існувати, тільки знаходячись у зв'язку).

Уточнюючи перше обмеження, скажемо, що *слабкий тип сутності*  $E$  вводиться слабким типом зв'язку  $R$ , якщо  $R$  має вигляд  $R: \{v_1, \dots, v_n\} \rightarrow \{E_1, \dots, E_k\}$ , де  $E \in \{E_1, \dots, E_k\}$ ,  $|R^{-1}(\{E\})| = 1$ .

*Сильним типом сутності* (*strong entity type*) називають такий тип сутності, існування якого не залежить від інших типів сутностей.

Тип зв'язку, який не є слабким типом зв'язку, називається *сильним типом зв'язку* (*strong relationship type*).

Сильний тип зв'язку ще називають *регулярним відношенням сутності* (*regular entity relation*) [6], а слабкий тип зв'язку – *підтримуючим зв'язком* (*supporting relationships*) [7, гл. 2, с. 82-83].

Сильний тип сутності називають ще *батьківським* (*parent*), *сутністю-володарем* (*owner*), *домінантним* (*dominant*) або *регулярним* (*regular*); слабкий тип сутності – *дочірнім* (*child*), *залежним* (*dependent*) чи *підлеглим* (*subordinate*) [8, част. II, гл. 5, с. 185; 9, част. III, гл. 11, с. 410].

Зазначимо, що поняття слабого типу сутності має декілька інтерпретацій (див., наприклад, [10, гл. 3]). Це зумовлено тим, що деякі проектувальники баз даних під слабким типом сутності розуміють тип сутності, наявність якого в базі даних залежить від інших типів сутностей. Інші ж вважають, що слабким типом сутності є тип сутності, який логічно залежить від інших типів сутностей (тобто вводиться деяким типом зв'язку). Зрозуміло, що друге трактування, якого ми притримуємось, є більш вузьким.

Щоб проілюструвати відмінність цих двох підходів, розглянемо два приклади, слідуючи [10, гл. 3, с. 90]. Перший приклад – це два типи сутностей Керівник та Студент, причому за правилами учбового закладу кожен студент повинен мати керівника. За першим підходом (до визначення слабого типу сутності) тип сутності Студент – слабкий тип сутності, але згідно другого підходу, якщо сутність типу сутності

Студент може існувати без зв'язку з деякою сутністю типу сутності Керівник, то тип сутності Студент – також сильний тип сутності.

Другий приклад – три типи сутностей Пациент, Лікар та Рецепт. Зрозуміло, що рецепт видається конкретному пацієнту деяким існуючим лікарем, тобто тип сутності Рецепт вводиться певним слабким типом зв'язку, який включає сильні типи сутностей Пациент та Лікар. Отже, тип сутності Рецепт є слабким типом сутності як при першому, так і при другому підходах.

Є і третій змістовний підхід. Іноді сутності деякого типу сутності неможливо унікально ідентифікувати значеннями їх власних атрибутів; значить, для їх ідентифікації треба використати слабкий тип зв'язку, який поєднує даний тип сутності з іншими типами сутностей (який вводить цей слабкий тип сутності), причому атрибути цих типів сутностей (сильних типів в даному контексті) будуть входити до складу первинного ключа слабого типу сутності, що вводиться.

Цей тип сутностей є особливим видом слабких типів сутностей і називається *ідентифікаційно-залежним типом сутності* (*ID-dependent entity type*); тобто це такий тип сутності, ідентифікатор сутностей (первинний ключ) якого містить ідентифікатори (первинні ключі) інших сутностей. В даному випадку можна сказати, що ідентифікаційно-залежний тип сутності залежить від інших типів сутностей як логічно, так і фізично (оскільки поняття ключа можна відносити до цих двох рівнів). Зауважимо, що деякі проектувальники баз даних обмежують слабкі типи сутностей саме ідентифікаційно-залежними типами сутностей. Зрозуміло, що остання інтерпретація слабких типів сутностей є найвужчою з трьох вищенаведених.

Розглянемо ідентифікаційно-залежний тип сутності на прикладі двох типів сутностей Квартира та Будинок [10, гл. 3, с. 89]. Нехай первинним ключем (ідентифікатором) типу сутності Будинок є атрибут НазваБудинку. Для того, щоб ідентифікувати сутності типу сутності Квартира, необхідно знати не тільки номер квартири та її внутрішні характеристики, але і будинок, в якому вона знаходиться; значить, ідентифікатором типу сутності Квартира є атрибути НазваБудинку та НомерКвартири. Оскільки ідентифікатор типу сутності Квартира містить в собі ідентифікатор типу сутності Будинок (а саме НазваБудинку), то тип сутності Квартира є ідентифікаційно-залежним від типу сутності Будинок.



Можлива ситуація, коли деякі типи сутностей, від яких залежить існування слабкого типу сутності, входять у слабкий тип зв'язку декілька раз у різних ролях.

Наприклад, слабкий тип зв'язку Контракт, який вводить слабкий тип сутності Контракти, включає (з'єднує) сильні типи сутностей Актори, Кінофільми, Студії [7, гл. 2, с. 82]. Зв'язок відображає, зокрема, факт укладання контракту між кіностудією, яка володіє правами на зйомку кінофільму, і іншою кіностудією, яка дозволяє актору приймати участь у роботі над даним фільмом (тому що актор є штатним співробітником цієї кіностудії). Як бачимо, тип сутності Студії входить у слабкий тип зв'язку Контракт у двох ролях – “студія-актор” (студія, в штаті якої знаходиться актор) та “студія-фільм” (студія, яка знімає фільм). Таким чином, слабкий тип сутності Контракти залежить від існування типів сутностей Актори, Кінофільми та Студії, але тип сутності Студії деталізує слабкий тип два рази.

Слабкий тип зв'язку можна зобразити за допомогою ациклічного, орієнтованого графа (точніше дерева одиничної глибини), де множина вершин – множина типів сутностей, які є учасниками слабкого типу зв'язку, множина дуг – множина пар вершин (початком дуги буде вершина, що відповідає слабкому типу сутності, кінцем дуги – вершина, яка відповідає сильному типу сутності). При даній інтерпретації випадок, коли сильний тип сутності входить у даний слабкий тип зв'язку декілька раз у різних ролях, ми спрощуємо і зображаємо у вигляді однієї дуги.

На рис. 1 зображено граф, який зображає слабкий тип сутності  $E$ , існування якого залежить від сильних типів сутностей  $F_1, F_2, \dots, F_n$  і вводиться за допомогою слабкого типу зв'язку  $R$ .

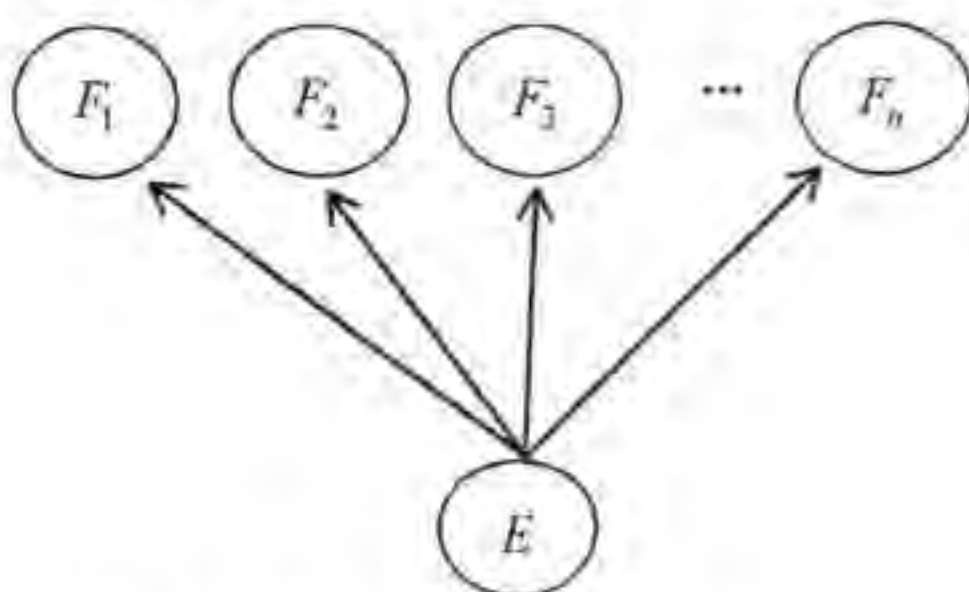


Рис. 1. Граф слабкого типу зв'язку

Слід зазначити, що поняття сильного та слабкого типу сутності відносні, якщо їх розглядати для окремих слабких типів зв'язку

(локальний розгляд). Так, один тип сутності в одному слабкому типі зв'язку може бути слабким типом сутності, а в іншому – сильним типом сутності.

Розглянемо введені поняття для моделі (глобальний розгляд). Як відомо, модель – це множина типів сутностей із заданими на них типами зв'язків.

Всі типи зв'язку моделі розбиваються на слабкі типи зв'язку та сильні типи зв'язку. Як зазначалося вище, слабкі типи зв'язку призначені для введення слабких типів сутностей.

*Слабкий тип сутності в моделі* – це такий тип сутності, який вводиться за допомогою деякого слабкого типу зв'язку моделі.

Зауважимо, що слабкий тип сутності може входити в єдиний слабкий тип зв'язку, який його вводить (і належить моделі).

*Сильний тип сутності в моделі* – це такий тип сутності, який не є слабким типом сутності в моделі.

Розглянемо модель по слабким типам зв'язків, тобто модель, яка складається з всіх типів сутностей моделі і слабких типів зв'язків, які вводять відповідні слабкі типи сутностей. Вище була показана графова інтерпретація слабкого типу зв'язку локально (тобто для окремо взятого слабкого типу сутності, відповідних сильних типів сутностей та слабкого типу зв'язку, що вводить слабкий тип сутності). Аналогічно можна зобразити і модель по слабким типам зв'язків (рис. 2), яка отримується шляхом об'єднання графів слабких типів зв'язку моделі та ізолюваних вершин, які інтерпретують сильні типи сутностей в моделі, які не є учасниками слабких типів зв'язків даної моделі.

Аналізуючи даний орієнтований граф моделі, можна виділити такі його особливості:

- множина вершин графа включає всі типи сутностей моделі;
- множина дуг складається з множини пар вершин, де початком дуги буде вершина, що відповідає слабкому типу сутності, а кінцем дуги – вершина, що відповідає сильному типу сутності у слабкому типі зв'язку, який вводить слабкий тип сутності;
- вершина, яка відповідає сильному типу сутності в моделі, або ізолювана (тобто ступінь вершини дорівнює 0), або тупикова (тобто їй інцидентні тільки вхідні дуги);
- вершина, яка відповідає слабкому типу сутності в моделі, інцидентна вихідним дугам, що з'єднують її з відповідними вершинами типів сутностей, від яких



залежить існування даного слабкого типу сутності.

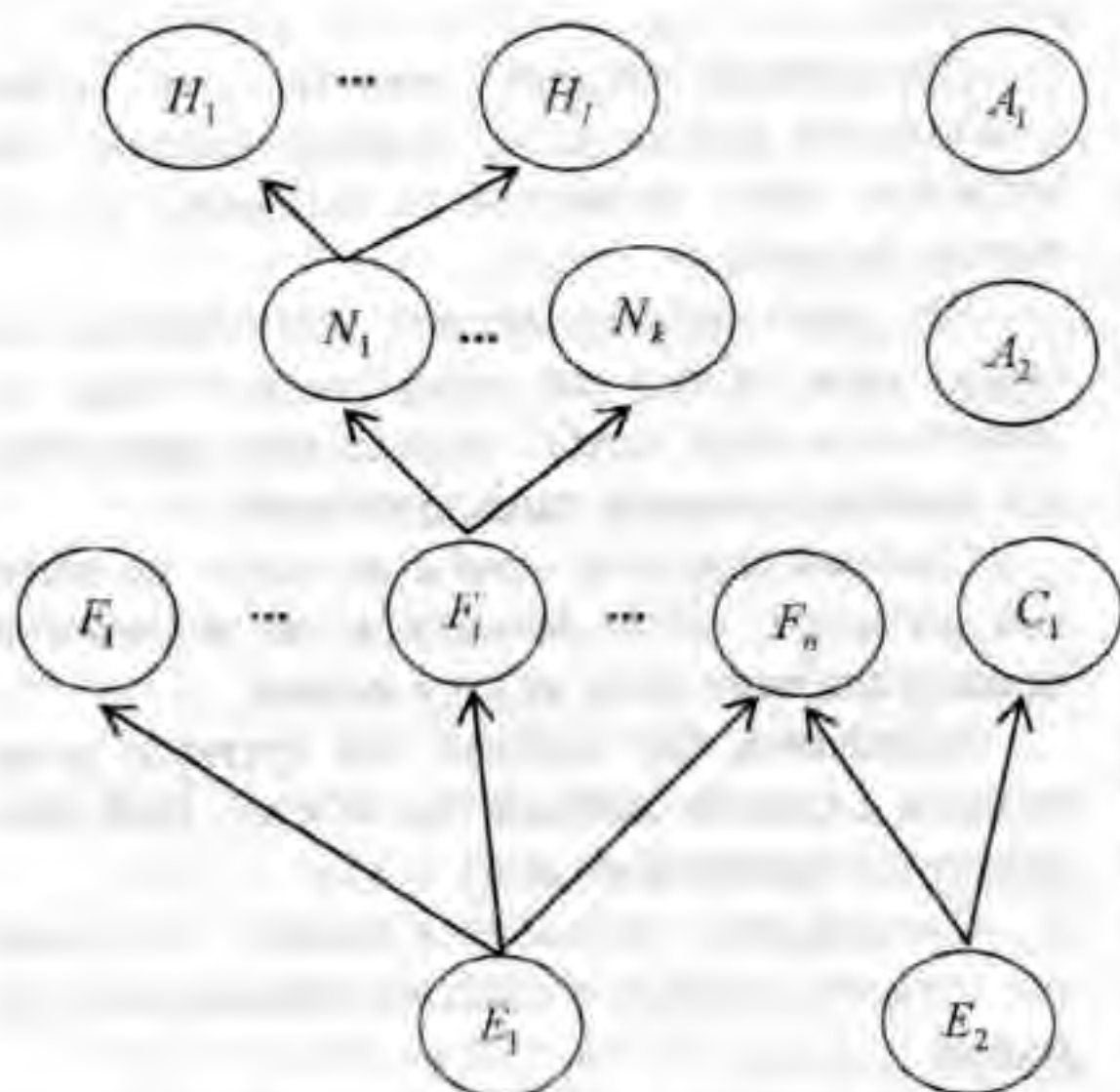


Рис. 2. Граф моделі по слабким типам зв'язків

При побудові моделі бази даних, спочатку проектувальники визначають типи сутностей та типи зв'язків. Для того, щоб перевірити, як побудовані слабкі і сильні типи сутностей та відповідні слабкі типи зв'язків, зображають відповідну модель по слабким типам зв'язків.

Дана модель буде коректно побудована (назвемо її *W-коректною* від англ. weak – слабкий), якщо виконуються наступні умови:

– для будь-якого слабкого типу сутності в моделі існує єдиний слабкий тип зв'язку, який його вводить;

– модель по слабким сутностям можна представити за допомогою ациклічного, орієнтованого графа.

Уточнимо вимоги до коректності фіксованої моделі в термінах часткового порядку. Для цього розглянемо множину  $M$  всіх типів сутностей цієї моделі. На цій множині задамо бінарне відношення  $<$ :

$E_1 < E_2 \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow}$  існує слабкий тип зв'язку моделі, який вводить слабкий тип сутності  $E_1$ , причому тип сутності  $E_2$  приймає участь у цьому типу зв'язку та відмінний від  $E_1$ .

Рефлексивно-транзитивне замикання відношення  $<$  на множині  $M$  позначимо через  $\leq^*$  (тобто  $\leq^* = \bigcup_{i=0,1,2,\dots} <^i$ , де  $<^0 \stackrel{\text{def}}{=} \Delta_M$  – діагональ

на множині  $M$ ,  $<^{i+1} \stackrel{\text{def}}{=} < \circ <^i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\circ$  – композиція бінарних відношень).

У графі моделі по слабким типам зв'язків (рис. 2) кожна дуга відповідає парам бінарного відношення  $<$ .

**Твердження.** Модель є *W-коректною* тоді і тільки тоді, коли відношення  $\leq^*$  є частковим порядком. Тип сутності є сильним типом сутності в моделі тоді і тільки тоді, коли цей тип є максимальним елементом частково впорядкованої множини  $M$ . Тип сутності є слабким типом сутності в моделі тоді і тільки тоді, коли цей тип не є максимальним елементом частково впорядкованої множини  $M$ .  $\square$

Доведення першого та другого тверджень впливають безпосередньо з означень, третє твердження випливає з другого.  $\square$

### Діаграма сутностей та зв'язків

ER-проект складається з документації до проекту, в якій відображені основні об'єкти та їх властивості, і схеми бази даних (графічного зображення).

Схема бази даних в ER-моделі – це графічне представлення сукупності типів сутностей з визначеною для кожного з них скінченною непорожньою множиною атрибутів і сукупності типів зв'язків, для кожного з яких визначена скінченна (можливо, порожня) множина атрибутів.

Дану схему ще називають *діаграмою сутностей та зв'язків* (entity-relationship diagram) або *ER-діаграмою* (ER-diagram). Такі діаграми стандартизовані, але не надто жорстко; існує декілька систем позначень, наприклад, позначення Чена [9, част. VIII, додаток Д], система позначень з використанням значка „воронья лапка” [9, част. VIII, додаток Д] та система позначень UML [10, гл. 3].

Розглянемо систему позначень Чена. Для задання приналежності елемента до визначеного виду використовується спеціальна геометрична фігура:

- прямокутник – для типу сутності;
- еліпс – для атрибута;
- ромб – для типу зв'язку.

Імена атрибутів, типів сутностей та типів зв'язків вказують всередині відповідних геометричних фігур.

Якщо тип сутності є слабким типом сутності, його прийнято зображати у вигляді подвійного прямокутника.

Сильний тип зв'язку позначається ромбом, а слабкий тип зв'язку – ромбом з подвійним контуром. Для представлення типів зв'язків між



типами сутностей використовуються лінії, які з'єднують відповідні типи сутностей. Вид типу зв'язку позначається над лініями у вигляді відповідних написів біля типів сутностей. Наприклад, якщо це вид бінарного зв'язку "один до багатьох", то роблять надписи 1 та М біля відповідних типів сутностей.

Учасники типу зв'язку з повною участю з'єднуються із знаком типу зв'язку подвійною лінією, а учасники типу зв'язку з частковою участю – одинарною лінією. Можна позначати структурні обмеження, які накладаються на тип зв'язку, у вигляді написів (max, min) над лініями з'єднання біля відповідних типів сутностей.

Лінії, які з'єднують тип зв'язку з типами сутностей, можна позначати текстовими мітками, що описують визначені ролі відповідних типів сутностей. Також будь-які пояснення до елементів моделі можна робити у вигляді текстових написів.

#### Висновки

Розробка моделей даних у рамках моделі "сутність-зв'язок" значно спростилась в останні роки, оскільки тепер інструменти для побудови ER-діаграм входять в склад багатьох популярних CASE-засобів. До таких продуктів відносяться, наприклад, ERWin [11, 12], Rational Rose [13, 14] та CASE Studio [15]. ER-діаграми, створені за допомогою CASE-засобів, зазвичай мають більш гарний вид, і їх простіше змінювати та адаптувати. Дані засоби використовують різні нотації для створення ER-діаграм, деякі з нотацій з'явилися саме завдяки CASE-засобам.

Основне завдання подальшої роботи – розгляд та формалізація розширеної моделі "сутність-зв'язок".

#### Список використаних джерел

1. Буй Д.Б., Сильвейструк Л.М. Модель "сутність-зв'язок": формалізація сутностей та зв'язків // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2006. – Вип. 3. – С. 143-152.
2. Буй Д., Сильвейструк Л. Формализация структурных ограничений в модели "сущность-связь" // Proceedings of the XII-th International Conference "Knowledge-Dialogue-Solution" (June 20-25, 2006, Varna, Bulgaria). – Sofia. – 2006. – P. 223-229.
3. Buy D., Silvestruk L. Formalization of structural constraints of relationships in model „entity-relationship” // Proceedings of

the Seventh International Scientific Conference "Electronic Computers and Informatics'2006" (September 20-22, 2006, Kosice – Herlany, Slovakia). – Kosice. – 2006. – P. 96-101.

4. Буй Д.Б., Сильвейструк Л.Н. Формализация структурных ограничений связей в модели „сущность-связь” // Труды IX международной конференции "Интеллектуальные системы и компьютерные науки", Москва, МГУ, 23-27 октября 2006 г. – Москва: МГУ. – 2006. – Т. 1.
5. Редько В.Н., Брона Ю.Й., Буй Д.Б., Поляков С.А. Реляційні бази даних: табличні алгебри та SQL-подібні мови. – Київ: Видавничий дім "Академперіодика". 2001. – 198 с.
6. Чен П. Модель "сущность-связь" – шаг к единому представлению о данных // Системы управления базами данных. – 1995. – № 3.  
<http://www.osp.ru/dbms/1995/03/271.htm>.
7. Гарсиа-Молина Г., Ульман Дж., Уидом Дж. Системы баз данных. Полный курс.: пер. с англ. – Москва: Издательский дом "Вильямс", 2004. – 1088 с.
8. Коннолли Т., Бегг К., Страчан А. Базы данных: проектирование, реализация и сопровождение. Теория и практика, 2-е изд. – Москва: Издательский дом "Вильямс", 2000. – 1120 с.
9. Коннолли Т., Бегг К., Страчан А. Базы данных: проектирование, реализация и сопровождение. Теория и практика, 3-е изд. – Москва: Издательский дом "Вильямс", 2003. – 1440 с.
10. Крёнке Д. Теория и практика построения баз данных, 8-е изд. – Санкт-Петербург: "Питер", 2003. – 800 с.
11. Маклаков С.В. BPwin и ERwin, CASE-средства разработки информационных систем. – Москва: "ДИАЛОГ-МИФИ", 1999. – 256 с.
12. Маклаков С.В. Создание информационных систем с AllFusion Modeling Suite. – Москва: "ДИАЛОГ-МИФИ", 2005. – 432 с.
13. [www.interface.ru/rational/rasdiag.htm](http://www.interface.ru/rational/rasdiag.htm)
14. [www.interface.ru/rational/oocase.htm](http://www.interface.ru/rational/oocase.htm)
15. [www.casestudio.com](http://www.casestudio.com)

Надійшла до редакції 21.03.2007



УДК 519.21, 519.713

Бичков<sup>1</sup> О.С. к.ф.-м.н., доцент  
Колесніков К.С.

## Побудова (PN)-моделі теорії можливостей

Обґрунтовано необхідність введення нової моделі теорії можливостей. Наводяться нові означення. Доводяться фундаментальні леми та теореми.

Ключові слова: міра необхідностей, міра можливостей, продовження мір.

### Вступ.

Теоретико-ймовірнісні методи [1] широко й успішно застосовуються в наукових дослідженнях для моделювання, в термінах випадковості, багатьох аспектів невизначеності та нечіткості, що відображають неповноту знань, або їх недостовірність. Але теоретико-ймовірнісні методи виявились неефективними при моделюванні широкого класу процесів та явищ, в яких вирішальну роль відіграють саме невизначеність та нечіткість. Мова йде про моделювання складних фізичних, соціальних та економічних систем, суб'єктивних суджень, тощо. Цим пояснюється підвищений інтерес до неймовірнісних методів, який характерний для 60-70 років.

Широко відомі суб'єктивна ймовірність Севіджа, як міра невпевненості суб'єкта, судження якого задовольняють певних умовам раціональності; верхні та нижні ймовірності Демпстера, що характеризують неповноту спостережень і відображають невизначеність в теорії ймовірностей, яка моделюється багатозначними відображеннями; і нарешті, можливість Заде, що базується на його теорії нечітких множин. Це далеко неповний перелік робіт, орієнтованих на моделювання нечіткості та невизначеності не ймовірнісними методами.

Вперше поняття можливості було введено математиком Сугено М. в 1974 році. Потім це поняття вдосконалювалось в роботах Дюбуа Д., Прада А. та отримало логічне завершення в роботах Питьєва Ю.А. Питаннями побудови моделі теорії можливостей займалися автори [2-

Bychkov A.S. cand.phys.-math., docent  
Kirill Kolesnikov

## A (PN)-model of theory of possibility constructing

We ground the necessity to introduce a new model of theory of possibility. New definitions are presented. Fundamental theorems and lemmas are proved.

Key Words: measure of necessity, measure of possibility, continuation of measures.

\*E-mail: bychkovtk@gmail.com

4] та ін. Загальноприйнятим та достатнім вважається використання міри можливостей для опису простору можливостей, а міра необхідностей вводиться лише як допоміжна для опису подій.

В цій статті побудова теорії чітко слідує схемі теорії ймовірностей, що дозволяє прослідкувати формальні аналогії та відмінності понять та методів теорії ймовірності та теорії можливостей. Але найбільш суттєвою відмінністю теорій є те, що трактування фізичного змісту події, що описується в термінах можливостей, суттєво відрізняється від частотної інтерпретації в термінах ймовірностей. Це дозволяє моделювати та досліджувати набагато ширший клас задач, ніж можна було б зробити за допомогою методів теорії ймовірностей.

Відомо [1], що в теорії ймовірностей можливо охарактеризувати подію та протилежну їй подію за допомогою лише однієї міри – ймовірнісної. Це впливає із співвідношення  $P(A) = 1 - P(\bar{A})$ . В теорії можливостей для взаємопротилежних подій в загальному випадку виконується нерівність  $P(A) + P(\bar{A}) \geq 1$ .

Досліджуючи проблематику пов'язану з моделюванням суб'єктивності виявилось, що самої можливості недостатньо для повного та адекватного опису експерименту. Тому було запропоновано розширити простір можливостей шляхом введення іншої характеристики події – необхідності. Це дозволило нам більш коректно структурувати наші знання про досліджувані явища.



Тому для адекватної побудови моделі експерименту необхідно застосовувати обидві міри – міру необхідностей та можливостей.

### Мета.

В цій роботі пропонується використовувати крім міри можливості, ще й міру необхідності. Метою є математичне обґрунтування такої побудови моделі простору можливостей.

### Основний результат.

**Означення 1.** [3] Суб'єктивною шкалою  $L = ([0, 1], \leq, +, \circ)$  будемо називати відрізок  $[0, 1]$  з впорядкованістю, яка визначається класичною нерівністю  $\leq$ , операцією суми "+" та операцією добутку " $\circ$ ".

**Означення 2.** [2,3] Сумою двох елементів  $a$  і  $b$  з  $L$  будемо називати функцію максимуму цих елементів, тобто  $a + b = \max(a, b)$ .

**Означення 3.** [2,3] Добутком двох елементів  $a$  і  $b$  з  $L$  будемо називати функцію мінімуму цих елементів, тобто  $a \circ b = \min(a, b)$ .

Природно у випадку злічених суми та добутку розглядати операції  $\max$  та  $\min$  як точна верхню та нижню грані відповідно.

Легко впевнитися, що введені таким чином операції задовольняють всім класичним властивостям, а саме вони є комутативними, асоціативними та взаємно дистрибутивними:

1.  $a + b = b + a$ ,  $a \circ b = b \circ a$ ;
2.  $(a + b) + c = a + (b + c)$ ,  $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$ ;
3.  $a \circ (b + c) = \min(a, \max(b, c)) = \max(\min(a, b), \min(a, c)) = (a \circ b) + (a \circ c)$ ;
4.  $a + (b \circ c) = \max(a, \min(b, c)) = \min(\max(a, b), \max(a, c)) = (a + b) \circ (a + c)$

Визначимо нейтральні елементи  $\tilde{0}$  та  $\tilde{1}$ , поклавши  $\tilde{0} = 0$  та  $\tilde{1} = 1$ . При цьому:

$$\begin{aligned} 0 \circ a &= \min(0, a) = 0 = \tilde{0}, & 1 \circ a &= \min(1, a) = a, \\ \tilde{0} + a &= \max(0, a) = a, & \tilde{1} + a &= \max(a, 1) = \tilde{1}, \end{aligned} \quad \text{де } a \in [0, 1].$$

Впорядкованість на  $L$  узгоджена з операціями додавання та множення:

$$a \leq b \Rightarrow \begin{cases} a \circ b \leq b \circ c, \\ a + c \leq b + c, \end{cases} \quad a, b, c \in L; \quad \tilde{0} < \tilde{1}.$$

**Означення 4.** [3] Послідовність  $\{a_n\} \subset L$  називається збіжною, якщо

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} a_n = \sup_N \inf_{n \geq N} a_n = \inf_N \sup_{n \geq N} a_n = \limsup_{n \rightarrow \infty} a_n = a$$

число  $a$  називається границею послідовності,  $a = \lim_{n \rightarrow \infty} a_n$ .

Розглянемо далі деякий простір  $X$ . Будь-яку підмножину  $A \subseteq X$  — сукупність елементів з  $X$  — будемо називати подією. Разом з простором  $X$  розглянемо також алгебру подій  $\Lambda$ . Природним чином виникає питання про кількісний опис подій. Введемо оцінку — можливість, — аксіоматичні властивості якої є цілком зрозумілими. А саме, якщо події  $A$  та  $B$  з'являються з деякими значеннями можливостей, то подія, яка полягає в тому, що з'явиться або  $A$ , або  $B$ , буде мати найбільшу з можливостей  $A$  та  $B$ . Конкретизуючи, кожній множині  $A \in \Lambda$  поставимо у відповідність деяке число  $P(A) \geq 0$ ,  $P(A) \in L$ .

**Означення 5.** Функцію  $P: \Lambda \rightarrow L$  будемо називати мірою можливості, якщо:

1.  $P(A) \geq 0$  для  $\forall A \in \Lambda$ ;
2.  $P(A)$  — зліченно-адитивна, тобто для

$\forall \{A_i\}_{i=1}^{\infty}, A_i \in \Lambda$  такої, що  $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \Lambda$  виконується:

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i) = \sup_{i=1, \infty} P(A_i).$$

Відмітимо, що на відміну від класичної теорії міри, умова зліченної адитивності не накладає обмежень на множини  $\{A_i\}_{i=1}^{\infty}, A_i \in \Lambda$ , а в теорії можливостей не є необхідною умова  $A_i \cap A_j = \emptyset, i \neq j$ . Відсутність цієї умови в теорії можливостей не є суттєвим доповненням або відмінністю від класичної теорії міри. Можна показати, що властивість 2, яка введена тільки для множин, що не перетинаються, може бути легко поширена на будь-які множини.

Виділимо найпростіші властивості міри можливості.

**Лема 1.** Якщо  $A, B \in \Lambda$ ,  $A \subseteq B$ , то  $P(A) \leq P(B)$ .

**Доведення.** Дійсно, оскільки  $B = A \cup (B \setminus A)$ , то  $P(B) = P(A \cup (B \setminus A)) = \max\{P(A), P(B \setminus A)\}$ , звідки випливає, що  $P(A) \leq P(B)$ .

**Лема 2.** (Неперервність відносно монотонно зростаючої послідовності)

Нехай задано  $\{A_n\}_{n=1}^{\infty}, A_n \in \Lambda$  і  $A_n \subseteq A_{n+1}$ ,

причому  $\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \Lambda$ . Тоді  $P(\lim_{n \rightarrow \infty} A_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(A_n)$ .

**Доведення.** Дійсно, оскільки



$$\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = \sup_{n \geq 1} A_n = \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n,$$

$$\text{то } P\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_n\right) = \sup_{n \geq 1} P(A_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(A_n). \quad \text{Остання}$$

рівність випливає з властивості монотонності можливості.

**Лема 3.** (Напівнеперервність знизу відносно монотонно спадної послідовності)

Нехай задано  $\{A_i\}_{i=1}^{\infty}, A_i \in \Lambda, A_{i+1} \subset A_i$ , і

$$\bigcap_{i=1}^{\infty} A_i \in \Lambda, \text{ тоді } P\left(\lim_{n \rightarrow \infty} A_n\right) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} P(A_n).$$

**Доведення.** Дійсно, з властивості монотонності випливає, що  $\forall k \geq N$   
 $P(A_k) \geq P(\inf_{n \geq N} A_n), N \geq 1$ . Звідки випливає, що

$$\inf_{k \geq N} P(A_k) \geq P(\inf_{n \geq N} A_n). \text{ Тоді}$$

$$\begin{aligned} \sup_N P(\inf_{n \geq N} A_n) &= P(\sup_N \inf_{n \geq N} A_n) = \\ &= P(\liminf_{n \rightarrow \infty} A_n) \leq \sup_N \inf_{n \geq N} P(A_n) = \\ &= \liminf_{n \rightarrow \infty} P(A_n). \end{aligned}$$

причому  $P(\liminf_{n \rightarrow \infty} A_n) = P(\lim_{n \rightarrow \infty} A_n)$ . Отже маємо, що  $P(\lim_{n \rightarrow \infty} A_n) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} P(A_n)$ .

Властивість напівнеперервності можливості означає, що для довільної послідовності  $\{A_i\}_{i=1}^{\infty}, A_i \in \Lambda$ , такої, що  $\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$ , ми не можемо в загальному випадку говорити, що  $\lim_{i \rightarrow \infty} P(A_i) = P(A)$ . З практичної точки зору для спадної послідовності множин ми не можемо визначити можливість появи граничної множини, маючи можливості елементів послідовності. А саме, наприклад, неможливо визначити значення  $P(\emptyset)$  по неперервності, оскільки  $P(A)$  не неперервна при  $A = \emptyset$ .

Дійсно, нехай послідовність  $\forall \{A_i\}_{i=1}^{\infty}, A_i \in \Lambda$  така, що  $\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = \emptyset, A_{n+1} \subset A_n$  (послідовність абсолютно спадна). Тоді

$$P(\emptyset) = P(\lim_{n \rightarrow \infty} A_n) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} P(A_n). \quad \text{Таким}$$

чином визначимо  $P(\emptyset)$  як довільне число з відрізка  $[0, \inf_{A \in \Lambda} P(A)]$ . При цьому

$P(A \cup \emptyset) = P(A), P(A \cap \emptyset) = \emptyset, \forall A \in \Lambda$ . Надалі будемо вважати, якщо це не обговорюється спеціально, що  $P(\emptyset) = 0$ .

Нехай  $X$  - довільний простір,  $\Lambda$  - визначена на просторі  $X$  алгебра множин, а  $P(\cdot)$  - можливість на  $\Lambda$ . Природним є питання продовження міри на більш широкий клас множин. Для цього введемо поняття зовнішньої міри.

Отже, алгебра в класичному її розумінні разом із мірою є тими об'єктами, які ми знаємо напевно та можемо їх між собою порівнювати. Природним є бажання дослідити всі можливі події, які можуть трапитися. Але не кожному з них можна описати в термінах нашої бази знань. Тому постає питання продовження цієї міри на всі досліджувані події.

**Означення 6.** Функцію  $P^*(\cdot): \beta(X) \rightarrow L$ , яка задається наступним чином:

$$P^*(B) = \inf_{\{E_j\} \in \mathcal{A}} \sup_j P(E_j), \quad (1)$$

де  $\{E_i\}_{i=1}^{\infty}, E_i \in \Lambda$  такі, що  $B \subset \bigcup_{j=1}^{\infty} E_j$ , будемо називати зовнішньою мірою можливості.

Таке покриття завжди існує. Дійсно, поклавши  $E_1 = X, E_2 = E_3 = \dots = \emptyset$ , отримаємо що будь-яка множина  $A$  з  $X$  покриваються  $\bigcup_{j=1}^{\infty} E_j = X$ .

**Лема 4.** Для довільної множини  $A \in \Lambda$  зовнішня міра можливості дорівнює мірі можливості цієї множини, тобто  $P^*(A) = P(A)$ .

**Доведення.** Виберемо послідовність  $\{E_i\}_{i=1}^{\infty}, E_i \in \Lambda$  таким чином, що  $E_1 = A,$

$E_2 = E_3 = \dots = \emptyset$ . Отримаємо, що  $A \subset \bigcup_{j=1}^{\infty} E_j$ , і

відповідно,  $\inf_{\{E_i\}} \sup_j P(E_j) \leq P(A)$ . Тобто

$$P^*(A) \leq P(A).$$

За визначенням точної нижньої межі для  $\forall \varepsilon > 0, \exists \{E_i\}_{i=1}^{\infty}, E_i \in \Lambda$ , маємо що

$$\sup_j P(E_j) = P\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} E_j\right) < P^*(A) + \varepsilon.$$

Оскільки  $A = A \cap \left(\bigcup_{j=1}^{\infty} E_j\right) = \bigcup_{j=1}^{\infty} (A \cap E_j)$ , то

$$\begin{aligned} P(A) &= P\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} (A \cap E_j)\right) = \sum_{j=1}^{\infty} P(A \cap E_j) = \\ &= \sup_{j=1, \infty} P(A \cap E_j) \leq \sup_{j=1, \infty} P(E_j), \text{ при } A \in \Lambda. \end{aligned}$$



Звідси випливає, що  $P(A) < P^*(A) + \varepsilon$ . Але при  $\varepsilon \rightarrow 0$  матимемо знак нестрогої нерівності, тобто  $P(A) \leq P^*(A)$ . А отже,  $P(A) = P^*(A)$ .

**Лема 5.** Зовнішня можливість є невід'ємною функцією множин, тобто  $P^*(A) \geq 0$  для  $\forall A \subset X$ .

Доведення випливає з невід'ємності самої міри можливості.

**Лема 6.** Зовнішня міра можливості  $P^*(\cdot)$  - монотонна, тобто для  $\forall A, B \subset X$ , таких що  $A \subset B$  матимемо  $P^*(A) \leq P^*(B)$ .

*Доведення.* Нехай  $\{E_j\}_{j=1}^\infty, E_j \in \mathcal{A}$  послідовність, яка надає інфімум в рівності  $P^*(B) = \inf_{\{E_j\}} \sup_j P(E_j)$ . Але тоді  $A \subset B \subset \bigcup_{j=1}^\infty E_j$ ,

звідки випливає, що  $P^*(A) \leq P^*(B)$ .

**Теорема 1.** (Про продовження міри можливості) Зовнішня міра  $P^*$ , яка визначена на булеані  $\mathcal{B}(X)$ , є мірою можливості.

*Доведення.* Невід'ємність зовнішньої міри випливає з означення. Доведемо адитивність, тобто  $P^*(A \cup B) = P^*(A) + P^*(B)$ , для  $\forall A, B \in X$ . З однієї сторони, з властивості монотонності міри випливає, що

$$P^*(A \cup B) \geq P^*(A), P^*(A \cup B) \geq P^*(B)$$

і, відповідно,

$$P^*(A \cup B) \geq \max(P^*(A), P^*(B)) = P^*(A) + P^*(B).$$

Доведемо протилежну нерівність. Позначимо

$$O_A = \{\{E_j\} : E_j \in \mathcal{A}, A \subseteq \bigcup_{j=1}^\infty E_j\},$$

$$O_B = \{\{E_j\} : E_j \in \mathcal{A}, B \subseteq \bigcup_{j=1}^\infty E_j\},$$

$$O_{A \cup B} = \{\{L_j\} : L_j \in \mathcal{A}, A \cup B \subseteq \bigcup_{j=1}^\infty L_j\}.$$

Нехай  $\{E_j\} \in O_A$ ,  $\{F_k\} \in O_B$ . Тоді маємо, що  $\{E_j \cup F_k\} \in O_{A \cup B}$ . Звідси отримаємо

$$\begin{aligned} P^*(A \cup B) &= \inf_{\{L_n\} \in O_{A \cup B}} \sup_n P(L_n) \leq \sup_{j,k} P(E_j \cup F_k) = \\ &= \max\{\sup_j P(E_j), \sup_k P(F_k)\}. \end{aligned}$$

Тоді

$$P^*(A \cup B) \leq \inf_{\{E_j\} \in O_A} \inf_{\{F_k\} \in O_B} \max\{\sup_j P(E_j), \sup_k P(F_k)\}.$$

$$= \max\{\inf_{\{E_j\} \in O_A} \sup_j P(E_j), \inf_{\{F_k\} \in O_B} \sup_k P(F_k)\} =$$

$$= P^*(A) + P^*(B).$$

Тобто

$$P^*(A \cup B) \leq P^*(A) + P^*(B),$$

звідки випливає, що  $P^*(A \cup B) = P^*(A) + P^*(B)$ .

За індукцією можемо поширити цей результат для  $\forall N > 1$  і  $\forall A_i \subset X, i = \overline{1, N}$

$$P^*\left(\bigcup_{i=1}^N A_i\right) = \sum_{i=1}^N P^*(A_i) = \max_{j=\overline{1, N}} P^*(A_j).$$

Покажемо злічену адитивність. Тобто покажемо виконання рівності

$$P^*\left(\bigcup_{i=1}^\infty A_i\right) = \sup_i P^*(A_i).$$

Спочатку доведемо виконання нерівності

$$P^*\left(\bigcup_{i=1}^\infty A_i\right) \leq \sup_{i=\overline{1, \infty}} P^*(A_i).$$

Для множини  $\bigcup_{j=1}^\infty A_j$  маємо

$$P^*\left(\bigcup_{j=1}^\infty A_j\right) = \inf_{\{E_j\}} \sup_{j=\overline{1, \infty}} P(E_j).$$

Відповідно, для кожної із множин  $A_j$  виконується

$$P^*(A_j) = \inf_{\{E_{jk}\} \in O_{A_j}} \sup_{k=\overline{1, \infty}} P(E_{jk}). \quad (2)$$

Набір множин  $\{E_{jk}\}_{j=\overline{1, \infty}, k=\overline{1, \infty}}$  є одним із зовнішніх покриттів множини  $\bigcup_{j=1}^\infty A_j$ . Через

те, що нижня грань множини не більше будь-якого його члена, то виконується така нерівність:

$$\begin{aligned} P^*\left(\bigcup_{j=1}^\infty A_j\right) &= \inf_{\{E_j\}} \sup_{j=\overline{1, \infty}} P(E_j) \leq \\ &\leq \sup_{\substack{j=\overline{1, \infty} \\ k=\overline{1, \infty}}} P(E_{jk}) = \sup_{j=\overline{1, \infty}} \sup_{k=\overline{1, \infty}} P(E_{jk}). \end{aligned} \quad (3)$$

З (2) випливає, що для кожного  $j = \overline{1, \infty}$  можна підібрати таке зовнішнє покриття  $\{E_{jk}\}_{k=\overline{1, \infty}}$ , що  $P^*(A_j) \geq \sup_{k=\overline{1, \infty}} P(E_{jk}) - \varepsilon$ .

Підставивши цей вираз в (3), одержуємо, що

$$P^*\left(\bigcup_{j=1}^\infty A_j\right) \leq \inf_{j=\overline{1, \infty}} P^*(A_j) + \varepsilon.$$



є може бути як завгодно малим додатним числом, одержуємо, що

$$P^*\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) \leq \inf_{j=1, \infty} P^*(A_j).$$

Доведемо тепер нерівність

$$P^*\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) \geq \sup_{j=1, \infty} P^*(A_j).$$

Через те, що  $A_j$  входить в  $\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j$ , тобто

виконується  $\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j \supseteq A_j$ , з монотонності

зовнішньої можливості випливає, що

$$P^*\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) \geq P^*(A_j).$$

Звідси отримаємо нерівність

$$P^*\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) \geq \sup_{j=1, \infty} P^*(A_j).$$

Таким чином,  $P^*\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = P^*(A_j)$ . Маємо що

$P^*(\cdot)$  - злічена адитивна та невід'ємна функція.

Отже  $P^*(\cdot)$ , за означенням, міра можливості, що і доводить теорему.

Нехай задано простір  $X = \{1, 2, 3\}$ , алгебра  $A = (\{1, 2\}, \{3\}, \{1, 2, 3\}, \emptyset)$ . Введемо міру

можливості  $P(\cdot)$ , вкладаючи в неї фізичний зміст такий, що в множині принаймні два елементи.

Тоді,  $P(\{1, 2\}) = P(\{1, 2, 3\}) = 1$ ,  $P(\{3\}) = P(\emptyset) = 0$ .

Побудуємо зовнішню міру для множини  $\{1\}$ :

$$P(\{1\}) = \inf_{E_j} \sup P(E_j) = P(\{1, 2\}) = 1. \text{ Маємо, що}$$

при продовженні міри ми для одноелементної множини, отримали що в ній принаймні два елементи.

Таким чином, продовжуючи міру ми отримуємо лише верхню оцінку, яка формально задовольняє властивостям міри.

Властивості можливості та розглянутий приклад ясно виражають думку, що введення лише цього варіанта міри в просторі подій недостатньо для адекватного та якісного опису моделей. Отже, існує потреба введення нижньої оцінки міри, фізична суть якої в тому, що деяка подія мусить відбутися.

При чому, міра того, що цей факт відбудеться напевно, не може бути меншою деякого числа. І цілком природно, що ця нова міра може бути введена на тій же шкалі  $L = ([0, 1], \leq, +, \circ)$ , що й можливість, якщо ми

намагаємось описати подію двома величинами, які мають бути якимось чином пов'язані.

Означення 7. Мірою необхідності називатимемо функцію  $N: A \rightarrow L$ , яка задовольняє таким умовам:

1.  $N(A) \geq 0$  для  $\forall A \in A$ ;

2.  $N(A)$  - злічена мультиплікативна, тобто

для  $\forall \{A_i\} \in A$  такої, що  $\bigcap_{i=1}^{\infty} A_i \in A$  виконується:

$$N\left(\bigcap_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \inf_{i=1, \infty} N(A_i).$$

Суть умов, які накладаються на функцію  $N(\cdot)$  можна інтерпретувати наступним чином: для двох подій, які відбудуться з деякими значеннями необхідностей, сумісна подія відбудеться з найменшою (мінімальною) необхідністю. Тут вже виникає певна дуальність з поняттям можливості.

Необхідність задовольняє всім тим умовам та має всі ті властивості, яких не має можливість. Таким чином, можливість і необхідність логічно розглядати в парі, оскільки разом їхні переваги збалансовуються, що дає змогу описувати коректно не тільки події, а й будь-які злічені операції над ними.

#### Висновки.

Отже, будемо розглядати модель  $(X, A, P, N)$  простору можливостей з двома мірами, яку називатимемо  $(PN)$ - моделлю, вважаючи її адекватною до опису поставлених на початку роботи питань.

Ввівши міри можливості і необхідності ми отримали апарат, який дозволяє знаходити значення цих мір для будь-якої кількості подій, та адекватно описувати експеримент.

#### Список використаних джерел

1. Колмогоров А.Н. Основные понятия теории вероятностей, М, Серия «Теория вероятностей и математическая статистика», 1974 — 120с.
2. Дюбуа Д., Прад А. Теория возможностей. Приложения к представлению знаний в информатике. — М.: Радио и связь, 1990 — 288с.
3. Пытьев Ю.П. Возможность. Элементы теории и применение, — М, УРСС, 1990, — 190с.
4. Zadeh L.A. Fuzzy sets as a basis for a theory of possibility // Fuzzy Sets and Systems, 1, 1978, p.3-28.

Надійшла до редакції 15.06.2006



УДК 519.87 : 519.852.33

Гаращенко Ф.Г.\*, Клименко В.Г.

### Оптимальний вибір пунктів доставки однорідного товару з обмеженнями на пропускну спроможність

Приведено алгоритми вибору пунктів доставки  
однорідного товару з мінімальними транспорт-  
ними витратами та обмеженнями на пропускну  
спроможність.

Ключові слова: транспортна задача,  
оптимізація транспортних затрат, інформаційно-  
аналітична система.

\*E-mail: garash@unicyb.kiev.ua

**Вступ.** На даний час для предметно-орієнтованих задач транспортного типу актуальною є проблема розробки ефективних методів їх розв'язування [1-6]. Велика кількість методів, з допомогою яких розв'язуються такі задачі, базується на ітераційних принципах. Щоб отримати оптимальний розв'язок необхідно, як правило, провести досить велику кількість ітерацій, причому існує проблема зациклення такої процедури. Отже, для предметно-орієнтованих транспортних задач актуальною є проблема розробки більш ефективних методів їх розв'язування [7-10].

В цій статті приводиться алгоритм вибору оптимальних  $k$  з  $n$  можливих пунктів доставки ( $k < n$ ) однорідного товару таким чином, щоб мінімізувати транспортні перевезення з місць їх знаходження та обмеженнями на пропускну спроможність. Такі задачі мають свою специфіку, причому це дало можливість побудувати більш ефективні алгоритми. Розроблене алгоритмічне та програмне забезпечення було використано при оптимальному виборі портів України, доставка необхідної кількості товару в які була б мінімальною. З прикладної точки зору цікавою є задача одночасного навантаження одного і того ж товару не більше ніж в двох портах. В подальшому

Fedir G. Garashchenko\*,  
Volodymyr G. Klymenko

### Optimal choice points delivery the same goods with limitation of pass suitability

Constructional algorithm for choice points delivery  
the same goods with minimum transport costs and  
limitation of pass suitability is described.

Keywords: transport problem, transport  
optimization, information analytical system.

припускаємо, що одночасно навантажуються один і той же товар не більш ніж в двох портах. Тому в роботі детально розглядаються випадки  $k=1,2$ . Але запропоновану методику можна перенести і на інші значення  $k$ . Більш того її можна використати для розв'язування транспортної задачі в самій загальній постановці. Велика увага зосереджується на розробці більш простих алгоритмів, які дають квазіоптимальний розв'язок задачі і можуть застосовуватися в реальному часі при оперативному прийнятті рішень.

**Постановка задачі.** Припустимо, що в пунктах  $E_i, i=1,2,\dots,m$  знаходиться деякий однорідний продукт, причому в пункті  $E_i$  виробляється  $a_i$  одиниць цього продукту. У пунктах  $P_j, j=1,2,\dots,n$  може споживатися ця продукція. Зафіксуємо  $k \leq n$ . Продукція може споживатися в пунктах  $\{P_{j_1}, P_{j_2}, \dots, P_{j_k}\}$  з фіксованими об'ємами  $b_{j_1}, b_{j_2}, \dots, b_{j_k}$ . Припускаємо, що

$$\sum_{i=1}^m a_i \geq \sum_{j=1}^n b_j.$$

Нехай  $c_{ij}$  – транспортні витрати на одиницю перевезення продукту з пункту виробництва  $E_i$  в пункт доставки  $P_j$ .



Задача полягає в знаходженні такої комбінації пунктів доставки  $\{P_{j_1}, P_{j_2}, \dots, P_{j_k}\}$ , щоб задовольнити потреби  $k$  споживачів з мінімальними сумарними транспортними витратами з обмеженнями на пропускну спроможність.

Формалізуємо постановку задачі. Нехай  $x_{ij}$  – невідома кількість продукту, яку необхідно перевезти з пункту  $E_i$  в пункт  $P_j$ ,  $M = C_n^k$  – число комбінацій з  $n$  елементів по  $k$ . Тоді наша задача полягає в знаходженні таких  $j_l^{(opt)}$ ,  $l = 1, \dots, k$  та відповідної матриці перевезень  $X^{(opt)} = \{x_{ij}^{(opt)}\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ ,  $l = 1, 2, \dots, k$ , які б мінімізували сумарні транспортні витрати

$$\sum_{i=1}^m \sum_{l=1}^k c_{ij_l} x_{ij_l} \quad (1)$$

при обмеженнях

$$\sum_{l=1}^k x_{ij_l} \leq a_i, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^m x_{ij_l} \leq b_j, \quad l = 1, 2, \dots, k, \quad (3)$$

$$0 \leq x_{ij} \leq \bar{x}_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (4)$$

Зрозуміло, що замість умови (4) можна розглянути наступну

$$0 \leq x_{ij_l} \leq \bar{x}_{ij_l}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad l = 1, 2, \dots, k. \quad (5)$$

Приведемо алгоритми розв'язку поставленої задачі для випадків  $k = 1, 2$ , які найбільш часто зустрічаються в реальних ситуаціях.

#### Випадок вибору одного пункту доставки з мінімальними транспортними витратами

( $k = 1$ ). Для даного випадку  $M = n$ . Для розв'язування такої задачі опишемо конструктивний алгоритм визначення тих пунктів знаходження однорідного товару, з яких би транспортні перевезення в  $j$ -ий пункт доставки були мінімальними. На першому кроці для розв'язування цієї задачі впорядкуємо числа

$$c_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, m;$$

$$0 < c_{i_1j} \leq c_{i_2j} \leq \dots \leq c_{i_mj}. \quad (6)$$

Використовуючи послідовність (6) знайдемо такий індекс  $i_s$ ,  $1 \leq s \leq m$ , для якого

$$\sum_{r=1}^{s-1} \bar{a}_{i_r} \leq b_j, \quad \sum_{r=1}^s \bar{a}_{i_r} > b_j. \quad (7)$$

$$\text{В формулі (7)} \quad \bar{a}_{i_r} = \begin{cases} a_{i_r}, & \text{якщо } a_{i_r} \leq \bar{x}_{i_rj} \\ \bar{x}_{i_rj}, & \text{якщо } a_{i_r} > \bar{x}_{i_rj} \end{cases}$$

Введемо різницю

$$\Delta x_{i_sj} = b_j - \sum_{r=1}^{s-1} a_{i_r}. \quad (8)$$

Припускаємо, що  $\Delta x_{i_sj} \leq \bar{x}_{i_sj}$ . Інакше в нашому алгоритмі здійснюємо одну ітерацію по  $s$ .

Очевидно що найкращим планом перевезення товару в  $j$ -ий пункт доставки буде такий: в пункт  $P_j$  необхідно доставити товар з пунктів  $E_{i_1}, E_{i_2}, \dots, E_{i_{s-1}}$ , а з  $E_{i_s}$  доставити всього  $\Delta x_{i_sj}$  товару. Зрозуміло, оскільки  $\Delta x_{i_sj} < a_{i_s}$ , то решту товару необхідно взяти з пункту  $E_{i_s}$ . При цьому без особливих труднощів ми можемо визначити залишки товару в пунктах  $E_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  після транспортних перевезень:  $a_{i_r} - \bar{a}_{i_r}$  в пунктах  $E_{i_r}$ ,  $r = 1, 2, \dots, s-1$ ;  $a_{i_s} - \Delta x_{i_sj}$  в пункті  $E_{i_s}$ . В останніх пунктах кількість товару залишиться без змін.

Таким чином, в пункт  $j$  можна доставити товар за найменшою ціною

$$Q_{\min}^{(j)} = \sum_{r=1}^{s-1} c_{i_rj} a_{i_r} + c_{i_sj} \Delta x_{i_sj}. \quad (9)$$

Причому з пунктів  $E_{i_1}, E_{i_2}, \dots, E_{i_{s-1}}$  перевозиться відповідно  $\bar{a}_{i_1}, \bar{a}_{i_2}, \dots, \bar{a}_{i_{s-1}}$  товару, а з  $E_{i_s}$  тільки така частина  $\Delta x_{i_sj}$ .

Це є алгоритм розв'язання поставленої задачі (1) при обмеженнях (2) – (4).

Для визначення найкращого пункту доставки  $P_{j^{(opt)}}$  необхідно індекс  $j^{(opt)}$  вибрати згідно співвідношення

$$j^{(opt)} = \arg \min_{j=1,2,\dots,n} Q_{\min}^{(j)}. \quad (10)$$

Задача (10) розв'язується шляхом знаходження індексу, який відповідає



найменшому елементу з  $n$  знайдених за формулою (9). Оскільки оптимальні плани перевезень відомі для будь-яких  $j=1,2,\dots,n$ , то поставлена задача про оптимальний вибір пункту доставки однорідного товару з мінімальними транспортними перевезеннями розв'язана. Це пункт доставки з індексом  $j^{(opt)}$ , якому відповідає матриця оптимальних перевезень:

$$X_{i,j^{(opt)}} = \bar{a}_i, r=1,2,\dots,s-1; X_{i,j^{(opt)}} = \Delta x_{i,j^{(opt)}}.$$

**Вибір двох пунктів доставки з мінімальними транспортними витратами ( $k=2$ ).** В цьому випадку

$$M = C_n^2 = \frac{n(n-1)}{2}. \text{ Зрозуміло, що з цих}$$

пунктів ми можемо виключити ті, які з різних причин для нас не підходять. Алгоритм розв'язування такої задачі буде базуватися на попередній ідеї. Для цього ми повинні описати схеми доставки в пункти

$$P_j, P_q, j=1,2,\dots,n, q=j+1, j+2,\dots,n$$

з мінімальними транспортними затратами  $Q_{\min}^{(j,q)}$ . Зрозуміло, що при цьому застосовувати описану вище методику треба обережно, бо можливі варіанти одночасної доставки товару з одного пункту як в  $P_j$  так і в  $P_q$ .

Для розв'язування цієї задачі треба впорядкувати числа  $c_{ij}$  та  $c_{iq}$ ,  $i=1,2,\dots,m$ :

$$0 < c_{i_1j} \leq c_{i_2j} \leq \dots \leq c_{i_{sj}}; \quad (11)$$

$$0 < c_{i_1q} \leq c_{i_2q} \leq \dots \leq c_{i_{\mu q}}. \quad (12)$$

Використаємо послідовності (11) та (12) для знаходження  $i_s$  та  $i_\mu$  таких, що

$$\sum_{r=1}^{s-1} \bar{a}_{i_r} \leq b_j, \sum_{r=1}^s \bar{a}_{i_r} > b_j. \quad (13)$$

$$\sum_{r=1}^{\mu-1} \bar{a}_{i_r} \leq b_q, \sum_{r=1}^{\mu} \bar{a}_{i_r} > b_q. \quad (14)$$

В формулах (13),(14) обчислення величин  $\bar{a}_i$  здійснюється вищеописаним способом.

По аналогії з (7) вводимо величини

$$\Delta x_{i,j} = b_j - \sum_{r=1}^{s-1} a_{i_r}, \Delta x_{i,q} = b_q - \sum_{r=1}^{\mu-1} a_{i_r}. \quad (15)$$

Тоді, якщо

$$\{i_1, i_2, \dots, i_s\} \cap \{i_1, i_2, \dots, i_\mu\} = \emptyset, \quad (16)$$

то мінімальна ціна перевезення в два пункти  $P_j$  та  $P_q$  буде обчислюватися за формулою

$$Q_{\min}^{(j,q)} = \sum_{r=1}^{s-1} c_{i_r,j} \bar{a}_{i_r} + c_{i_s,j} \Delta x_{i_s,j} + \sum_{r=1}^{\mu-1} c_{i_r,q} \bar{a}_{i_r} + c_{i_\mu,q} \Delta x_{i_\mu,q}. \quad (17)$$

При цьому товар з пунктів  $E_{i_1}, E_{i_2}, \dots, E_{i_{s-1}}$  та  $E_{i_1}, E_{i_2}, \dots, E_{i_{\mu-1}}$  перевозиться в об'ємі

$$\bar{a}_{i_r}, r=1,2,\dots,s-1, \bar{a}_{i_r}, r=1,2,\dots,m-1$$

відповідно, а з пунктів  $E_{i_s}$  та  $E_{i_\mu}$  тільки такі частини  $\Delta x_{i_s,j}$  та  $\Delta x_{i_\mu,q}$ .

Необхідно відмітити, що в пунктах  $E_{i_s}$  та  $E_{i_\mu}$  залишилось товару відповідно в кількостях  $a_{i_s} - \Delta x_{i_s,j}$  та  $a_{i_\mu} - \Delta x_{i_\mu,q}$ .

Припустимо, що умова (16) не виконується. Це означає, що знайдуться спільні індекси на множинах  $\{i_1, i_2, \dots, i_s\}$  та  $\{i_1, i_2, \dots, i_\mu\}$ . Розглянемо випадок, коли перетином цих множин є один індекс  $u$ , тобто  $\{i_1, i_2, \dots, i_s\} \cap \{i_1, i_2, \dots, i_\mu\} = \{u\}$ . Це означає, що знайдуться числа  $1 \leq v \leq s-1$  та  $1 \leq f \leq \mu-1$  такі, що  $i_v = i_f = u$ . В пункті  $E_u$  товару знаходиться  $a_u$ . В самому загальному випадку може трапитися так, що частину цього товару  $0 \leq x \leq a_u$  вигідніше направити в пункт доставки  $P_j$ , остачу  $(a_u - x)$  – в пункт  $P_q$ . Необхідно знайти таке  $x$ , щоб затрати на транспортні перевезення були мінімальними. Розглянемо найпростіший випадок, коли

$$\Delta x_{i_v,j} + a_u - x \leq a_{i_v}, \Delta x_{i_f,q} + x \leq a_{i_f}. \quad (18)$$

Випадки, коли одна з нерівностей чи обидві разом не виконуються, розглядаються по аналогії з простішим випадком і принципівих математичних труднощів не викликають.



При виконанні нерівностей (18) формула для обчислення мінімальних транспортних затрат буде наступною

$$Q^{(j,q)}(x) = \sum_{r=1}^{v-1} c_{i_r,j} \bar{a}_{i_r} + c_{uq} x + \sum_{r=y+1}^{s-1} c_{i_r,j} \bar{a}_{i_r} + \\ + c_{i,j} (a_u - x + \Delta x_{i,j}) + \sum_{r=1}^{f-1} c_{i_r,q} \bar{a}_{i_r} + c_{uq} (a_u - x) + \\ + \sum_{r=f+1}^{u-1} c_{i_r,q} \bar{a}_{i_r} + c_{i,q} (x + \Delta x_{i,q}), \quad (19)$$

Як видно з формули (19) мінімальні транспортні затрати залежать від  $x$ . Зрозуміло, що параметр  $x$  при умовах (18) та  $x \geq 0$  необхідно вибрати так, щоб мінімізувати функцію  $Q^{(j,q)}(x)$ . Оскільки в (19) від  $x$  залежать лише деякі доданки, то сформульована задача еквівалентна мінімізації наступної лінійної форми

$$(c_{uq} + c_{i,q})x + (c_{uq} + c_{i,j})(a_u - x) \quad (20)$$

при фазових обмеженнях (18) та

$$0 \leq x \leq a_u. \quad (21)$$

Для розв'язання реальних задач доцільно користуватись алгоритмами, які дають квазіоптимальні розв'язки. При виконанні умов (18) один з них полягає в тому, що оптимальне значення  $x^{(opt)}$  вибирається найкращим з двох: 0 або  $a_u$  (тобто весь товар з  $E_u$  перевозимо в  $P_j$  або ж  $P_q$ ). Тоді знаходимо число  $x^{(opt)}$  порівнюючи числа  $Q^{(j,q)}(0)$  та  $Q^{(j,q)}(a_u)$ . Далі схема обчислень співпадає з вищеприписаною.

Зауважимо, що даний алгоритм був використаний при оптимізації транспортних перевезень сільськогосподарської продукції в порти України. Параметри задачі були взяті наступними:  $m = 604$ ,  $n = 12$ ,  $k = 1, 2$ . Алгоритм виявився надзвичайно ефективним в плані швидкодії, а його застосування суттєво понизило затрати на транспортні перевезення.

## Література

1. Гольштейн Е.Г. Юдин Д.Б. Задачи линейного программирования транспортного типа. – М.: Наука, 1969. – 382с.
2. Карманов В.Г. Математическое программирование. – М.: Наука, 1975. – 272с.
3. Ляшенко И.Н. и др. Линейное и нелинейное программирование. – К.: Вища школа, 1975. – 472 с.
4. Муртаф Б. Современное линейное программирование. – М.: Мир, 1984. – 224 с.
5. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983. – 384с.
6. Попов Ю.Д., Тюптя В.І., Шевченко В.І. Методи оптимізації. – К.: Абріс, 1999. – 217 с.
7. Гаращенко Ф.Г., Клименко В.Г. Об одном алгоритме оптимального выбора пунктов доставки однородного товара с минимальными транспортными затратами // Кибернетика и вычислительная техника, 2003. – Вып. 140. – С. 63-68.
8. Гаращенко Ф.Г., Башняков О.М., Клименко В.Г. Про інформаційно-аналітичну систему для аналізу та оптимізації транспортних перевезень // Вісник Київського університету, сер. "Фіз-мат. науки", 2005. – Вып. 1. – С. 167-171.
9. Гаращенко Ф.Г., Башняков О.М., Клименко В.Г. Розробка алгоритмічного та програмного забезпечення для аналізу та оптимізації транспортних перевезень // International conference "Theoretical and applied aspects of program systems development (TAAPSP'2004), Abstracts, 5-8 October, 2004, Kyiv, Ukraine. – Kyiv, 2004. – P. 261-163.
10. Клименко В.Г. Вибір пунктів доставки однорідного товару з мінімальними транспортними перевезеннями // Десята міжнародна конференція імені академіка М. Кравчука, 13-15 травня 2004 року, Київ. Матеріали конференції. – К., 2004. – С. 128.

Надійшла до редколегії 22.02.2007 року.



УДК 519.8

Горбачук В.М., к.ф.-м.н., с.н.с., Гаркуша\* Н.І.,  
к.е.н.

# Рівноваги Курно–Неша за асиметричної невизначеності та узагальнені рівноваги Курно–Штакельберга–Неша

Показано роль планування і прогнозування на прикладі поведінки фірм за асиметричної невизначеності.

Фірма з вузьким діапазоном рівномірного розподілу випусків стає лідером, а фірма з ширшим діапазоном випусків – послідовником в узагальненій рівновазі Курно–Штакельберга–Неша. Рівноважний прибуток лідера більший, ніж рівноважний прибуток послідовника.

Ключові слова: рівновага, Курно, перевага, Штакельберг, Неш, випадковий випуск, асиметрія.

\*E-mail: GorbachukWasyi@netscape.net, NGarkusha@unicyb.kiev.ua.

Високотехнологічні галузі, що випускають нові продукти чи надають нові послуги, характеризуються невеликим числом фірм, здатних виробляти подібні продукти або послуги [1, 2, 7, 8, 14, 15]. Крім того, ринкам нових продуктів або послуг притаманна невизначеність попиту чи випуску [3–5, 9–13]. Важливість невизначеності очевидна після обвалу акцій Інтернет-фірм 2000 р., терористичної атаки 11 вересня 2001 р., подолання ціни нафти порогу 70 доларів за баррель, різких кліматичних змін. Одна власне невизначеність нерідко стримує ділову активність осіб, звикших до так званого централізованого планування. У даній роботі досліджується вплив випадкових випусків на сподівані ринкові випуск і ціну, а також випуски та прибутки фірм.

Припустимо, однорідний продукт виробляють лише дві особи, які приймають рішення (ОПР), – фірми 1 і 2. Нехай функція оберненого попиту на цей продукт задається

$$P = a - bQ, \quad (1)$$

де  $P$  – (додатна) ціна продукту,  $Q$  – його обсяг (об'єм), випущений (і проданий) фірмами.  $a$ ,  $b$  – додатні параметри. Фірма  $i$  випускає обсяг  $q_i$ , і має витрати  $c_i$  на випуск одиниці продукції,  $i = 1, 2$ . Зазначимо, що

V. M. Gorbachuk, Ph.D. (Physics and Mathematics), N.I. Garkusha\*, Ph.D. (Economics)

# The Cournot–Nash equilibria under asymmetric information and the generalized Cournot–Stackelberg–Nash equilibria

The short digression is done in history of UML origin and development, the brief review of language is resulted and an attempt to systematize a plenty of the educational and scientific literature devoted to this language is done.

Key Words: UML, object-oriented design, modeling language, specification, semantics.

$$Q = q_1 + q_2. \quad (2)$$

Нехай значення випуску  $q_2$  фірми 2 детерміноване, а значення випуску  $q_1$  фірми 1 має рівномірний розподіл на відрізку  $[d_1, D_1]$ , тобто щільність

$$f(q_1) = \{1/(D_1 - d_1), q_1 \in [d_1, D_1]; 0, q_1 \notin [d_1, D_1]\}$$

Так, у роботі [4] вважається, що ціна нафти рівномірно розподілена від 17 до 51 долара за баррель.

Фірма 2 обирає обсяг  $q_2$  свого випуску, максимізуючи сподіване (expected) значення  $E(\pi_2)$  свого прибутку  $\pi_2 = (P - c_2)q_2$ , звідки в силу (1), (2)

$$\begin{aligned} E(\pi_2) &= E\{[a - b(q_1 + q_2)]q_2 - c_2q_2\} = \\ &= E\{[a - c_2 - b(q_1 + q_2)]q_2\} = \\ &= (a - c_2)q_2 - b(q_2)^2 - bq_2q_1, \end{aligned} \quad (3)$$

де сподіваним значенням величини  $q_1$  є

$$\bar{q}_1 = E(q_1) = (d_1 + D_1)/2. \quad (4)$$



Коли максимально можливий сподіваний прибуток фірми від'ємний, то ця фірма може обирати нульовий випуск, тобто не входити на ринок. Оскільки стратегія однієї ОПР детермінована, а стратегія іншої ОПР випадкова, то маємо справу з асиметричною невизначеністю. Водночас фірма 1 обирає сподіваний обсяг  $\bar{q}_1$  свого випуску, максимізуючи сподіване значення сподіване значення свого прибутку

$$E(\pi_1) = E(Pq_1 - c_1q_1),$$

звідки в силу (1), (2)

$$\begin{aligned} E(\pi_1) &= E\{[a - b(q_1 + q_2)]q_1 - c_1q_1\} = \\ &= E\{[a - c_1 - b(q_1 + q_2)]q_1\} = \\ &= (a - c_1)\bar{q}_1 - bE[(q_1)^2] - bq_2\bar{q}_1, \end{aligned} \quad (5)$$

де через співвідношення (4)

$$\begin{aligned} E[(q_1)^2] &= \int_{d_1}^{\infty} (q_1)^2 f(q_1) dq_1 = \\ &= \int_{d_1}^{D_1} (q_1)^2 dq_1 / (D_1 - d_1) = (q_1)^3 \Big|_{d_1}^{D_1} / [3(D_1 - d_1)] = \\ &= [(D_1)^3 - (d_1)^3] / [3(D_1 - d_1)] = \\ &= [(D_1)^2 + D_1d_1 + (d_1)^2] / 3 = \\ &= [(D_1 + d_1)^2 - D_1d_1] / 3 = [4(\bar{q}_1)^2 - D_1d_1] / 3. \end{aligned}$$

Таким чином,

$$E(\pi_1) = (a - c_1)\bar{q}_1 - bq_2\bar{q}_1 - b[4(\bar{q}_1)^2 - D_1d_1] / 3.$$

Тоді за рівновагою Курно–Неша (Cournot–Nash) за випадкового випуску фірми 1 називається такий набір випуску  $q_2^{C1}$  фірми 2 та сподіваного випуску  $\bar{q}_1^{C1} = (d^{C1} + D^{C1}) / 2$  фірми 1, що:

$$\begin{aligned} E(\pi_1^{C1}) &= E[\pi_1(\bar{q}_1^{C1}, d_1^{C1}, D_1^{C1}, q_2^{C1})] \geq \\ &\geq E[\pi_1(\bar{q}_1, d_1, D_1, q_2^{C1})] \quad \forall \bar{q}_1 \geq 0; \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} E(\pi_2^{C1}) &= E[\pi_2(\bar{q}_1^{C1}, q_2^{C1})] \geq E[\pi_1(\bar{q}_1^{C1}, q_2)] \\ &\quad \forall q_2 \geq 0, \end{aligned} \quad (7)$$

Далі припустимо, що нижня межа  $d_1$  для значень величини  $q_1$  є деякою константою (такою константою може завжди служити, наприклад, нуль). Природно вважати, що значення детермінованого рівноважного за Курно – Нешем випуску  $q_1^{C1}$  фірми 1 належить відрізьку  $[d_1, D_1]$

**Теорема 1.** За умов (1)–(5), а також

$$d_1 \leq q_1^C = (a - 2c_1 + c_2) / (3b), \quad (8)$$

$$a + c_1 \geq 2c_2, \quad (9)$$

$$a \geq c_2 + bd_1, \quad (10)$$

набір

$$\bar{q}_1^* = [3(a - 2c_1 + c_2) + 4bd] / (13b),$$

$$q_2^* = (5a - 8c_2 + 3c_1 - 2bd) / (13b)$$

є рівновагою Курно–Неша за випадкового випуску фірми 1.

Нестрога нерівність (9) відповідає строгій

нерівності (7) теореми 1 [8], а при  $d_1 > 0$  з нерівності (8) випливає строга нерівність (6) теореми 4 [8].

Скористаємося увігнітістю сподіваного прибутку  $E(\pi_2)$  по  $q_2$ , щоб максимізувати  $E(\pi_2)$  по  $q_2$ :

$$0 = \partial E(\pi_2) / \partial q_2 = a - c_2 - 2bq_2 - b\bar{q}_1. \quad (11)$$

Скористаємося увігнітістю сподіваного прибутку  $E(\pi_1)$  по  $\bar{q}_1$ , щоб максимізувати  $E(\pi_1)$  по  $\bar{q}_1$ :

$$\begin{aligned} 0 &= \partial E(\pi_1) / \partial \bar{q}_1 = a - c_1 - bq_2 - b[8\bar{q}_1 - \\ &\quad - \partial(D_1d_1) / \partial \bar{q}_1] / 3. \end{aligned} \quad (12)$$

Враховуючи рівність (4) й фіксованість  $d_1$ , отримуємо

$$\partial(D_1d_1) / \partial \bar{q}_1 = D_1\partial d_1 / \partial \bar{q}_1 + d_1\partial D_1 / \partial \bar{q}_1 = 2d_1$$

виходить й підставляємо це в рівняння (12):

$$0 = a - c_1 - bq_2 - b(8\bar{q}_1 - 2d_1) / 3. \quad (13)$$

Рівняння (11) дає

$$q_2 = (a - c_2 - b\bar{q}_1) / (2b), \quad (14)$$



що підставляємо у рівність (13):

$$0 = a - c_1 - (a - c_2 - b\bar{q}_1)/2 - b(8\bar{q}_1 - 2d_1)/3,$$

$$0 = 6(a - c_1) - 3(a - c_2 - b\bar{q}_1) - 4b(4\bar{q}_1 - d_1) = \\ = 3(a - 2c_1 + c_2) + 4bd_1 - 13b\bar{q}_1,$$

$$\bar{q}_1 = [3(a - 2c_1 + c_2) + 4bd_1]/(13b) = \bar{q}_1^{C1}. \quad (15)$$

Враховуючи рівність (4) і нерівність  $D_1 \geq d_1$ , має виконуватися

$$d_1 \leq (d_1 + D_1^C)/2 = [3(a - 2c_1 + c_2) + 4bd_1]/(13b),$$

$$13bd_1 \leq 3(a - 2c_1 + c_2) + 4bd_1,$$

що гарантується умовою (8).

Із співвідношень (14), (15) дістаємо

$$q_2 = \{a - c_2 - [3(a - 2c_1 + c_2) + 4bd_1]/13\}/(2b) = \\ = (13a - 13c_2 - 3a + 6c_1 - 3c_2 - 4bd_1)/(26b) = \\ = (10a + 6c_1 - 16c_2 - 4bd_1)/(26b) = \\ = (5a + 3c_1 - 8c_2 - 2bd_1)/(13b) = q_2^{C1}.$$

Зазначимо, що в силу нерівностей (9), (10) виконується  $q_2^{C1} \geq 0$ .

**Наслідок 1.** За умов теореми 1

$$D_1^C = [6(a - 2c_1 + c_2) - 5bd_1]/(13b).$$

**Наслідок 2.** Якщо умова (8) задовольняється як рівність, то  $D_1 = d_1$ , тобто випуск фірми 1 детермінований.

Отже, випадковість випуску фірмою 1 призводить до зміни в рівновазі Курно-Неша від  $q_2^C$  [8] до  $q_2^{C1}$ , а також від  $q_1^C$  до  $\bar{q}_1^{C1}$ . Відповідь про напрямки цих змін дає

**Теорема 2.** За умов теореми 1

$$\bar{q}_1^{C1} \leq q_1^C, \quad (16)$$

$$q_2^{C1} \geq q_2^C, \quad (17)$$

Нерівності (8)–(10) означають, що максимально можлива ціна  $a$  має бути досить великою:

$$a \geq \max\{2c_2 - c_1; c_2 + bd_1; 2c_1 - c_2 + 3bd_1\}.$$

Коли питомі витрати фірми 2 з випадковим випуском не менші, ніж питомі витрати фірми 2 з детермінованим випуском, або

$$c_1 \geq c_2, \quad (18)$$

то з нерівності (8) випливає умова (9) теореми 1.

**Наслідок 3.** За умов (1)–(5), (10), (18) нерівність (8) є необхідною й достатньою умовою нерівностей (16) і (17).

Теорема 2 говорить: за умов теореми 1 випадковість  $q_1$  призводить до зменшення сподіваного рівноважного значення  $\bar{q}_1^{C1}$  відносно  $q_1^C$ , а також до збільшення  $q_2^{C1}$  відносно  $q_2^C$ . Порівняємо сумарний рівноважний ринковий випуск  $Q^C$  [8] і сумарний сподіваний рівноважний ринковий випуск  $\bar{Q}^{C1} = \bar{q}_1^{C1} + q_2^{C1}$ .

**Теорема 3.** За умов теореми 1  $\bar{Q}^{C1} \leq Q^C$ .

**Наслідок 4.** За умов теореми 1

$$P^C \leq \bar{P}^{C1} = a - b\bar{Q}^{C1}.$$

Теорема 3 і наслідок 4 говорять: за умов теореми 1 випадковість  $q_1$  призводить до зменшення сподіваного рівноважного ринкового випуску  $\bar{Q}^{C1}$  відносно  $Q^C$ , а також до збільшення сподіваної рівноважної ціни  $\bar{P}^{C1}$  відносно  $P^C$ .

**Теорема 4.** За умов теореми 1 фірма 2 з детермінованим випуском, знаючи сподіваний випуск фірми 1, дістає додатковий вигаш

$$E(\pi_2^{C1}) - \pi_2^C = (G^2 - F^2)/b \geq 0,$$

де

$$F = (a - 2c_2 + c_1)/3,$$

$$G = (5a + 3c_1 - 8c_2 - 2bd_1)/13.$$

Коли за випадкового випуску фірми 1 прибуток конкурента, фірми 2 з детермінованим випуском, підвищується, виникає питання про мотивацію фірми 1 до випадкового випуску, тобто питання про поведінку прибутку фірми 1.

**Теорема 5.** Сподіваний рівноважний прибуток фірми 1 за умов теореми 1 не більший її прибутку за умов рівноваги Курно-Неша:



$$E(\pi_1^{c1}) \leq \pi_1^c.$$

Теорема 4 і 5 стверджують, що випадковість випуску фірми 1 дає додатковий вигравш її конкуренту – фірмі 2 з детермінованим випуском, але не самій фірмі 1: детермінованість випуску ОПР має перевагу над випадковістю випуску. Цей висновок пояснює увагу до прогнозування й планування.

Отже, асиметрія невизначеності ставить ОПР з детермінованим випуском у становище лідера, а ОПР з випадковим випуском – у становище послідовника [8]. Дійсно, ОПР з детермінованим випуском не знає випадкового значення випуску іншої ОПР, але знає сподіване значення випадкового випуску конкурента.

Узагальненою рівновагою Курно–Штакельберга–Неша називається такий набір випусків лідера та послідовника, для якого прибуток лідера не менший його прибутку в рівновазі Курно–Неша, а прибуток послідовника не менший його прибутку в рівновазі Штакельберга–Неша [8].

**Теорема 6.** За умов теореми 1 рівновага Курно–Неша при випадковому  $q_1$  є узагальненою рівновагою Курно–Штакельберга–Неша, зокрема при  $c = c_1 = c_2$  має місце

$$E(\pi_1^{c1}) \geq (a - c)^2 / (16b).$$

Отримані результати показують, що асиметрія взаємодії ОПР, зокрема асиметрія невизначеності, може бути причиною переваг лідера й вести до узагальнених рівноваг Курно–Штакельберга–Неша.

Припустимо тепер, що величина  $q_2$  випадкова, незалежна від  $q_1$ , має рівномірний розподіл з щільністю

$$f(q_2) = \{(D_2 - d_2)^{-1}, q_2 \in [d_2, D_2]; 0, q_2 \notin [d_2, D_2]\}$$

на відрізку  $[d_2, D_2]$  і сподіване значення

$$\bar{q}_2 = (d_2 + D_2) / 2. \quad (19)$$

Аналогічно до формули (5), враховуючи незалежність випадкових величин  $q_1$  і  $q_2$ , маємо

$$E(\pi_1) = (a - c_1)\bar{q}_1 - bE[(q_1)^2] - bE(q_2q_1) =$$

$$= (a - c_1)\bar{q}_1 - b\bar{q}_2\bar{q}_1 - b[4(\bar{q}_1)^2 - D_1d_1] / 3.$$

Аналогічно, в силу симетрії,

$$E(\pi_2) = (a - c_2)\bar{q}_2 - b\bar{q}_2\bar{q}_1 - b[4(\bar{q}_2)^2 - D_2d_2] / 3.$$

Тоді рівновагою Курно–Неша при випадкових випусках обох фірм (в умовах взаємної невизначеності) називається такий набір сподіваних випусків

$$\bar{q}_1^c = (d_1^c + D_1^c) / 2,$$

$$\bar{q}_2^c = (d_2^c + D_2^c) / 2,$$

що

$$E(\pi_1)^c = E[\pi_1(\bar{q}_1^c, d_1^c, D_1^c, d_2^c, D_2^c, \bar{q}_2^c)] \geq E[\pi_1(\bar{q}_1, d_1, D_1, d_2^c, D_2^c, \bar{q}_2^c)] \quad \forall \bar{q}_1 \geq 0, \quad (20)$$

$$E(\pi_2)^c = E[\pi_2(\bar{q}_1^c, d_1^c, D_1^c, d_2^c, D_2^c, \bar{q}_2^c)] \geq E[\pi_2(\bar{q}_1^c, d_1^c, D_1^c, d_2, D_2, \bar{q}_2)] \quad \forall \bar{q}_2 \geq 0. \quad (21)$$

Природно припустити, що значення детермінованого рівноважного за Курно–Нешем випуску  $q_i^c$  фірми  $i$  [8] належить відрізку  $[d_i, D_i]$ ,  $i = 1, 2$ . Тоді ринковий випуск фірм за умов визначеності не менший суми заданих нижніх меж випадкових випусків цих фірм:

$$Q^c = q_1^c + q_2^c \geq d_1 + d_2.$$

**Теорема 7.** За умов (1), (2), (4), (5), (19), а також

$$d_1 \leq q_1^c = (a - 2c_1 + c_2) / (3b), \quad (22)$$

$$d_2 \leq q_2^c = (a - 2c_2 + c_1) / (3b), \quad (23)$$

набір

$$\bar{q}_1^* = [3(5a + 3c_2 - 8c_1) + 2b(8d_1 - 3d_2)] / (55b),$$

$$\bar{q}_2^* = [3(5a + 3c_1 - 8c_2) + 2b(8d_2 - 3d_1)] / (55b)$$

є рівновагою Курно–Неша при взаємній невизначеності.

При  $d_i > 0$ ,  $i = 1, 2$ , з нерівностей (22) і (23) випливають відповідно строгі нерівності (6) і (7) теореми 1 [8].



Аналогічно до рівняння (13) отримуємо

$$0 = a - c_1 - b\bar{q}_2 - 2b(4\bar{q}_1 - d_1)/3,$$

$$0 = a - c_2 - b\bar{q}_1 - 2b(4\bar{q}_2 - d_2)/3,$$

звідки неважко переконатися у справедливості теореми 7.

**Наслідок 5.** За умов теореми 7

$$D_1^C = [6(5a + 3c_2 - 8c_1) - b(23d_1 + 12d_2)]/(55b),$$

$$D_2^C = [6(5a + 3c_1 - 8c_2) - b(23d_2 + 12d_1)]/(55b).$$

**Наслідок 6.** Якщо умови (22) і (23) задовольняються як рівності, то  $D_1^C = d_1$ ,  $D_2^C = d_2$ , тобто випуски обох фірм детерміновані.

Таким чином, випадковість випусків фірм веде до зміни в рівновазі Курно–Неша від  $q_1^C$  [8] до  $\bar{q}_1^C$ , а також від  $q_2^C$  до  $\bar{q}_2^C$ . Відповідь щодо напрямів цих змін дає

**Теорема 8.** Нехай задовольняються умови теореми 7. Якщо виконується нерівність

$$c_2 - c_1 + b(d_2 - d_1) \geq 0, \quad (24)$$

то  $\bar{q}_1^C \leq q_1^C$ ; якщо ж нерівність (24) не виконується, то  $\bar{q}_2^C < q_2^C$ .

Зазначимо, що умова (24) виконується при

$$c = c_1 = c_2, \quad (25)$$

$$d_1 = d_2.$$

Умова (24) говорить: якщо собівартість фірми 1 вища, то нижня межа випадкового випуску цієї фірми має бути нижча:

$$d_2 - d_1 \geq (c_1 - c_2)/b.$$

**Лема 1.** Нехай задовольняються умови теореми 7 та нерівність (10). Якщо виконується нерівність

$$a \geq c_1 + b(2d_1 + d_2), \quad (26)$$

то верхня межа  $D_1^C$  випадкового випуску фірми 1 при взаємній невизначеності не менша, ніж верхня межа  $D_1$  випуску цієї фірми за умов асиметричної невизначеності:  $D_1^C \geq D_1$ .

**Наслідок 7.** За умов теореми 7 і нерівностей (10), (26) сподіваний випуск  $\bar{q}_1^C$  фірми 1 при взаємній невизначеності не менший, ніж сподіваний випуск  $\bar{q}_1^{C1}$  фірми 1 при асиметричній невизначеності.

З наслідку 7 випливає, що міра невизначеності випуску фірми 1 впорядковує рівноважні значення її випусків:

звідки неважко переконатися у справедливості теореми 7.

**Наслідок 5.** За умов теореми 7

$$D_1^C = [6(5a + 3c_2 - 8c_1) - b(23d_1 + 12d_2)]/(55b),$$

$$D_2^C = [6(5a + 3c_1 - 8c_2) - b(23d_2 + 12d_1)]/(55b).$$

**Наслідок 6.** Якщо умови (22) і (23) задовольняються як рівності, то  $D_1^C = d_1$ ,  $D_2^C = d_2$ , тобто випуски обох фірм детерміновані.

Таким чином, випадковість випусків фірм веде до зміни в рівновазі Курно–Неша від  $q_1^C$  [8] до  $\bar{q}_1^C$ , а також від  $q_2^C$  до  $\bar{q}_2^C$ . Відповідь щодо напрямів цих змін дає

**Теорема 8.** Нехай задовольняються умови теореми 7. Якщо виконується нерівність

$$c_2 - c_1 + b(d_2 - d_1) \geq 0, \quad (24)$$

то  $\bar{q}_1^C \leq q_1^C$ ; якщо ж нерівність (24) не виконується, то  $\bar{q}_2^C < q_2^C$ .

Зазначимо, що умова (24) виконується при

$$c = c_1 = c_2, \quad (25)$$

$$d_1 = d_2.$$

Умова (24) говорить: якщо собівартість фірми 1 вища, то нижня межа випадкового випуску цієї фірми має бути нижча:



$$d_2 - d_1 \geq (c_1 - c_2)/b.$$

**Лема 1.** Нехай задовольняються умови теореми 7 та нерівність (10). Якщо виконується нерівність

$$a \geq c_1 + b(2d_1 + d_2), \quad (26)$$

то верхня межа  $D_1^C$  випадкового випуску фірми 1 при взаємній невизначеності не менша, ніж верхня межа  $D_1$  випуску цієї фірми за умов асиметричної невизначеності:  $D_1^C \geq D_1$ .

**Наслідок 7.** За умов теореми 7 і нерівностей (10), (26) сподіваний випуск  $\bar{q}_1^C$  фірми 1 при взаємній невизначеності не менший, ніж сподіваний випуск  $\bar{q}_1^{C1}$  фірми 1 при асиметричній невизначеності.

З наслідку 7 випливає, що міра невизначеності випуску фірми 1 впорядковує рівноважні значення її випусків:

вони мають однакові випуск і прибуток. Якщо ж випуск однієї з фірм випадковий, то в узагальненій рівновазі Курно–Штакельберга–Неша ця фірма, за досить загальних умов, є послідовником, а фірма з детермінованим випуском – лідером. Коли випуск кожної фірми випадковий, то в узагальненій рівновазі Курно–Штакельберга–Неша фірма з ширшим діапазоном випадкових значень випуску (за умови (27)) є послідовником, а фірма з вузьким діапазоном випадкових значень є лідером.

Таким чином, фірма з визначенішим випуском у всіх випадках дістає перевагу відносно фірми з менш визначеним випуском.

Аналогічно при взаємодії уряду та центрального банку можна очікувати, що лідером в узагальненій рівновазі Курно–Штакельберга–Неша буде організація, яка має визначенішу стратегію [6].

#### Список використаних джерел

1. Чикрий А.А. Конфликтно-управляемые процессы. – К.: Наук. думка, 1992. – 384 с.
2. Горбачук В.М. Макроекономічні методи. – К.: Альтерпрес, 1999. – 263 с.

3. Klemperer P., Meyer M. Price competition vs. quantity competition: the role of uncertainty // RAND journal of economics. – 1986, Winter. – P. 618–638.
4. De Wolf D., Smeers Y. A stochastic version of a Stackelberg–Nash–Cournot model // Management science. – 1997, February. – P. 190–197.
5. Горбачук В.М., Ненахова С.Г. Поведінка конкурентної фірми за невизначеності // Теорія оптимальних рішень. – 2004. – № 3. – С. 74–80.
6. Горбачук В.М., Гаркуша Н.И. Вычисление совместимых значений бюджетного дефицита и инфляции: пример на данных Украины 2005 года // Економіст. – 2005. – № 9. – С. 31–33.
7. Горбачук В.М. К решению задачи транзита ресурса // Компьютерная математика. – 2006. – № 3. – С. 141–148.
8. Горбачук В.М. Обобщенное равновесие Курно–Штакельберга–Нэша // Кибернетика и системный анализ. – 2006. – № 1. – С. 3–9.
9. Акименко В.В., Наконечный А.Г. Модели оптимального управления процессами межрегиональной миграции в условиях рисков // Кибернетика и системный анализ. – 2006. – № 3. – С. 107–122.
10. Горбачук В.М. Поиск равновесий Нэша в условиях нестационарности негладких функций выигрыша // Математические методы анализа и оптимизации сложных систем, функционирующих в условиях неопределенности – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1986. – С. 8–12.
11. Gorbachuk V. To solving a problem of natural gas supply and transit / Applied optimization and metaheuristic innovations. Internat. conf. in honor of the 70-th birthday of Academician I.V.Sergienko (July 19– 21, 2006, Yalta, Ukraine). – V.M.Glushkov Inst. of Cybernetics; Texas A&M University, 2006. – P. 26–27.
12. Горбачук В.М. Метод розв'язання задачі обчислення плати за транзит ресурсу // Праці III-ї міжнародної школи-семінару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2006. – С. 40–41.

Надійшла до редколегії 25.01.07



УДК 519.876

Загородній Ю.В., к.т.н., доц.,  
Ковальчук\* О.Ф., інженер

## Про один підхід до моделювання розвитку систем

В роботі розглянуто метод моделювання розвитку систем. Система характеризується кількістю інформації про взаємозв'язки елементів. По мірі розвитку ускладнюється структура системи і в ній з'являються нові підсистеми. Розглянуто приклад моделі системи, що розвивається.

Ключові слова: система, розвиток, ріст, ядро, рецептор, структура, кількість інформації, інформаційний пакет.

\*E-mail: yuzagor@ukr.net, fomina\_olena@ukr.net

Все більший інтерес викликають дослідження систем, що розвиваються. Системний аналіз процесів живої і неживої природи дозволяє зробити висновок, що ріст та розвиток мають загальні закономірності [1–4, 9]. Розвиток [1–3] – це направлені закономірні зміни матерії і свідомості, в результаті яких виникає нова якість об'єкту – його складу та структури. Ріст [3] найчастіше визначається як зростання кількісних характеристик системи у процесі її розвитку.

В якості параметра, який характеризує розвиток системи, використовується ентропія як міра впорядкованості. Вперше поняття ентропії було пов'язано з термодинамікою, зв'язки якої зі статистичною фізикою обумовили можливість використання її методів для описання широкого класу систем [4, 9]. Нерівноважна термодинаміка охоплює всі випадки, коли потоки (або швидкості) незворотних процесів є нелінійними функціями (градієнтів температур або концентрацій).

Системи, що розвиваються, є відкритими системами, тобто здатними обмінюватися енергією, інформацією та ресурсами з зовнішнім середовищем. В [1] система вважається відкритою, якщо її не можна представити у вигляді детермінованої залежності виходу від входу і умов зовнішнього і внутрішнього середовища.

Головною умовою розвитку вважається наявність нерівноважних станів, що призводить до структурної флуктуації і збільшує ентропію. Утворюються нові елементи, між якими ще не

Yu. V. Zagorodniy, cand. of techn. sciences, doc.,  
O. F. Kovalchuk\*, engineer

## An Approach to modelling development of the systems

The method of modelling of systems development is considered in the paper. The system is characterized by information value about intercommunications of elements. The system development leads to the structure complicating and appearance of the new subsystems. It is considered the example of the developing system.

Keywords: system, development, growth, core, receptor, structure, information value, informative package.

встановлені структурні зв'язки. Система стає структурно нестійкою, що породжує зміни (мутації). Тоді ентропія розглядається як джерело організації нової структури. Процеси самоорганізації в системі викликають появу нових зв'язків між елементами, що веде до утворення нових елементів, а це призводить до збільшення зовнішніх зв'язків в системі, що збільшує її загальну ентропію. В зв'язку з цим автори розглядають розвиток як збільшення ентропії, що є наслідком збільшення кількості та якості елементів і зв'язків між ними.

Розглянемо модель системи, що розвивається, ускладнюючи свою структуру. Нехай,  $n \in \mathbb{N}$  – рівень розвитку системи. На кожному підрівні  $j = \overline{1, n}$  система складається з елементів якостей  $i = \overline{0, j}$  і повного набору можливих зв'язків кожного елемента системи [2, 3]. Властивість елемента утворити певний зв'язок назовемо рецептором. Введемо скінченні підмножини  $X_h = \{x_{jh}, h = \overline{1, n_j}\}$  елементів системи на підрівні  $j$ ,  $j = \overline{1, n}$ , якості  $i$ ,  $i = \overline{0, j}$ , з кількістю елементів  $n_j \in \mathbb{N}$ . Кількість всіх елементів якості  $i$  дорівнює:

$$N_0 = \sum_{j=1}^n n_j, \text{ при } i = 0,$$

$$N_i = \sum_{j=1}^n n_j, \text{ при } i = \overline{1, n}$$



Тоді  $N = \sum_{i=0}^n N_i$  – кількість всіх елементів системи. Визначимо розподіл множини всіх елементів за якістьми  $i$ :

$$X_0 = \bigcup_{j=1}^n X_{0j}, \text{ при } i=0,$$

$$X_i = \bigcup_{j=1}^n X_{ij}, \text{ при } i=\overline{1, n}.$$

Тоді  $X = \bigcup_{i=0}^n X_i$  – множина всіх елементів системи. Множину  $X_0$  назовемо базовою або ядром системи, а елементи цієї множини – базовими. Потужність та якісний склад елементів базової множини однозначно визначає рівень розвитку та якісний склад елементів всієї системи.

Введемо підмножини  $D_{jkh} = \{d_{jkh}, k=\overline{1, l_j}\}$  рецепторів елементів системи  $x_{jkh} \in X_{ij}, j=\overline{1, n}, i=\overline{0, n}, h=\overline{1, n_j}$ , де  $l_j \in \mathbb{N}$  – кількість рецепторів елемента якості  $i=\overline{0, n}$ . Тоді  $N^D = \sum_{i=0}^n N_i l_i$  – кількість всіх рецепторів системи.

Як приклад розглянемо ізолюваний від зовнішнього середовища атом водню [5], який можна представити як систему рівня розвитку  $n=1$ . Елементами ядра системи  $X_0 = X_{01} = \{x_{011}, x_{012}\}$  є, відповідно, протон і нейтрон, які мають сильний зв'язок між собою. Отже,  $D_{011} = \{d_{0111}\}$ ,  $D_{012} = \{d_{0121}\}$  і  $N_0=2$ ,  $l_0=1$ . На першому підрівні до ядра приєднується електрон –  $X_1 = X_{11} = \{x_{111}\}$  через рецептор зв'язку з ядром  $D_{111} = \{d_{1111}\}$ ,  $N_1=1$ ,  $l_1=1$ . Загальне число рецепторів  $K = N_0 l_0 + N_1 l_1 = 3$ .

Кожен рецептор  $d_{jkh}, i=\overline{0, n}, j=\overline{1, n}, h=\overline{1, n_j}, k=\overline{1, l_j}$  може перебувати в одному з  $2^{q_{jk}}$  станів, які характеризуються двійковим числом  $d_{jkh}^1 d_{jkh}^2 \dots d_{jkh}^{q_{jk}}$  довжини  $q_{jk} \in \mathbb{N}$ , яку будемо вважати фіксованою для певної якості  $i$  та номеру рецептора  $k$ ,  $d_{jkh}^r \in \{0, 1\}$ . Введемо функцію, значення якої визначимо як рівень активності рецептора  $d_{jkh}$ :

$$p(d_{jkh}) = \sum_{r=1}^{q_{jk}} d_{jkh}^r.$$

Кожен рецептор  $d_{jkh}$  може перебувати в наступних станах: пасивному ( $p(d_{jkh})=0$ ), активному ( $0 < p(d_{jkh}) < q_{jk}$ ) та упакованому ( $p(d_{jkh}) = q_{jk}$ ). Сукупність множин  $S_{ij} = \{X_{ij}, D_{ij1}, \dots, D_{ijn_j}\}, \forall i=\overline{0, n}, j=\overline{1, n}$  є елементарною структурою якості  $i$  на підрівні  $j$ . Елементарну структуру з умовою, що всі елементи множин  $D_{ijh}, h=\overline{1, n_j}$  є упакованими рецепторами, будемо називати упакованою, і позначати  $S_{ij}^0$ . Система, що розвивається [10] і знаходиться на  $n$ -му рівні розвитку, є сукупністю упакованих елементарних структур і єдиної не упакованої:

$$C_n = (\{S_{01}^0, S_{11}^0\}, \dots, \{S_{0n}^0, S_{1n}^0, \dots, S_{n-n}^0, S_{nn}^0\}).$$

В [6] стан системи визначається як мінімальна кількість інформації про історію системи, яка необхідна для прогнозування поведінки системи в майбутньому. Кількість інформації по Колмогорову [7], яку містить об'єкт  $X$  (множина елементів системи  $C_n$ ) відносно об'єктів зовнішнього середовища  $E$ , визначається, як різниця між «складністю» об'єктів зовнішнього середовища  $E$  для об'єкта  $X$  та мінімальною довжиною програми (алгоритму), що дозволяє однозначно перетворити об'єкт  $X$  в об'єкти зовнішнього середовища  $E$ . Для системи  $C_n$ , що розвивається, складність об'єктів зовнішнього середовища  $E$ , з якими взаємодіють через рецептори її елементи, визначається як максимально можливий рівень активності всіх рецепторів системи  $C_n$ , тобто:

$$Z_{C_n} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=0}^i n_{ij} \sum_{k=1}^{l_j} q_{jk}.$$

Довжина програми перетворення рецепторів системи до упакованого стану («повного розуміння» об'єктів зовнішнього середовища  $E$ ) визначається як різниця їх «складності» для системи  $C_n$  та дійсного рівня активності рецепторів системи:



$$K = Z_{C_n} - \sum_{j=1}^n \sum_{i=0}^j \sum_{h=1}^{n_j} \sum_{k=1}^{l_j} p(d_{jhk}).$$

Кількість інформації, яку містить система  $C_n$  про об'єкти зовнішнього середовища  $E$ , визначається наступним чином [7]:

$$I_{C_n} = Z_{C_n} - K,$$

тобто,

$$I_{C_n} = Z_{C_n} - \left( Z_{C_n} - \sum_{j=1}^n \sum_{i=0}^j \sum_{h=1}^{n_j} \sum_{k=1}^{l_j} p(d_{jhk}) \right) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=0}^j \sum_{h=1}^{n_j} \sum_{k=1}^{l_j} p(d_{jhk}).$$

Множина, елементами якої є кількість інформації  $I_{C_n}$  про об'єкти зовнішнього середовища і сукупність множин  $S_j$ ,  $j = \overline{1, n}$ ,  $i = \overline{0, j}$  називається інформаційним пакетом системи  $C_n$ . Тоді розвиток системи можна представити як ріст рівня активності рецепторів інформаційних пакетів через циклічну зміну рівнів  $C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow \dots \rightarrow C_n$ , кожен з яких є послідовністю наступних етапів [1]:

– ріст, як збільшення кількості інформації до критичної точки в просторі станів системи;

– зародження нової якості, що може призвести або до формування нового рівня розвитку ( $n \rightarrow n+1$ ) або до деградації (загибелі) системи ( $n \rightarrow n-1$ ).

По мірі розвитку системи, тобто при переході з  $n$ -го рівня на  $n+1$ -й, її структура ускладнюється – з'являється підмножина нової якості  $X_{n+1}$ , а отже, з'являються і нові підмножини рецепторів її елементів  $D_{n+1, n+1, h} = \{d_{n+1, n+1, hk}, k = \overline{1, l_{n+1}}, h = \overline{1, n_{n+1, n+1}}\}$ , за допомогою яких система буде мати здатність по-новому взаємодіяти з елементами зовнішнього середовища. На етапі зародження нової якості підсистема  $\{S_{0, n+1}^0, S_{1, n+1}^0, \dots, S_{n, n+1}^0, S_{n+1, n+1}^0\}$  є домінуючою, рецептори елементів якої включають всі типи взаємодій попередніх рівнів і нові («мугуючі») взаємодії з елементами зовнішнього середовища. В процесі розвитку системи виникають складніші структури, зростає структурна різноманітність і можливості обмінюватися через нові рецептори новими видами ресурсів (енергії, матерії та інформації) [10] між елементами системи і середовища. Домінуюча підсистема визначає

напрямок розвитку всієї системи. Система розвивається як єдине ціле, але зміни, пов'язані із розвитком, квантовані на мікрорівні. Поквантовий ріст відбувається до певного критичного рівноважного стану, який обмежується умовами зовнішнього і внутрішнього середовища. При переході з  $n$ -го рівня на  $n+1$ -й, структура системи спрощується, тобто роз'єднуються зв'язки між елементами, а отже зникає множина рецепторів  $D_{nnh} = \{d_{nnhk}, k = \overline{1, l_n}, h = \overline{1, n_{nn}}\}$ . Домінуючою стає підсистема  $\{S_{0, n+1}^0, S_{1, n+1}^0, \dots, S_{n-2, n+1}^0, S_{n-1, n+1}^0\}$ . Подальша динаміка залежить від нових умов зовнішнього і внутрішнього середовища.

Як приклад можна розглянути систему з періодичної таблиці хімічних елементів Менделєєва [5, 8]. Мінімальним необхідним елементом елементарної структури  $S_{01}^0 = \{X_{01}, D_{011}, D_{012}\}$  системи є ядро атома з одного протону і одного нейтрону  $X_0 = X_{01} = \{x_{011}, x_{012}\}$ , а також однієї сильної взаємодії між ними:  $D_{011} = \{d_{0111}\}$ ,  $D_{012} = \{d_{0121}\}$ . Елементами множин  $D_{ijh}, i \geq 1$  є орбіталі, на яких знаходиться сукупність електронів, які можуть утримуватися навколо ядра і бути приєднаними. Наприклад, атом азоту є сьомим елементом в таблиці Менделєєва, знаходиться у другому періоді, має формулу  $1s^2 2s^2 2p^3$ , де  $1s, 2s, 2p$  – типи орбіталей, які відповідно можуть приєднати 2, 2 і 6 електронів. Даний атом можна представити як систему  $C_2 = (\{S_{01}^0, S_{11}^0\}, \{S_{02}^0, S_{12}^0, S_{22}^0\})$ , яка знаходиться на другому рівні розвитку. Кількість базових елементів першого підрівня – два протони і два нейтрони. Кількість рецепторів елементарної структури першого підрівня першої якості – 2, тобто дві  $s$ -орбіталі. Кількість базових елементів другого підрівня – п'ять протонів і п'ять нейтронів. Кількість рецепторів елементарної структури другого підрівня першої якості – 2, тобто теж дві  $s$ -орбіталі, а другої якості – 3, тобто три  $p$ -орбіталі. На другому підрівні можливе заповнення до шести  $p$ -орбіталей. Для атому азоту не всі елементарні структури є упакованими. Із збільшенням номера хімічного елементу рівень активності рецепторів буде зростати, при сприятливих умовах система отримає новий тип рецепторів, якого не було на попередніх рівнях – орбіталі типу  $3d$  і перейде на 3-й рівень розвитку.



Періодичне зростання кількості інформації  $I_{C_n}$  із збільшенням номерів хімічних елементів видно з графіка (рис. 1).

За допомогою запропонованого підходу можна описати та прогнозувати динаміку розвитку систем різної природи, де розвиток

5. Общая химия: учебник /Под ред. Е.М. Соколовской и Л.С. Гузья. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989. – 640 с.
6. Остром К. Введение в стохастическую теорию управления: пер. с англ. – М.

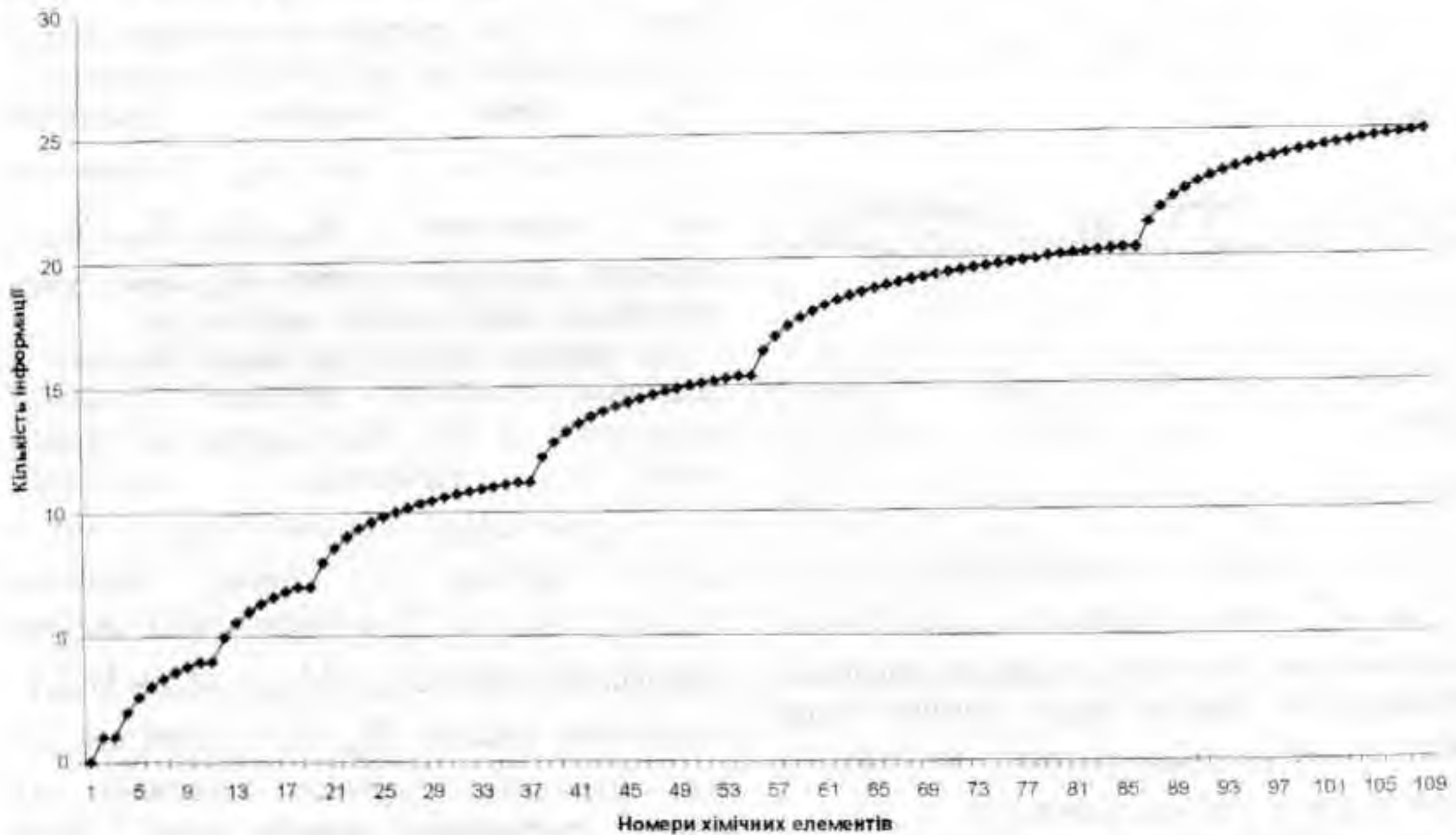


Рис. 1 Залежність кількості інформації  $I_{C_n}$  хімічних елементів від номеру хімічного елемента в періодичній системі

характеризується збільшенням кількості інформації в системі про стан зовнішнього середовища.

#### Список використаних джерел

1. Айламазян А.К., Стась Е.В. Информатика и теория развития. – М.: Наука, 1989. – 174 с.
2. Жирмунский А.В., Кузьмин В.И. Критические уровни в развитии природных систем. – Л.: Наука, 1990. – 223 с.
3. Рубин А.Б. Биофизика: В 2-х кн.: Учеб. для биол. спец. вузов. Кн. 1. Теоретическая биофизика. – М.: Высш. шк., 1987. – 319 с., ил.
4. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. – М.: Мир, 1973. – 279 с.
5. Мир, 1973. – 322 с.
7. Колмогоров А.Н. Теория информации и теория алгоритмов. – М.: Наука, 1987. – 304 с.
8. Баблюяц А. Молекулы, динамика и жизнь. Введение в самоорганизацию материи: Пер. с англ. – М.: «Мир», 1990. – 375 с., ил.
9. Пригожин И. Время, структура и флуктуации. Нобелевская лекция по химии 1977 г. // УФН. 1980. Т. 131, вып. 2. – С. 185–207.
10. Загородній Ю.В., Ковальчук О.Ф. Про один підхід до моделювання систем, що розвиваються // Тези міжнародної конференції "Problems of stochastic and discrete optimization" – Канів. – 10–15.05.2005. – С. 74–76.

Надійшла до редколегії 28.11.2006



УДК 628.16: 621.187.29

Зураб Н. Мегрелишвили, Ибраим Ш. Дидманидзе, Давид Т. Чхаидзе, Етери Ш. Нижарадзе

### Математическая модель изменения концентрации раствора поступающего в катионитовый фильтр

Рассмотрена новая комбинированная модель смешения раствора поступающего в катионитовый фильтр с водяной подушкой находящейся над загрузкой фильтра. По этой модели одновременно с идеальным смешением происходит изменение объема воды участвующей в идеальном смешивании. Получены зависимости изменения концентрации раствора поступающего в слой ионита при подаче в фильтр регенерационного раствора и отмывочной воды. Получено уравнение позволяющее определить время прохождения раствора с максимальной концентрацией через загрузку фильтра.

**Ключевые слова:** Катионитовый фильтр, регенерационный раствор.

Zurab N. Megrelishvili, Ibraim Sh. Didmanidze, David T. Chkhaidze, Eteri Sh. Nizharadze.

### The mathematical model of the solution strength change coming from the cation exchanger.

The new combined model of the solution mixing coming into the cation exchanger with water cushion above the exchanger charge was considered. According to this model the change of water volume participating in this ideal mixing occurs simultaneously with the ideal mixing. The dependences of the solution strength change coming into the ion exchanger layer during the feeding into the exchanger of the regenerant solution and washing water were received. Received was the equation which allows to determine the time of the solution passing with maximum strength through the charge of the exchanger.

**Key words:** cation exchanger, regenerant solution.

E-mail: z.megrelishvili@inbox.ru

### Introduction

In order to find the dependence between the reagent discharge and exchange capacity of the ion exchanger and to solve the optimization task of the cation installation work for water softening it is necessary to get the diagram of regeneration process by calculation. For this purpose it is required to consider several key questions. One of these questions is to determine the behaviour of the solution strength change diagram coming directly on the charge of the exchanger during regeneration and washing with the account of water cushion availability.

### Formation of the problem and the method of its solution.

The change behaviour of the solution strength coming into the charge layer of the cation exchanger depends on water capacity over the charge (of water cushion) and on the speed of the solution feed. The  $C_p$  - regenerant solution strength, mg/l;  $C$  - salt strength change in the water cushion after being averaged, mg/l;  $\Delta C$  - salt strength change in the

dilution described by the ideal mixing law doesn't describe the real solution strength change coming into the layer of the ion exchanger. That's why it is expedient to consider the combined model to describe the strength change behaviour. According to this model (fig. 1) the change of the capacity taking part in this ideal mixing occurs simultaneously with ideal mixing in which the part of water cushion takes part.

Let's consider the equation of the material balance for the amount of substance coming into the water cushion.

$$q^p \Delta t C_p = C q^p \Delta t + \Delta C W \quad (1)$$

Where  $q^p$  - discharge of regenerant solution, m<sup>3</sup>/h;  
 $\Delta t$  - time interval, an hour;

water cushion, mg/l;  $W$  - water cushion volume taking part in mixing, m<sup>3</sup>.



After transformation and integration from 0 till  $t$  and from primary strength  $C_a$  till  $C$  we finally get:

$$\frac{C}{C_p} = 1 - \left(1 - \frac{C_a}{C_p}\right) \cdot e^{-\frac{q^p}{W}} \quad (2)$$

where  $C_a$  - salt strength in the water cushion before regenerant solution feed.

$W$  volume which takes part in this mixing is a variable quantity

$$W = fh = f(H_{a,n} - x) = f(H_{a,n} - v_1 t) \quad (3)$$

Where  $f$  - ion exchanger square,  $m^2$ ;  $H_{a,n}$  - water cushion layer height, m;  $h$  - layer height in which full mixing occurs, m;  $v_1$  - speed of front movement of maximum strength, m/h.

$$v_1 = v - v_2 \quad (4)$$

Where  $v$  - speed of the solution movement above the ion exchanger, m/h;  $v_2$  - penetration speed of regenerant solution in the volume which takes part in ideal mixing, m/h. This is the same as the quantity on which the speed for the front movement of maximum strength lags from the solution speed above the ion exchanger.

Having written  $aq$  for the part of the regenerant solution taking part in the mixing, the quantity  $v_2$  is determined from the dependence:

$$v_2 = \frac{\alpha q}{f} = \alpha v \quad (5)$$

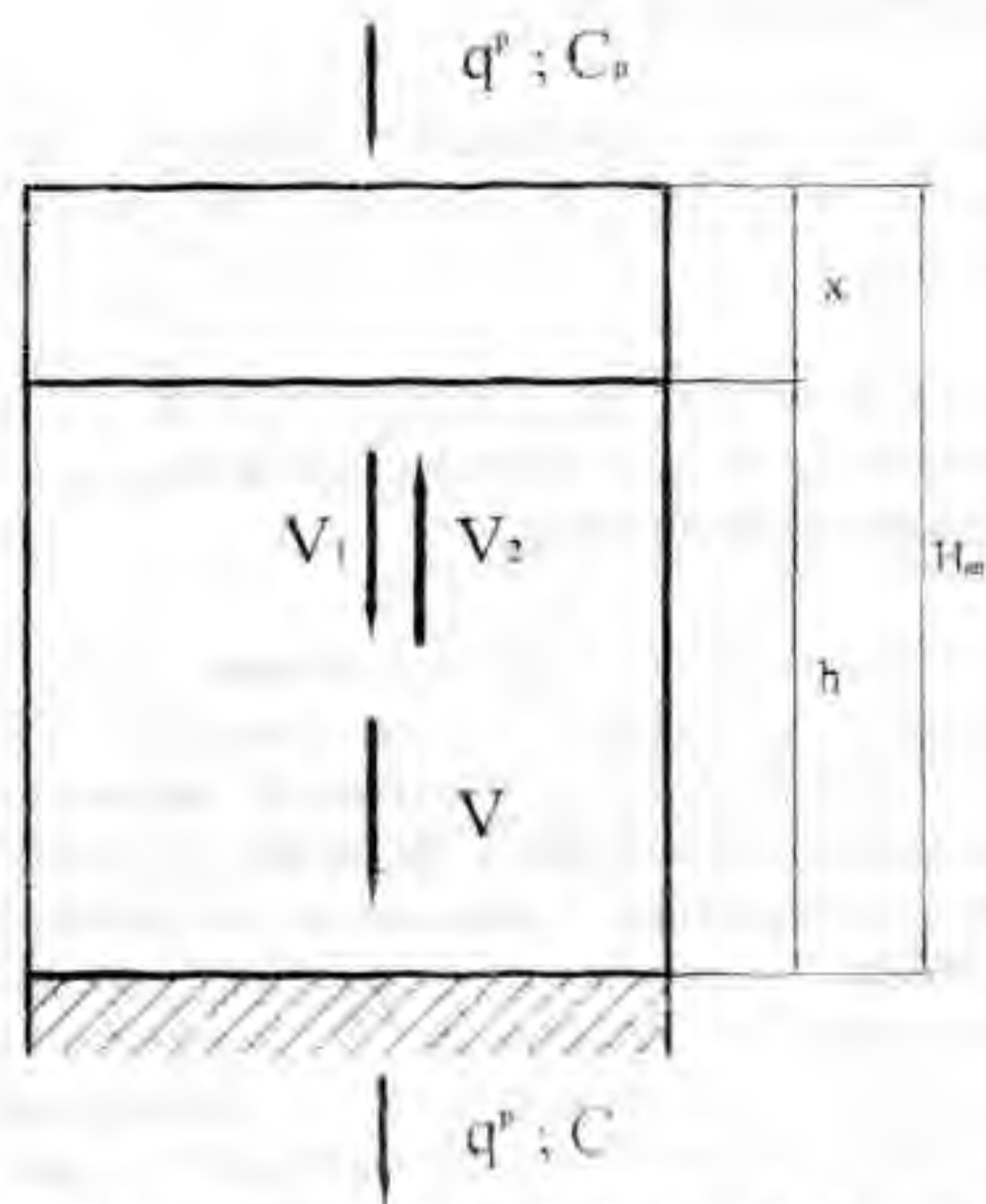
with the account of (4) and (5) we get:

$$v_1 = v \cdot (1 - \alpha) \quad (6)$$

Taking into consideration written above and having written  $m$  for the part of the water cushion volume taking part in the ideal mixing, after substitution and transformation we get:

for the definition of the regenerant solution strength change coming into the ion exchanger layer

$$\frac{C}{C_p} = 1 - \left(1 - \frac{C_a}{C_p}\right) \cdot e^{-\frac{v t}{m H_{a,n} - v t (1 - \alpha)}} \quad (7)$$



**Fig.1** Diagram for the calculation of the combined model of the solution strength change coming into the ion exchanger layer.

For the definition of the washing water strength change coming into the ion exchanger layer

$$\frac{C}{C_p} = \frac{C_a}{C_p} + \left(1 - \frac{C_a}{C_p}\right) \cdot e^{-\frac{v t}{m H_{a,n} - v t (1 - \alpha)}} \quad (8)$$

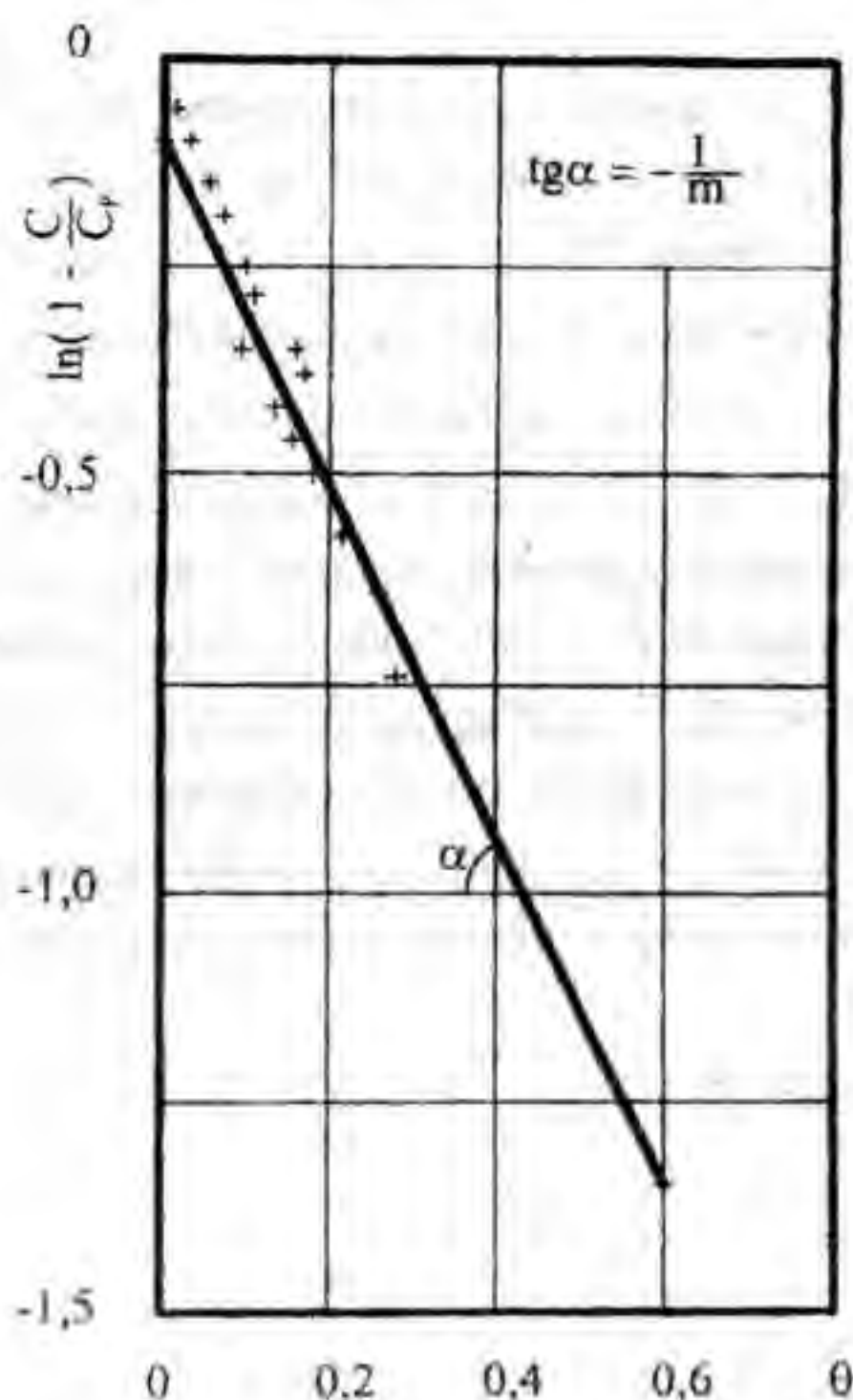
The change of strength coming into the exchanger layer of the solution was controlled according to the total salt content at the exchanger's exit. During the granular charge passing, the model of ideal displacement is used. In this case the lag of the solution strength change at the exchanger's exit on constant quantity occurs without any change of the diagram behaviour. The total salt content was determined according to the specific electric conduction of the solution. The substitution of sodium ion for calcium ion and back insignificantly affects the electric conduction of the solution. The equivalents of the electric conductions of these ions are close: sodium ion 50.1; calcium ion 59.5; magnesium ion 53.0  $m^{-1} g\text{-equ}^{-1} sm^2$  [2].

### Conclusion

On the basis of data received from the industrial sodium-cation exchanger with a diameter of 3.0, with layer height of the charge 2.0 m, with layer height of the water cushion 1.5 m, the most probable value of the coefficient  $\alpha = 0.45$  was received in the equations (7) and (8) which account the part of the solution taking part in ideal mixing. The



regenerant solution was being fed into the exchanger with the discharge of 24 m<sup>3</sup>/h, and he washing water with the discharge of 28 m/h. The part of water cushion volume participating in ideal mixing depends on the speed of the coming liquid and it is accounted by different values of the coefficient:  $m = 0,45$  for equation (7) and  $m = 0,6$  for equation (8). The coefficients are calculated according to the method proposed by V.V.Kafarov graphically [3] (fig.3).



**Fig.3** Determination graph of the coefficient "m" during the feeding into the exchanger of the regenerant solution.

$$\theta = \frac{q^p}{W} \cdot t - \text{dimensionless time}$$

**Fig.2** Changes of the regenerant solution strength coming into the ion exchanger layer during a full cycle of regeneration and washing:

- 1- calculated according to the equation (7);
- 2- calculated according to the equation of the ideal mixing;
- 3- calculated according to the equation (8).

The correspondence of the change behaviour of the solution strength coming into ion exchanger layer (fig. 2) calculated according to the equations (7) and (8) and received by experimental way was estimated according to  $\chi^2$ . Assumed mathematical model with more than 95% accuracy describes the change behaviour of the strength. Passing duration  $t_2$  of maximum strength through the charge is determined from the balance equation of substances and is equal to:

$$t_2 = \frac{1}{q_2^p \cdot C_p} \left\{ \begin{aligned} & W_p C_p - q_1^p \left[ C_p t_1 - (C_p - C_s) \int_0^{t_1} e^{\frac{W_1}{0,45 H_m - v_M (1-0,45)} dt} \right] - \\ & - q_3^p \left[ C_s t_3 + (C_p - C_s) \int_0^{t_3} e^{\frac{0,6 H_m - v_M (1-0,45)}{}} dt \right] \end{aligned} \right\}$$

(9)



where:  $W_p$  - regenerant solution volume,  $m^3$ ;  $q_1^p$  - discharge of the liquid being fed into the exchanger during the period of  $t_1$ ,  $m^3/h$ ;  $q_2^p$  - discharge being fed into the exchanger during the period of  $t_2$ ,  $m^3/h$ ;  $q_3^p$  - discharge being fed into the exchanger during the period of  $t_3$ ,  $m^3/h$ ;  $t_1$  - time necessary to reach maximum regenerant solution strength at the ion exchanger layer's exit, hour;  $t_2$  - time necessary to reach washing water strength, hour;  $v_1$  - liquid movement speed above the ion exchanger layer at the discharge  $q_1^p$ ,  $m/h$ ;  $v_3$  - liquid movement speed above the ion exchanger layer at the discharge  $q_3^p$ ,  $m/h$ .

In the expression

$$\int_0^t e^{\frac{at}{m(H_{an}-v_1(1-\alpha))}} dt$$

after substitution of the variable for  $z = -\frac{a}{b(hl+a)}$

where  $a = -\frac{mH_{an}}{v}$ ;

$$b = (1-\alpha);$$

get integral

$$\frac{a}{b} \cdot e^{\frac{at}{m(H_{an}-v_1(1-\alpha))}} \int_{\frac{1}{b}}^{\frac{a}{b(hl+a)}} \frac{e^z}{z^2} dz$$

which is equal [4]

$$\left. \frac{a}{b} \cdot e^{\frac{at}{m(H_{an}-v_1(1-\alpha))}} \cdot \left( -\frac{e^z}{z} + \ln|z| + \frac{z}{1!} + \frac{z^2}{2 \cdot 2!} + \frac{z^3}{3 \cdot 3!} + \dots + \frac{z^n}{n \cdot n!} \right) \right|_{\frac{1}{b}}^{\frac{a}{b(hl+a)}} \quad (10)$$

The dependences received are used in the program of calculation according to layers for the process of the cation exchanger regeneration.

## References

1. Теоретические основы деминерализации пресных вод/ Сенявин М.М., Рубинштейн Р.Н., Комарова И.В., Смагин В.Н., Ярошевский Д.А., Галкина Н.К., Никашина В.В. - М: «Наука», 1975, - 326 с.
2. Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. Мищенко К.П., Равделя А.А. изд. 7-е исправленное, - Л: «Химия», 1974, - 200 с.
3. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. Изд. 3-е перераб. и доп. - М: «Химия» 1976, - 464 с.
4. Давит Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы - М: «Наука» 1973, - 228 с.

Надійшла до редколегії 8.12.2006



УДК 517.9

Івохін Є.В., к.ф.-м.н., доц., Косинський К.О.,  
аспірант

### Спосіб оцінювання прецедентів на основі нечіткого підходу

Розглянуто метод розв'язання задач прийняття рішень та створення СППР шляхом адаптації рішень - прецедентів. Для пошуку подібних прецедентів використано спосіб вимірювання ступеня співпадіння значень атрибутів (якостей), які визначають прецеденти. Оцінку рівнів відповідності кожного із значень параметрів ситуації базовим показникам проведено на основі застосування нечітких множин та нечіткого відношення переваги.

Ключові слова: СППР, прецедент, нечітке відношення переваги

Ivohin E.V., Ph.D., associate professor,  
Kosynsky K.O., post-graduate

### Method of evaluation of precedents on the basis of fuzzy approach

A method for the tasks of acceptance of decisions and the DMSS creation is considered by adaptation of decisions - precedents. For the search of similar precedents the method of measuring of degree of coincidence is used values of attributes (qualities), which determine precedents. Estimation of levels of accordance of each of values of parameters situations base indexes are conducted on the basis of the use fuzzy sets and fuzzy relation of prevailing.

Key words: DMSS, precedent, fuzzy relation of advantage

E-mail: [ivohin@univ.kiev.ua](mailto:ivohin@univ.kiev.ua), [kosinsky@univ.kiev.ua](mailto:kosinsky@univ.kiev.ua)

Для ефективного використання систем підтримки прийняття рішення (СППР) в динамічних предметних областях в умовах неповноти і невизначеності інформації досить актуальною є розробка підходів та процедур отримання рішень на основі прецедентів. Технологія, яка отримала назву CBR (Case-Based Reasoning, метод прийняття рішень на основі прецедентів), є однією з тих методик, що інтенсивно розвиваються в дослідженнях штучного інтелекту. За визначенням Р. Шенка

[1], CBR – спосіб вирішення нових задач (проблем) шляхом адаптації рішень, які використовувалися раніше в аналогічних ситуаціях – прецедентів. Зрозуміло, що цю ідею можна залучити для розв'язання багатьох задач прийняття рішень та створення прецедентних СППР.

Розглянемо загальні питання. Під поняттям "прецедент" розуміють ситуаційний кортеж (контейнер), що включає проблемну ситуацію та способи її вирішення (рис.1).

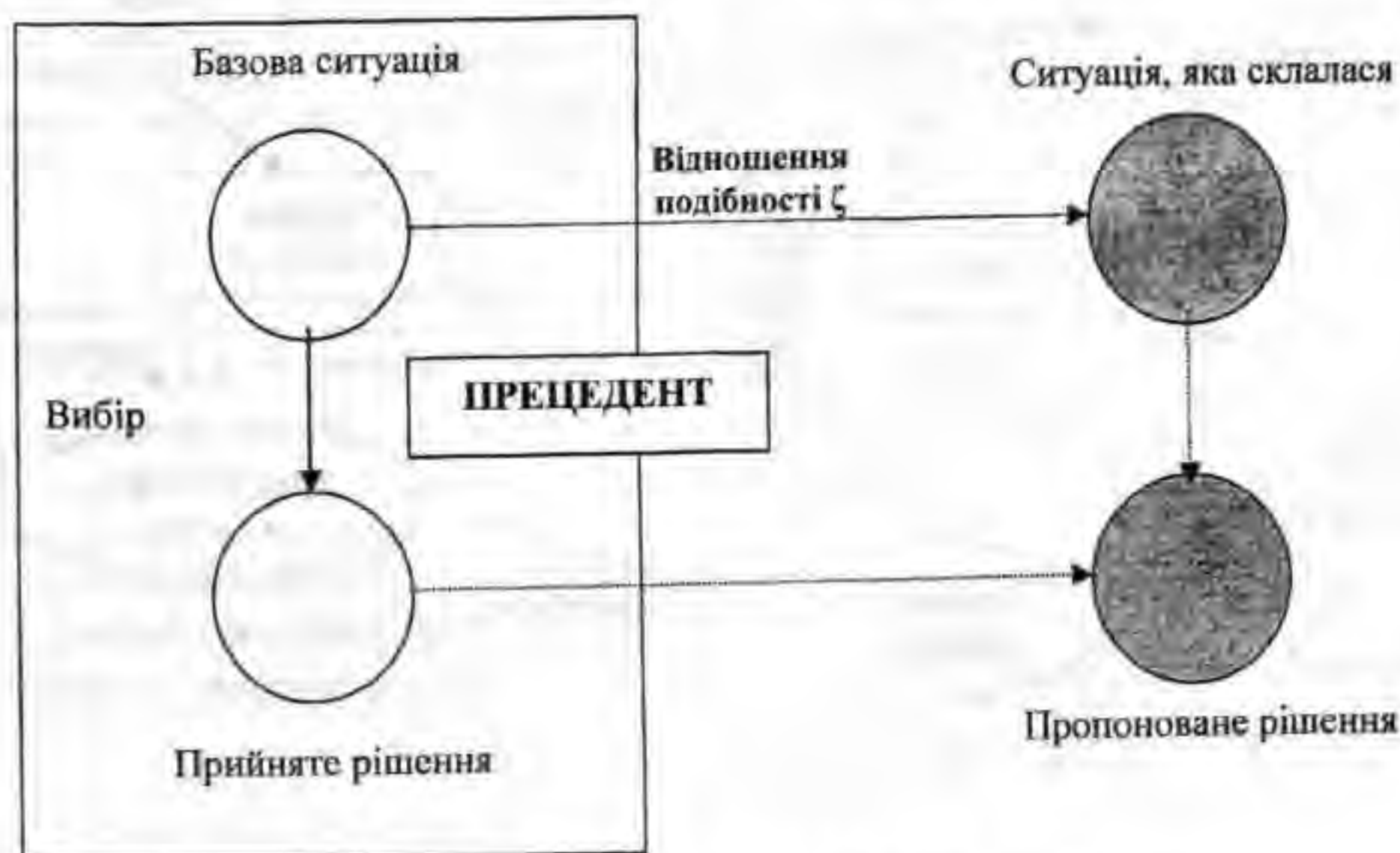


Рис. 1: Прийняття рішень на основі прецеденту



Дослідження довільної ситуації, що потребує прийняття рішення, приводить до необхідності вивчення проблеми за показниками (атрибутами, факторами), що характеризують (вирізняють) ситуацію від інших. Аналіз факторів та їх порівняння з факторами, що накопичено в наявних (збережених) прецедентах, дозволяє забезпечити формування рішення проблеми в готовому вигляді або потребує проведення додаткових дій по адаптації рішень з метою врахування розбіжностей в контексті, що склався, та в базовій ситуації.

Інформація, яка міститься в прецеденті, зберігається в сховищі прецедентів, для чого можуть використовуватися традиційні засоби СУБД, сервери баз знань, багатовимірні бази даних і т.і. Ситуація, для якої був збережений прецедент, вважається опорною або базовою [2].

Якщо в процесі аналізу необхідний прецедент не був знайдений або процес адаптації потребує залучення додаткової інформації, прийняття рішення потребує звернення до бази знань, що містить основні дані про предметну область.

Метод, за допомогою якого будуть здійснюватися обчислення міри подібності (близкості) прецедентів, задається розробниками під час створення CBR – системи. Одним з найбільш популярних методів є пошук найближчого "сусіда", в основі якого лежить

спосіб вимірювання ступеня співпадіння значень атрибутів (якостей), які визначають прецедент.

Таким чином, типовий прецедент представляє собою структуру, що складається з опису проблеми, що характеризує ситуацію на момент активізації, та рішення, що містить список можливих варіантів прийняття рішень, пов'язаних з даною проблемою, а також опис ситуації, яка (можливо) буде мати місце після вибору прецеденту. При цьому, процес функціонування прецедентних СППР, як правило, представляють у вигляді так званого CBR-циклу (рис.2), що складається з чотирьох основних фаз [3]:

- 1) одержання (вибір) із сховища необхідного прецеденту або багатьох прецедентів на основі заданого відношення подібності;
- 2) використання вибраних прецедентів при прийнятті рішення для поставленої задачі;
- 3) перегляд і корекція (адаптація) у випадку необхідності прийнятих раніше у вибраних прецедентах рішень;
- 4) збереження в сховищі прийнятого рішення і ситуації, що склалася, в якості нового прецеденту або відповідні зміни вибраного прецеденту, що може бути корисним в подальшому при вирішенні аналогічних задач.

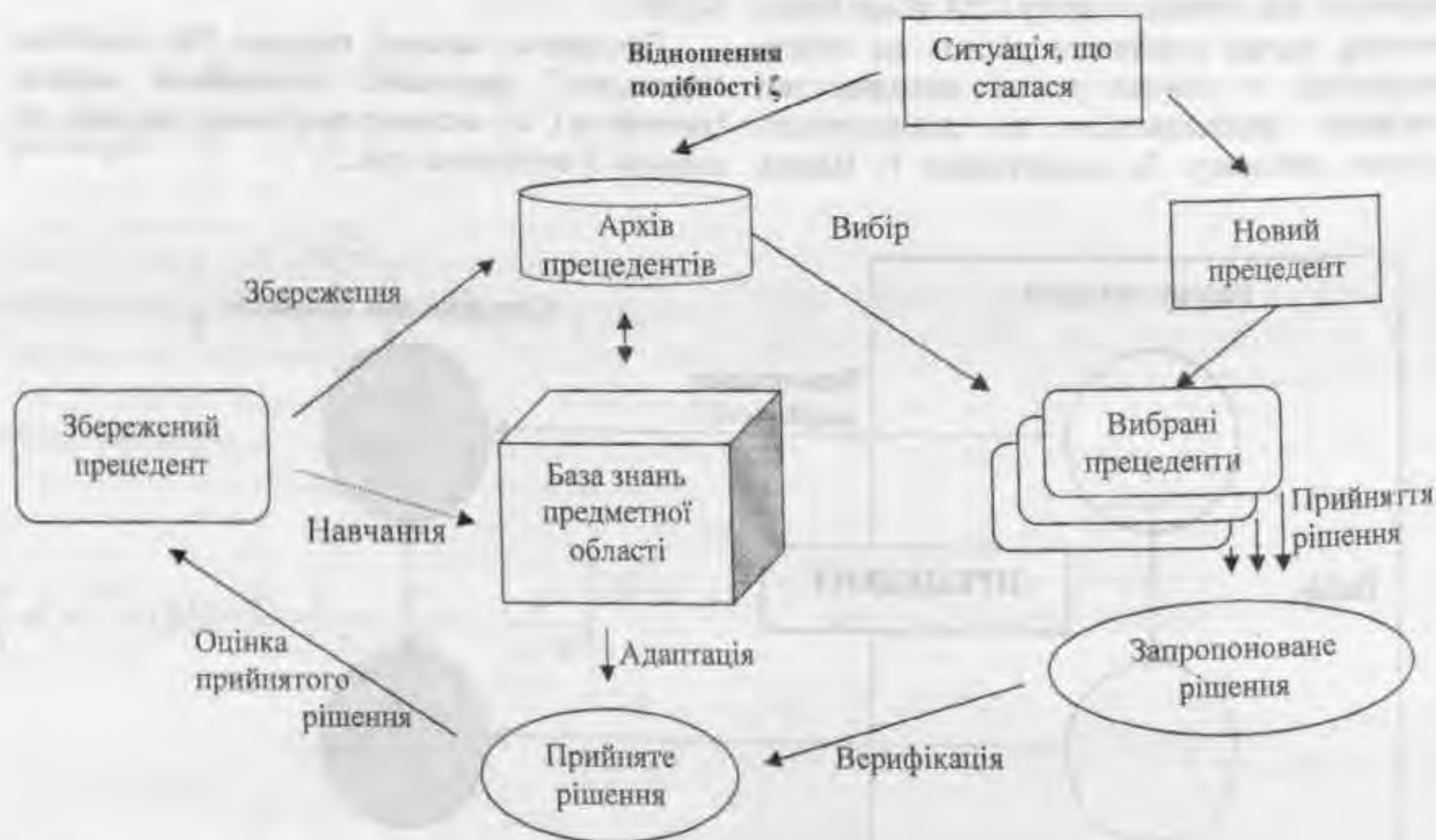


Рис. 2: Фази CBR-циклу



В якості основних ускладнень, що виникають при використанні прецедентного підходу для розробки СППР, можна зазначити:

1. Важкість обліку динамічних факторів.
2. Неможливість представлення на рівні формальних описів прецедентів зв'язку між факторами, наприклад, у вигляді рівнянь.
3. Труднощі обліку обмежень в процесі прийняття рішень, що задаються великою кількістю факторів, а не станів.

Традиційно вказані недоліки послаблюють, розробляючи гібридні системи [4], коли об'єднують механізм прийняття рішень на основі прецедентів з механізмом, заснованим на врахуванні існуючих в ситуаціях правил або обмежень. Вказаний клас гібридних СППР називають сценарно-прецедентними (сценарно-прецедентні CBR-системи).

Розглянемо сценарно-прецедентні СППР. Формальну модель подібних систем будемо визначати аналогічно [5].

Нехай  $A$  - скінченна множина параметрів (факторів), що визначають стан системи,  $A = \{p_1, p_2, \dots, p_m\}$ ,  $X$  - множина значень параметрів, що задається у вигляді  $X = \prod_{i=1, m} X_i$ , де  $X_i, i = \overline{1, m}$  - область визначення  $i$ -того параметра. Конкретні значення, які приймають параметри  $p_i, i = \overline{1, m}$ , позначимо через  $x_i \in X_i, i = \overline{1, m}$ .

**Означення 1.** Реалізованим станом  $C$  системи назвемо сукупність значень параметрів  $C = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ .

**Означення 2.** Ситуацію  $s_j, j = 0, 1, 2, \dots$  в момент часу  $t_j, j = 0, 1, 2, \dots$  визначимо як оцінку значень сукупності факторів системи і відношень між ними:

$$s_j = \langle \bar{C}_j, L_j, t_j \rangle, j = 0, 1, 2, \dots,$$

де  $\bar{C}_j, j = 0, 1, 2, \dots$  - оцінка значень параметрів,  $L_j, j = 0, 1, 2, \dots$  - множина відношень між факторами в момент часу  $t_j, j = 0, 1, 2, \dots$ .

Нехай  $S$  - множина можливих ситуацій,  $R$  - множина можливих рішень.

**Означення 3.** Прецедентом називається пара  $\langle s, r \rangle \in S \times R$ , що складається з ситуації  $s \in S$  і зв'язаного з нею рішення  $r \in R$ .

Довільній ситуації  $s$  можуть відповідати декілька рішень, тобто вважаємо, що два прецеденти  $\langle s, r_1 \rangle$  та  $\langle s, r_2 \rangle$  є різними, якщо  $r_1 \neq r_2$ . Таким чином, в сценарно-прецедентній СППР дані представлені у вигляді множини прецедентів  $M = \{ \langle s_k, r_n^k \rangle, k = 1, 2, \dots, n = \overline{1, n_k} \}$ .

З іншої сторони, якщо ситуація  $s_j$  наближено відповідає ситуації  $s$ , що склалася, і існує прецедент  $\langle s_j, r_j \rangle$ , то можна стверджувати, що  $r_j$  є правдоподібним (наближеним) рішенням для ситуації  $s$ . Ступінь близькості  $s_j$  до  $s$  оцінюється за допомогою величини міри відношення подібності, на основі якої можна обчислити доречність застосування рішення  $r_j$  в ситуації  $s$ .

Як вже було сказано вище, в основі побудови сценарно-прецедентних СППР (і CBR-систем взагалі) лежить метод пошуку подібних прецедентів за схемою, основна ідея якої полягає у визначенні в просторі параметрів системи ситуацій, найближчих в деякому розумінні до базової.

Для оцінки відстані між значеннями параметрів базової ситуації та поточними значеннями, що визначають наближений варіант ситуації, вводиться метрика, в якості якої досить часто використовується звичайна або зважена за параметрами евклідова норма. За умов великої кількості параметрів можна констатувати, що така методика не дозволяє ефективно враховувати усі особливості ситуації прийняття рішення. Одним з підходів, що дозволив би більш точно оцінювати близькість прецедентних ситуацій і, як наслідок, зменшити помилку у прийнятті рішення на основі прецедентів, є багатокритеріальний підхід з використанням нечітких множин та нечітких відношень [6].

**Означення 4.** Нечіткою множиною  $A$  в універсальному просторі  $X$  називається сукупність пар виду  $\{(x, \mu_A(x))\}$ , де  $x \in X$ , а  $\mu_A(x): X \rightarrow [0, 1]$  - функція належності нечіткої множини  $A$ .

**Означення 5.** Нечітким відношенням  $F$  на універсальному просторі  $X$  називається нечітка множина декартового добутку  $X \times X$ , що характеризується функцією належності  $\mu_F(x, y): X \times X \rightarrow [0, 1]$ .

Будемо оцінювати ступінь близькості (подібності) ситуації  $s_j$  до базової ситуації  $s$  за допомогою значень міри, обчислення якої



проведемо на основі оцінок рівнів відповідності (належності) кожного із значень параметрів поточної ситуації базовим показникам. Довільну ситуацію  $s_j$  будемо описувати нечіткою множиною  $A = \{(x_1, \mu(x_1)), \dots, (x_m, \mu(x_m))\}$ , де множина значень  $C = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$  визначає реалізований стан системи,  $\mu(x_i), i = \overline{1, m}$  - величини мір відповідності значення факторів базовим значенням,  $0 \leq \mu(x_i) \leq 1, i = \overline{1, m}$ , які можна розглядати як рівні належності елементів  $x_i, i = \overline{1, m}$  нечіткій множині  $A$ .

Без обмеження загальності покладемо  $X_i \subset R_+^1, i = \overline{1, m}$ . Позначимо  $h$  - вектор значень з  $R_+^m$ ,  $A = \{A_1, A_2, \dots, A_I\}$  - сукупність нечітких множин  $A_k, k = \overline{1, I}$  в  $R_+^m$ . Поставимо задачу знаходження нечіткої множини з  $A$ , яка є найближчою до  $h$  у розумінні нечіткого відношення переваги " $<$ ". Формально будемо його позначати  $G$ .

Для кожної множини  $A_i, i = \overline{1, I}$ , обчислимо нечітку відстань  $\rho_i = \rho(h, A_i), i = \overline{1, I}$ , між чітким елементом  $h$  та нечіткими елементами сукупності множин  $A$ . Нечітке відношення переваги  $G$  сформулюємо по аналогії з введенням Орловським [6] нечітким відношенням  $g(a, b)$  для довільних нечітких елементів  $a, b \in R_+^m$ : якщо  $\mu_g(a, b) > 0$ , то кажуть, що  $a < b$  із степенем  $g(a, b) = \mu_g(a, b)$ .

Нехай  $A, B$  - довільні нечіткі множини з  $A$ . Тоді  $G(A, B) = \mu_G(A, B)$  розраховується за формулою

$$G(A, B) = \sup_{p, q \in R_+^m} \min\{\mu_A(p), \mu_B(q), \mu_g(p, q)\},$$

і, як було відмічено вище, нечітка множина  $A$  "менше" нечіткої множини  $B$  із степенем  $G(A, B)$ , якщо  $G(A, B) > 0$ .

Таким чином, за допомогою нечіткого відношення переваги  $G(A, B)$  можна порівняти відстань між  $h$  і  $A_k$  та між  $h$  і  $A_j, A_k, A_j \in A$ . Це надає можливість визначити "найближчий" до  $h$  елемент  $A^*$  з  $A$ ,  $A^*$  - нечітка множина невідоміючих альтернатив з  $A$ , функція належності якої описується виразом:

$$\mu_{A^*}(A_k) = \min_{w=1, I} (1 - \mu_T(A_k, A_w)) = 1 - \max_{w=1, I} \mu_T(A_k, A_w),$$

$$k = \overline{1, I},$$

де через  $T$  позначено нечітке відношення строгої переваги, що відповідає  $G$

$$\mu_T(A, B) = \begin{cases} \mu_G(A, B) - \mu_G(B, A), & \mu_G(A, B) \geq \mu_G(B, A) \\ 0, & \mu_G(A, B) < \mu_G(B, A) \end{cases},$$

$$A, B \in A.$$

Використання введеного нечіткого відношення переваги  $G$  надає можливість ефективно оцінювати поточну ситуацію в системі та знаходити прецеденти, що забезпечують доречність застосування відповідних рішень в ситуації, що склалася.

#### Список використаних джерел

1. Джексон П. Введение в экспертные системы. - М. - Вильямс. - 2001. - 624 с.
2. Нечипоренко О.А. Использование технологии Case-Based Reasoning в проектировании программных систем // Перспективные информационные технологии и информационные среды. - Таганрог. - 2002. - №3. - с. 27-32.
3. Aamodi A., Plaza E. Case-Based Reasoning: foundational issues, methodological variations, and system approaches // AI Communications. - 1994. - Vol. 7. - №1. - pp. 39-59.
4. Main J., Dillon T.S. A hybrid case-based reasoner for footwear design // Case-Based Reasoning Research and Development - Lecture Notes Artificial Intelligence. - 1999. - Vol. 1650. - pp. 499-509.
5. Шерстюк В.Г. Формальная модель гибридной сценарно-прецедентной СППР//Информационно-управляющие комплексы и системы.- 2004.- №1.- С.114-122.
6. Орловский С.А. Проблемы принятия решения при нечеткой исходной информации. - М.; Наука, 1981. 206 с.

Надійшла до редколегії 21.02.2007



УДК 519.21

Іксанов О.М., канд. фіз.-мат. наук, доцент

## Про супремум збуреного випадкового блукання

Для функцій  $b$ , що правильно змінюються на нескінченності з додатним показником, наводяться умови скінченності  $b$ -моментів деяких операторів, що діють на збуреному випадковому блуканні. Також отримано твердження про поведінку правого хвоста розподілу супремума збуреного випадкового блукання, що покращує нещодавній результат Арамана та Глінна.

**Ключові слова:** збурене випадкове блукання, моменти, правильна зміна

Iksanov O.M., cand. phys.-math. sci, ass. professor

## On the supremum of a perturbed random walk

We provide a number of moment results for certain operators acting on perturbed random walks. Also we study the tail behaviour of distribution of the supremum of a perturbed random walk. Our assertion improves on a recent result by Araman and Glynn.

**Key words:** perturbed random walk, moments, regular variation

\*E-mail: [iksan@unicyb.kiev.ua](mailto:iksan@unicyb.kiev.ua)

### 1. Формулювання результатів.

Нехай  $\{(X_n, Y_n) : n = 1, 2, \dots\}$  – незалежні копії випадкового вектора  $(X, Y)$  з

$$P\{X = 0\} < 1. \quad (1)$$

Варто зазначити явно, що незалежність  $X$  та  $Y$  дозволяється, але не вимагається. Покладемо

$$S_0 := 0, \quad S_n := X_1 + X_2 + \dots + X_n, \quad n = 1, 2, \dots \text{ та}$$

$$T_n := S_n + Y_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad T_* := \sup_{n \geq 0} T_n.$$

Послідовність  $\{T_n : n = 0, 1, \dots\}$  природно назвати збуреним випадковим блуканням.

Нехай  $b : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$  – вимірна, локально обмежена функція, що правильно змінюється на  $\infty$  з показником  $\beta > 0$ . Введемо позначення

$$A(x) := \int_0^x P\{-X > y\} dy, \quad x > 0, \quad x^+ = \max(x, 0),$$

$$\tau := \inf\{n \geq 1 : S_n < 0\}, \quad \sigma := \inf\{n \geq 1 : S_n \geq 0\}.$$

**Теорема 1.1.** Наведені нижче умови еквівалентні.

(а)  $Eb(T_*) < \infty$ ;

(б)  $\int_0^\infty \frac{xb(x)}{A(x)} P\{Y \in dx\} < \infty$ ,  $\int_0^\infty \frac{xb(x)}{A(x)} P\{X \in dx\} < \infty$  та

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_n = -\infty \text{ м.н.}; \quad (2)$$

(в)  $\int_0^\infty \frac{xb(x)}{A(x)} P\{\sup_{1 \leq n \leq \tau-1} T_n \in dx\} < \infty$  та виконується (2).

Кожна з цих умов є достатньою для

(г)  $Eb(\ln^+ \sum_{n=0}^\infty e^{T_n}) < \infty$ , а якщо розподіл  $\sum_{n=0}^\infty e^{T_n}$  не-вироджений, то і необхідною.

**Зауваження 1.1.** Для випадку  $Y = 0$  м.н. еквівалентність пунктів (а)-(в) встановлена у лемі 3.5 [1]. Цитована лема також стверджує, що умови скінченності  $Eb(S_n)|_{[0, \infty)} < \infty$  еквівалентні всім іншим умовам тієї лемі. Оскільки умови скінченності  $Eb(T_n^+)|_{[0, \infty)} < \infty$  не є еквівалентними умовам теореми 1.1, вони наводяться окремо.

**Твердження 1.1.** Припустимо, що виконується (2) та

$$P\{X > 0\} > 0 \quad (3)$$

Умови  $\int_0^\infty \frac{xb(x)}{A(x)} P\{X \in dx\} < \infty$  та  $Eb(Y^+) < \infty$  є не-

обхідними та достатніми для  $Eb(T_n^+)|_{[0, \infty)} < \infty$ .

Наступний результат є істотним посиленням теореми 3 [2]. Надалі запис  $f(x) \sim g(x)$  означає

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{g(x)} = 1.$$

**Теорема 1.2.** Припустимо, що знайдуться додатні  $\beta$  та  $\varepsilon$  такі, що



$$Ee^{bY} < 1, Ee^{(B+K)Y} < \infty,$$

Наведені нижче умови (4) та (5) еквівалентні:

$$P\{Y > x\} \sim e^{-bx} L(e^x), \quad (4)$$

де  $L$  – функція, що повільно змінюється на  $+\infty$ ,

$$P\{T_* > x\} = (1 - Ee^{bX})^{-1} e^{-bx} L(e^x). \quad (5)$$

**Зауваження 1.2.** Відома теорема Бреймса стверджує: якщо  $U$  та  $V$  – невід’ємні випадкові величини такі, що  $P\{U > x\}$  правильно змінюється на  $\infty$  з показником  $-\alpha$ ,  $\alpha \geq 0$ , та  $EV^{a+\gamma} < \infty$  для деякого  $\gamma > 0$ , то

$$P\{UV > x\} = EV^a P\{U > x\}. \quad (6)$$

Відомо, що у деяких випадках, серед яких  $P\{U > x\} = \text{const} \cdot x^{-a}$ , для виконання (6) достатньо умови  $EV^a < \infty$  (див. [3]). Це пояснює появу у теоремі 1.2 додаткової, у порівнянні з теоремою 3 [2], умови  $Ee^{(B+K)Y} < \infty$ .

## 2 Доведення.

Надалі без обмеження загальності можемо вважати, що  $b$  не спадає та, згідно з лемою 1(a) [4]  $b(0) = 0$ , та для деякого  $c \in (0, \infty)$  та всіх невід’ємних  $x$  та  $y$  виконується нерівність

$$b(x+y) \leq c(b(x) + b(y)). \quad (7)$$

*Доведення теореми 1.1.*

(б)  $\Leftrightarrow$  (г) випливає з теореми 1.1 [1].

Враховуючи зауваження 1.1, достатньо розглянути випадок

$$P\{Y = 0\} < 1. \quad (8)$$

Згадаємо один раз факт, необхідний для доведення імплікацій (а)  $\Rightarrow$  (б), (в): за теоремою 2.1 [5] скінченності  $T_*$  та умови (1) випливає (2).

(б)  $\Rightarrow$  (а) випливає з імплікації (б)  $\Rightarrow$  (г) та нерівності  $\ln^+ \sum_{n=0}^{\infty} e^{I_n} \geq \ln^+ \sup_{n \geq 0} e^{I_n} = \ln^+ e^{I_*} = T_*$ .

(а)  $\Rightarrow$  (б). Припустимо спочатку, що випадкове блукання  $\{S_n\}$  має недодатні кроки. Зазначимо, що внаслідок (1) ці кроки не вироджені в нулі. З леми 3.4 [1] випливає така імплікація

$$Eb(T_*) < \infty \Rightarrow \int_0^{\infty} \frac{x b(x)}{A(x)} P\{Y \in dx\} < \infty. \quad (9)$$

Для  $k = 1, 2, \dots$  визначимо  $X_k^* := X_k \wedge 0$ ,  $S_0^* := 0$ ,  $S_k^* := X_1^* + \dots + X_k^*$ . Оскільки

$$Eb((\sup_{n \geq 0} (S_n^* + Y_{n+1}))^+) \leq Eb((\sup_{n \geq 0} (S_n + Y_{n+1}))^+),$$

то згідно з (9) перша нерівність у (б) виконується.

Покладемо  $M := \sup\{k \geq 0 : S_k = \sup_{n \geq 0} S_n\}$ . Виконуються нерівності

$$\infty > Eb(T_*) \geq Eb((S_M + Y_{M+1})^+) \geq$$

$$\geq \sum_{m=0}^{\infty} Eb((S_m + Y_{m+1})^+) \mathbb{I}_{\{M \geq m\}} =$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} Eb((S_m + Y_{m+1})^+) \mathbb{I}_{\{S_m \geq S_n, k \geq 0, m \leq k \leq S_{m+1} - S_m\}}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \int Eb((S_m + x)^+) \mathbb{I}_{\{S_m \geq S_n, k \geq 0, m \leq k \leq S_{m+1} - S_m\}}$$

$$\times P\{Y_{m+1} \in dx, S_i \leq S_m, i \geq m+1\} \geq$$

$$\geq \sum_{m=0}^{\infty} \int Eb((S_m + x)^+) \mathbb{I}_{\{S_m \geq S_n\}} P\{Y_1 \in dx, S_k \geq 0, k \geq 1\} =$$

$$= \int Eb((\sup_{n \geq 0} S_n + x)^+) \mathcal{P}\{Y_1 \in dx, S_k \leq 0, k \geq 1\}.$$

Покажемо, що знайдуться  $x \in R$  такі, що

$$P\{Y_1 > x, S_k < 0, k \geq 1\} > 0. \quad (10)$$

Припустимо, що ця ймовірність дорівнює 0. Тоді  $\theta := P\{Y_1 > x, S_k < 0, k \geq 1\} \sigma(X_1, Y_1) = 0$  м.н. Але

$$\theta = \mathbb{I}_{\{Y_1 > 0\}} P\{Y_1 > x \mid \sigma(X_1, Y_1)\} \times$$

$$\times P\{S_k - S_1 < -S_1, k \geq 2 \mid \sigma(X_1, Y_1)\} >$$

$$\geq \mathbb{I}_{\{Y_1 > 0\}} P\{Y_1 > x \mid \sigma(X_1, Y_1)\} P\{S_k < 0, k \geq 1\} \text{ м.н.}$$

Права частина цієї нерівності є додатною з додатною ймовірністю. Дійсно, якщо б перший множник м.н. дорівнював нулеві, то це суперечило б умові (2). Другий множник є додатним з додатною ймовірністю принаймні для деяких  $x$  згідно з (8). Третій множник є додатним внаслідок (2). Отже, нерівність (10) встановлена.

Таким чином, знайдеться  $x_0 \in R$  таке, що

$$Eb((\sup_{n \geq 0} S_n + x_0)^+) < \infty. \text{ Тому}$$

$$Eb(\sup_{n \geq 0} S_n) < \infty. \quad (11)$$



Дійсно, якщо  $x_0 \geq 0$ , то це випливає з нерівності  $b(\sup_{n \geq 0} S_n) \leq b((\sup_{n \geq 0} S_n + x_0)^+)$ . Якщо  $x_0 < 0$ , то можна скористатися тим, що  $\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{b(x - x_0)}{b(x)} = 1$ , та нерівністю  $\sup_{n \geq 0} S_n \leq (\sup_{n \geq 0} S_n + x_0)^+ - x_0$ . За лемою 3.5 [1] друга нерівність у (б) випливає з (11).

(а)  $\Leftrightarrow$  (в). Розглянемо моменти зупинки

$$N_0 := 0, N_{i+1} := \inf\{n > N_i : S_n < S_{N_i}\}, i = 0, 1, \dots$$

М.н. скінченність  $N_i$  гарантується умовою (2). Зазначимо, що  $\tau = N_1$ . Для  $k = 0, 1, \dots$  покладемо

$$V_k := \sup\{S_{N_k} + Y_{N_k+1}, \dots, S_{N_{k+1}-1} + Y_{N_{k+1}}\};$$

$$\tilde{X}_{k+1} := X_{N_k+1} + X_{N_k+2} + \dots + X_{N_{k+1}-1}; \tilde{S}_0 := 0,$$

$$\tilde{S}_{k+1} := \tilde{X}_1 + \dots + \tilde{X}_{k+1};$$

$$\tilde{Y}_{k+1} := \sup\{Y_{N_k+1}, \dots, X_{N_k+1} + \dots + X_{N_{k+1}-1} + Y_{N_{k+1}}\}.$$

Випадкові вектори  $\{(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_n) : n = 1, 2, \dots\}$  - незалежні копії  $(\tilde{X} := S_\tau, \tilde{Y} := \sup_{0 \leq i \leq \tau-1} (S_i + Y_{i+1}))$ . Крім того,

$$V_k := S_{N_k} + \tilde{Y}_{k+1} = \tilde{S}_k + \tilde{Y}_{k+1} \text{ та}$$

$$T_* = \sup_{n \geq 0} T_n = \sup_{k \geq 0} V_k = \sup_{n \geq 0} (\tilde{S}_n + \tilde{Y}_{n+1}).$$

За вже доведеною еквівалентністю (а)  $\Leftrightarrow$  (б)  $Eb(T_*) < \infty$  тоді і тільки тоді, коли

$$\infty > \int_0^\infty \frac{x b(x)}{A(x)} P\{\tilde{Y} \in dx\} = \int_0^\infty \frac{x b(x)}{A(x)} P\{\sup_{0 \leq n \leq \tau-1} T_n \in dx\};$$

$$\int_0^\infty \frac{x b(x)}{A(x)} P\{\tilde{X} \in dx\} < \infty \text{ та } \lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{S}_n = -\infty \text{ м.н.}$$

За по-будовою  $P\{\tilde{X} < 0\} = 1$ . Тому друга та третя умови тривіально виконуються. Теорема 1.1 доведена.

**Доведення твердження 1.1.** Виконується формальна рівність

$$Eb(T_\sigma^+) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} = \sum_{k=1}^\infty Eb((S_k + Y_{k+1})^+) \mathbb{I}_{\{S_1 < 0, \dots, S_k < 0, S_k > 0\}} = \int_{\mathbb{R}} Eb((S_\sigma + x)^+) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} P\{Y \in dx\}.$$

Нехай виконуються умови  $J < \infty$  та  $Eb(Y^+) < \infty$ . За лемою 3.5 [1] перша з них разом з (2) гарантує  $Eb(S_\sigma) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} < \infty$ . Тому  $Eb(T_\sigma^+) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} \leq$

$$\leq cEb(S_\sigma) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} + cP\{\sigma < \infty\}Eb(Y^+) < \infty.$$

З іншого боку, якщо  $\infty > Eb(T_\sigma^+) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}}$ , то

$$\begin{aligned} \infty &> \int_{\mathbb{R}} Eb((S_\sigma + x)^+) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} P\{Y \in dx\} \geq \\ &\geq \int_{(0, \infty)} Eb(S_\sigma + x) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} P\{Y \in dx\} \geq \\ &\geq P\{\sigma < \infty\}Eb(Y^+), \end{aligned}$$

Внаслідок (3)  $P\{\sigma < \infty\} > 0$ . Тому  $Eb(Y^+) < \infty$ . Крім того, згідно (8) знайдеться  $x_0 \in \mathbb{R}$  таке, що  $Eb((S_\sigma + x_0)^+) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} < \infty$ . Таким же чином, як наприкінці доведення (а)  $\Rightarrow$  (б) теореми 1.1, перевіряємо, що  $Eb(S_\sigma) \mathbb{I}_{\{\sigma < \infty\}} < \infty$ . За лемою 3.5 [1]  $J < \infty$ . Твердження 1.1 доведене.

Введемо позначення  $M := e^Y$ ,  $\Pi_0 := 1$  та при  $n = 1, 2, \dots$   $M_n := e^{Y_n}$ ,  $Q_n := e^{Y_n}$ ,  $\Pi_n := e^{\tilde{S}_n}$ ,  $F_n := \sigma((M_k, Q_k) : k = 1, n)$ . Позначимо також через  $F(x)$  функцію розподілу  $Q_1$ .

**Доведення теореми 1.2.**

(4)  $\Rightarrow$  (5). За припущенням  $1 - F(x)$  правильно змінюється на  $\infty$  з показником  $-\beta$ . Потрібно довести  $P\{e^{J_*} > x\} = P\{\sup_{n \geq 0} \Pi_n Q_{n+1} > x\} =$

$$= (1 - EM^\beta)^{-1} (1 - F(x)).$$

Перш за все зазначимо, що припущення теореми гарантують  $E \ln M \in [-\infty, 0)$  та  $E \ln^+ Q < \infty$ . Тому випадкова величина  $e^{J_*}$  є м.н. скінченною за теоремою 2.1 [5]. Оскільки  $\frac{P\{e^{J_*} > x\}}{1 - F(x)} =$

$$= 1 + \sum_{n=1}^\infty E \mathbb{I}_{\{\frac{\max_{0 \leq k \leq n} \Pi_k Q_{k+1}}{\Pi_n} \geq 1\}} \frac{P\{\Pi_n Q_{n+1} > x | F_n\}}{1 - F(x)} =$$

$$= 1 + \sum_{n=1}^\infty E \mathbb{I}_{\{\frac{\max_{0 \leq k \leq n} \Pi_k Q_{k+1}}{\Pi_n} \geq 1\}} \frac{1 - F(x / \Pi_n)}{1 - F(x)}, \text{ то подвійне}$$

застосування леми Фату з урахуванням того, що індикатор прямує до 1 при  $x \rightarrow \infty$ , доводить

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{P\{e^{J_*} > x\}}{1 - F(x)} \geq 1 + \sum_{n=1}^\infty E \Pi_n^\beta = \frac{1}{1 - EM^\beta}.$$

З іншого боку,  $\frac{P\{e^{J_*} > x\}}{1 - F(x)} \leq 1 + \sum_{n=1}^\infty E \frac{1 - F(x / \Pi_n)}{1 - F(x)}$



За теоремою Бреймена (див. зауваження 1.2)

$$\lim_{x \rightarrow \infty} E \frac{1 - F(x / \Pi_n)}{1 - F(x)} = E \Pi_n^\beta,$$

Тому, якщо існує послідовність  $\{u_n : n=1,2,\dots\}$  така, що для великих  $x$  та кожного  $n=1,2,\dots$

$$E \frac{1 - F(x / \Pi_n)}{1 - F(x)} \leq u_n \text{ та } \sum_{n=1}^{\infty} u_n < \infty, \text{ то за теоремою}$$

Лебега про мажоровану збіжність отримаємо

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{P\{e^{I^*} > x\}}{1 - F(x)} \leq 1 + \sum_{n=1}^{\infty} E \Pi_n^\beta = \frac{1}{1 - EM^\beta},$$

і імплікація, що розглядається, буде доведена. В умовах теореми знайдеться  $\delta \in (0, \min(\beta, \varepsilon))$  таке, що  $EM^{\beta+\delta} < 1$ . Зазначивши, що на проміжку  $(0, \beta + \varepsilon)$  функція  $x \rightarrow EM^x$  є опуклою, робимо висновок, що також  $EM^{\beta-\delta} < 1$ . Для цього  $\delta$  та довільних додатних  $A_1$  та  $A_2$  знайдуться додатні  $x_1$  та  $x_2$  такі, що при  $x \geq x_1$

$$x^{\beta+\delta} (1 - F(x)) \geq 1/A_1,$$

та при  $x \geq x_2 = ux \geq x_1$

$$\frac{1 - F(ux)}{1 - F(x)} \leq A_2 \max(u^{-\beta+\delta}, u^{-\beta-\delta}).$$

Оскільки при  $x \geq x_0 := \max(x_1, x_2, 1)$

$$E \frac{1 - F(x / \Pi_n)}{1 - F(x)} I_{\{\Pi_n > x/x_0\}} \leq \frac{x_0^{\beta+\delta} E \Pi_n^{\beta-\delta}}{x^{\beta+\delta} (1 - F(x))} <$$

$$\leq A_1 x_0^{\beta+\delta} E \Pi_n^{\beta+\delta} \text{ та } E \frac{1 - F(x / \Pi_n)}{1 - F(x)} I_{\{\Pi_n \leq 1/x_0\}} <$$

$$A_2 E \max(\Pi_n^{\beta-\delta}, \Pi_n^{\beta+\delta}) \leq A_2 (E \Pi_n^{\beta-\delta} + E \Pi_n^{\beta+\delta}),$$

то можемо вибрати

$$u_n \approx \text{const}(\max(E \Pi_n^{\beta-\delta}, E \Pi_n^{\beta+\delta}))^{1/n}.$$

(5)  $\Rightarrow$  (4). Скористаємося рівністю розподілів

$$e^{I^*} = \max(Q_1, M_1 \max(Q_2, M_2 Q_3, M_2 M_3 Q_4, \dots))$$

$$= \max(Q_1, M_1 R),$$

де в.в.  $R := \max(Q_2, M_2 Q_3, M_2 M_3 Q_4, \dots)$  не залежить від  $(Q_1, M_1)$  та має такий же розподіл як  $e^{I^*}$ . З одного боку,

$$P\{e^{I^*} > x\} \leq 1 - F(x) + P\{M_1 R > x\},$$

$$\text{звідки } \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1 - F(x)}{P\{e^{I^*} > x\}} \geq 1 - \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{P\{M_1 R > x\}}{P\{e^{I^*} > x\}} =$$

$$= 1 - EM^\beta, \quad (12)$$

де остання рівність випливає з теореми Бреймена. З іншого боку,  $P\{e^{I^*} > x\} =$

$$= 1 - F(x) + E I_{\{Q=1\}} P\{e^{I^*} > x/M \mid \sigma(M, Q)\}.$$

Тому за лемою Фату

$$\lim_{x \rightarrow \infty} (1 - \frac{1 - F(x)}{P\{e^{I^*} > x\}}) \geq EM^\beta. \quad (13)$$

Об'єднання (12) та (13) дає

$$1 - F(x) - P\{e^{I^*} > x\} (1 - EM^\beta) \sim x^{-\beta} L(x), \quad (3)$$

що еквівалентне (4). Теорема 1.2 доведена.

### Список використаних джерел

1. Alsmeyer G., Iksanov A. A log-type moment result for perpetuities and its counterpart for the intrinsic martingale in the supercritical branching random walk, preprint, 2006.
2. Araman, V. F., Glynn, P. W. Tail asymptotics for the maximum of perturbed random walk // Ann. Appl. Prob. -2006. - V. 16, № 3. -P. 1411-1431.
3. Denisov, D., Zwart, B. On a theorem of Breiman and a class of random difference equations. Technical report 2005-039, Eurandom, Netherlands, 2005.
4. Alsmeyer G. On generalized renewal measures and certain first passage times // Ann. Prob. -1992. -V. 20, № 3. - P. 1229-1247.
5. Goldie, C. M., Maller, R. A. Stability of perpetuities // Ann. Prob. - 2000. - V. 28, № 3. - P. 1195-1218.

Надійшла до редколегії 18.11.2006



УДК 519.7

Карнаух\* Т.О., к. ф.-м. н.

## Використання $R$ -систем для задання фрактальних множин

Розглядається поняття  $R$ -системи та методи побудови  $R$ -систем для геометричних фракталів

Ключові слова: фрактальна множина,  $R$ -система,  $R$ -перетворювач.

\*E-mail: tkarnaukh@unicyb.kiev.ua

Існують [1-3] різні способи задання фракталів, наприклад, геометричні перетворення ( $L$ -системи, "черепашача" графіка),  $IFS$ -системи,  $R$ - і  $R^*$ -перетворювачі. В [4] для задання фракталів пропонувалося використовувати  $R$ -системи, які поєднують у собі властивості граматики і  $R^*$ -перетворювача. Процес виводу в  $R$ -системі є послідовним уточненням координат результуючої точки простору. З програмістської точки зору за  $R$ -системою можна одержати алгоритм побудови скінченних наближень множини точок. Дана робота присвячена техніці побудови  $R$ -систем за множинами.

$R$ -система — це п'ятірка  $G = (n, V, B, P, S_0)$ , де  $n, n \in \mathbb{N}_+$ , — розмірність системи;  $V$  — множина нетерміналів;  $B, B \subseteq R^n$ , — скінченна множина, причому  $B \cap V = \emptyset$ ;  $P, P \subseteq V \times B \times (V \times (R_+)^n)^+$ , — скін-

T.O. Karnaukh\*, Ph.D.

## Defining fractal sets with $R$ -systems

The notion of  $R$ -system are introduced and some approaches to defining fractal sets with  $R$ -systems are discussed.

Key Words: fractal set,  $R$ -system,  $R$ -transducer.

ченна множина продукцій,  $R_+ = (0; +\infty)$ ,  $S_0, S_0 \in V$ , — початковий символ.

Відношення  $\rightarrow$  вивідності в  $R$ -системі  $G$  задано на  $R^n \times (V \times (R_+)^n)^+$  так: нехай  $(S \rightarrow b(S_1, k_1) \dots (S_m, k_m)) \in P$ ,  $b = (b_1, \dots, b_n)$ ,  $c = (c_1, \dots, c_n)$ ,  $x' = x + (c_1 \cdot b_1, \dots, c_n \cdot b_n)$ ,  $k_i = (k_{i,1}, \dots, k_{i,n})$ ,  $k_i' = (c_1 \cdot k_{i,1}, \dots, c_n \cdot k_{i,n})$ ,  $i = \overline{1, m}$ . Тоді  $(x, \xi_1(S, c) \xi_2) \rightarrow (x', \xi_1(S_1, k_1) \dots (S_m, k_m') \xi_2)$ . Вивід — це послідовність (можливо, нескінченна) елементів множини  $R^n \times (V \times (R_+)^n)^+$ , послідовно зв'язана відношенням  $\rightarrow$ . Нескінченний вивід  $(z_0, \gamma_0) \rightarrow (z_1, \gamma_1) \rightarrow \dots \rightarrow (z_b, \gamma_b) \rightarrow \dots$  збігається до точки  $z \in R^n$ , якщо  $z = \lim_{i \rightarrow \infty} z_i$ . Нехай  $a^{(n)} = (a, a, \dots, a) \in R^n$ .  $R$ -система  $G$  породжує, або задає, множину точок  $S(G)$ :

$$S(G) = \{z \in R^n \mid \exists z_0, z_1, \dots \exists \gamma_0, \gamma_1, \dots (\lim_{i \rightarrow \infty} z_i = z, z_0 = 0^{(n)}, \gamma_0 = (S_0, 1^{(n)}) \text{ та } (z_i, \gamma_i) \rightarrow (z_{i+1}, \gamma_{i+1}) \forall i \in \mathbb{N})\}.$$

Якщо всі коефіцієнти  $k_{i,j}$  дорівнюють  $k$ , то в запису продукцій їх будемо опускати, використовуючи для такої  $R$ -системи неї позначення  $G(k)$ .

Покажемо, що клас множин, породжуваних  $R$ -системами, замкнений відносно скінченного об'єднання та для простору  $R^2$  ще й повороту.

**Теорема 1.** Для  $R$ -систем  $G_1 = (n, V_1, B_1, P_1, S_1)$  і  $G_2 = (n, V_2, B_2, P_2, S_2)$  існує  $R$ -система  $G$  така, що  $S(G) = S(G_1) \cup S(G_2)$ .

**Доведення.** Без обмеження загальності можна вважати, що  $V_1 \cap V_2 = (V_1 \cup V_2) \cap (B_1 \cup B_2) = \emptyset$  та  $S_0 \notin V_1 \cup V_2 \cup B_1 \cup B_2$ . Шукану  $R$ -систему задамо так:

$$\begin{aligned} G &= (n, V, B, P, S_0), V = V_1 \cup V_2 \cup \{S_0\}, \\ B &= \{0^{(n)}\} \cup \{2 \cdot b \mid b \in B_1 \cup B_2\}, \\ P &= \{S_0 \rightarrow 0^{(n)} S_1 (1/2)^{(n)} 0^{(n)} S_1 (1/2)^{(n)}\} \cup \\ &\quad \cup \{S \rightarrow 2 \cdot b \gamma \mid (S \rightarrow b \gamma) \in P_1 \cup P_2, b \in R^n\}. \square \end{aligned}$$

Для  $(x, y) \in R^2$  та  $\varphi \in R$  під записом  $(x, y) \circ \varphi$  будемо розуміти точку  $(x', y')$ , що є образом  $(x, y)$

при повороті на кут  $\varphi$  відносно початку координат, більш точно  $x' = x \cos \varphi - y \sin \varphi$ ,  $y' = x \sin \varphi + y \cos \varphi$ . Операцію  $\circ \varphi$  можна розповсюдити на підмножини  $R^2$ .

**Теорема 2.** Для  $R$ -системи  $G_1 = (2, V, B_1, P_1, S)$  та числа  $\varphi$  існує  $R$ -система  $G_2 = (2, V, B_2, P_2, S)$  така, що  $S(G) = S(G_1) \circ \varphi$ .

**Доведення.** Достатньо взяти  $B_2 = B_1 \circ \varphi$ ,  $P_2 = \{S \rightarrow (b \circ \varphi) \xi k \mid (S \rightarrow b \xi k) \in P_1\}$ .  $\square$

Нехай  $x \in R^n$ ,  $B = \{0, 1/2\}^n$ .  $R$ -системи

$$G_1(1/2) = (n, \{x, 0^{(n)}\}, \{S_0, S\}, \{S_0 \rightarrow x S, S \rightarrow 0^{(n)} S\}, S_0),$$

$$G_2(1/2) = (n, \{S_0\}, B, \{S_0 \rightarrow b S_0 \mid b \in B\}, S_0),$$

$$G_3(1/2) = (n, \{S_0, S\}, B, P_3, S_0), \text{ де}$$

$$P_3 = \{S_0 \rightarrow b S_0 1^{(n)} \mid b S 1^{(n)} \mid b \in B\} \cup \{S \rightarrow b S (1/2)^{(n)} \mid b \in B\},$$

$$G_4(1/2) = (1, \{S_0, S\}, \{0, 1\}, \{S_0 \rightarrow 0 S_0 \mid 1 S, S \rightarrow 0 S\}, S_0),$$

$$G_5(1/3) = (1, \{S_0\}, \{0, 2/3\}, \{S_0 \rightarrow 0 S_0 \mid 2/3 S_0\}, S_0)$$

задають множини  $\{x\}$ ,  $[0; 1]^n$ ,  $R^n$ ,  $\{0\} \cup \{2^{-n} \mid n \in \mathbb{N}\}$



та множину Кантора відповідно.  $R$ -система

$$G_0 = (n, \{S_0, S_1\}, \{0, 3\}^n \cup \{0, 1/2\}^n, P, S_0), \text{ де}$$

$$P = \{S_0 \rightarrow bS_0\}^{(n)} \cup \{S_1 \rightarrow bS_1\}^{(n)} \mid b \in \{0, 3\}^n \cup$$

$$\cup \{S_0 \rightarrow bS_1\}^{(n)} \mid b \in \{0, 1/2\}^n\},$$

задає замкнену незв'язну необмежену множину.  $R$ -системи здатні задавати різні за потужністю та характером зв'язності/обмеженості множини, зокрема деякі фрактали.

Серветку Серпинського  $S(A_1, A_2, A_3)$ , отриману за трикутником  $\Delta A_1 A_2 A_3$ , де  $A_i = (x_i, y_i)$ ,  $i \in \overline{1, 3}$ , можна задати так. Спочатку з  $\Delta A_1 A_2 A_3$  вилучимо внутрішній трикутник, утворений серединами сторін; після аналогічну процедуру застосуємо до кожного з трьох отриманих трикутників і т.д.  $S(A_1, A_2, A_3)$  — це множина точок трикутника  $\Delta A_1 A_2 A_3$ , що не будуть видалені вказаною процедурою. Існують різні стратегії побудови  $R$ -системи для  $S(A_1, A_2, A_3)$ . Наприклад, перейшовши в одну з вершин трикутників, на кроці виводу можна поступово уточнювати координати, рухаючись до однієї з вершин менших трикутників. Інакше: при виводі можна рухатись по центрах мас трикутників. Ці стратегії реалізовано в  $R$ -системах  $G_7(1/2)$ ,  $G_8(1/2)$ , що задають серветку  $S(A_1, A_2, A_3)$ .

$$G_7(1/2) = (2, \{S_0, S_1\}, \{b_0, b_1, b_2, b_3\}, P, S_0), \text{ де}$$

$$b_0 = (x_1, y_1), b_1 = (x_2 - x_1, y_2 - y_1),$$

$$P = \{S_0 \rightarrow b_0 S_1\} \cup \{S_1 \rightarrow b_i S_1 \mid i = \overline{1, 3}\}.$$

$$G_8(1/2) = (2, \{S_0, S_1\}, \{b_0, b_1, b_2, b_3\}, P, S_0), \text{ де}$$

$$b_0 = ((x_1 + x_2 + x_3)/3, (y_1 + y_2 + y_3)/3),$$

$$b_1 = (x_1 - (x_1 + x_2 + x_3)/3, y_1 - (y_1 + y_2 + y_3)/3),$$

$$P = \{S_0 \rightarrow b_0 S_1\} \cup \{S_1 \rightarrow b_i S_1 \mid i = \overline{1, 3}\}.$$

Аналогічно будуються  $R$ -системи для килима Серпинського та губки Менгера.

#### Задання геометричних фракталів за допомогою $R$ -систем

Певний клас геометричних фракталів складають множини, одержувані в результаті наступної ітераційної процедури. Розглянемо двовимірний випадок. Нехай в просторі  $R^2$  задано базову ламану та ламану-генератор. Алгоритм починає роботу з базової ламаної. На кожному наступному кроці кожна ланка поточної ламаної замінюється відповідно перетворенням генератором. За певних умов гранична за метрикою Хаусдорфа множина є геометричним фракталом. Цей процес можна узагальнити, увівши імена ланок, для кожної з яких існує свій власний генератор. Часткові випадки алгоритмів побудови таких предфракталів розглядалися в [2]. Далі задачу побудови  $R$ -системи розв'язано в загальному вигляді.

Формально опишемо зазначену модель. Ламаною вважатимемо довільну ламану двовимірного евклідового простору з скінченним ненульовим числом ланок і попарно різними сусідніми вузлами. Одиничною назвемо ламану з початком  $(0, 0)$  і кінцем  $(1, 0)$ . Одинична ламана  $L = b_0 b_1 b_2 \dots b_m b_{m+1}$  задає перетворення  $f_L$ , яке кожен відрізок переводить в ламану, подібну  $L$ , так, що кінці відрізка переходять самі в себе.

Нехай задано скінченну множину імен  $I$ . Пару  $(L, \xi)$ , де  $L = a_0 a_1 \dots a_l$  — ламана,  $l \geq 1$ ,  $\xi = S_0 S_1 \dots S_{l-1}$  — слово довжини  $l$  в алфавіті  $I$ , назвемо іменованою ламаною (ланка  $a_i a_{i+1}$  має ім'я  $S_i$  та номер  $i$ ). Система генераторів — це скінченна множина  $W \subset \{(S, L, \xi) \mid S \in I, L \text{ — одинична ламана з } l \geq 1 \text{ ланок, } \xi \in I^l\}$ , для якої  $Pr_1 W = I$ ,  $card W = card I$ . Система генераторів  $W$  задає перетворення іменованих ламаних  $f_W$ , в якому до кожної ланки ламаної застосовується відповідний імені генератор.

Нехай  $(L, \xi) = (a_0 a_1 \dots a_l, S_0 S_1 \dots S_{l-1})$  — іменована ламана,  $(S_i, L_i, \xi_i) \in W$ ,  $f_L(a_i a_{i+1}) = a_i B_i a_{i+1}$ . Тоді  $f_W(L, \xi) = (a_0 B_0 a_1 B_1 \dots a_l B_l a_{l+1}, \xi_0 \xi_1 \dots \xi_{l-1})$ . Для іменованої ламаної  $(L, \xi)$  розглянемо послідовність іменованих ламаних:  $(L^{(0)}, \xi^{(0)}) = (L, \xi)$ ,  $(L^{(i+1)}, \xi^{(i+1)}) = f_W(L^{(i)}, \xi^{(i)})$ ,  $i \in \mathbb{N}$ .  $L^*(L, \xi, W) = \lim_{i \rightarrow \infty} L^{(i)}$ , де границя береться за метрикою Хаусдорфа. Якщо всі ланки ламаних з множини  $Pr_2(W)$  коротші за 1, то  $L^*(L, \xi, W)$  визначено коректно і може бути задана у вигляді жорданової кривої, а саме.

$L^{(0)} = \{(x_0(t), y_0(t)) \mid t \in [0, 1]\}$ , де неперервні на  $[0, 1]$  функції  $x_0, y_0$  задовольняють наступним умовам:

- 1)  $(x_0(t/l), y_0(t/l)) = a_i, i = \overline{0, l-1}$ ;
- 2) функції  $x_0, y_0$  лінійні на кожному з відрізків  $[i/l, (i+1)/l]$ ,  $i = \overline{0, l-1}$ .

За ламаною  $L^{(0)} = a_0 a_1 \dots a_l$  у вигляді жорданової кривої  $L^{(0)} = \{(x_i(t), y_i(t)) \mid t \in [0, 1]\}$ , де  $x_i, y_i$  — неперервні кусково-лінійні на  $[0, 1]$  функції, задамо у вигляді жорданової кривої ламану  $L^{(i+1)}$ . Нехай  $a_j' = (x_j(t_j), y_j(t_j))$ ,  $a_{j+1}' = (x_{j+1}(t_{j+1}), y_{j+1}(t_{j+1}))$  і при перетворенні ланці  $a_j a_{j+1}$  відповідає ламана з  $m_j$  ланок. Тоді функції  $x_{j+1}, y_{j+1}$  для  $L^{(i+1)}$  визначимо так, щоб на відрізку  $[t_j, t_{j+1}]$  виконувалися умови:  $a_j' = (x_{j+1}(t_j), y_{j+1}(t_j))$ ,  $a_{j+1}' = (x_{j+1}(t_{j+1}), y_{j+1}(t_{j+1}))$ , і при перетворенні ланки  $a_j a_{j+1}$  до ламаної додавалися вузли  $(x_{j+1}(t_j + kh_j), y_{j+1}(t_j + kh_j))$ , де  $h_j = (t_{j+1} - t_j)/m_j$ ,  $k \in \overline{1, m_j - 1}$ . Якщо всі ланки ламаних-генераторів коротші за 1, то існують неперервні на  $[0, 1]$  функції  $x(t) = \lim_{i \rightarrow \infty} x_i(t)$ ,  $y(t) = \lim_{i \rightarrow \infty} y_i(t)$ , для яких  $L^*(L, \xi, W) = \{(x(t), y(t)) \mid t \in [0, 1]\}$ .

**Теорема 3.** Нехай задано скінченну множину



імен та систему генераторів  $W$ , для якої всі ланки ламаних з  $Pr_2(W)$  коротші за 1 і складають з вектором  $(1, 0)$  кут  $\varphi = 2\pi r$ ,  $\varphi \in [0; 2\pi)$ ,  $r \in Q$ . Тоді множина  $L^*(L, \xi, W)$  може бути задана  $R$ -системою.

Доведення. Нехай

$$W = \{(S, b_{S,0}b_{S,1}\dots b_{S,m_S+1}, A_{S,0}A_{S,1}\dots A_{S,m_S}) \mid S \in I\},$$

$$(L, \xi) = (a_0a_1\dots a_l, S_0S_1\dots S_{l-1}),$$

$$\vec{a}_i a_{i+1} = |\vec{a}_i a_{i+1}| \cdot (1, 0) \circ \psi_i, \text{ де } \psi_i \in [0; 2\pi).$$

За умовою вектори  $\vec{b}_{S,j}b_{S,j+1}$  можна подати у вигляді  $\vec{b}_{S,j}b_{S,j+1} = k_j \cdot (1, 0) \circ 2\pi r_{S,j}$ , де  $k_j = |\vec{b}_{S,j}b_{S,j+1}|$ ,  $r_{S,j} \in Q$ . Тоді існує  $q \in N$  таке, що  $r_{S,j} = t_{S,j} \cdot 2\pi/q$ ,  $t_{S,j} \in \overline{0, q-1}$ . Отже  $\vec{b}_{S,j}b_{S,j+1} = k_{S,j} \cdot (1, 0) \circ (t_{S,j} 2\pi/q)$ . Звідси на кожній ітерації перетворення ланки поточної ламаної складають з відповідним відрізком початкової ламаної кут виду  $j \cdot 2\pi/q$ , де  $0 \leq j < q$ .

Нехай ім'я  $S$  належить множині імен  $I$ . При побудові  $R$ -системи з нетерміналом  $(S, i, j)$  зв'яжемо ситуацію, коли на поточному кроці перетворюється ланка з ім'ям  $S$ , отримана з ланки  $a_i a_{i+1}$  базової ламаної і яка складає з вектором  $\vec{a}_i a_{i+1}$  кут  $j \cdot 2\pi/q$ . Отже, якщо врахувати, що в процесі виведення кожен нетермінал "знає" коефіцієнти стискання, то йому "відомий" поточна перетворювана ланка. Перетворення ланки зводиться до стискання (реалізовано коефіцієнтами продукцій) та повороту (реалізовано індексацією нетерміналів), тому множина продукцій забезпечує перехід від початку ланки до кожного з вузлів одержуваної після її перетворення ламаної. На першому кроці виводу здійснюється перехід в один з вузлів базової ламаної. З останнього вузла базової ламаної переміщатися нікуди не треба, тому введемо нетермінал  $(S, l, 0)$  що переміщує на нуль-вектор.

При виконанні умов теореми множина  $L^*(L, \xi, W)$  задається  $R$ -системою  $G_{L, \xi, W} = (2, V, B, P, S_0)$ , де

$$V = (I \times \overline{0, l-1} \times \overline{0, q-1}) \cup \{S_0, (S_b, l, 0)\},$$

$$P = \{S_0 \rightarrow a_j (S_j, j, 0) (1/2, 1/2) \mid j = \overline{0, l-1}\} \cup$$

$$\cup \{(S_b, l, 0) \rightarrow (0, 0) (S_b, l, 0) (1/2, 1/2)\} \cup$$

$$\cup \{(S, i, t) \rightarrow b_j (A_{S,j}, i, (t+t_{S,j}) \bmod q) (k_{S,j}, k_{S,j}) \mid$$

$$b_j = (2|\vec{a}_i a_{i+1}| \cdot b_{S,j}) \circ \psi_i \circ (2\pi/q),$$

$$i = \overline{0, l-1}, t = \overline{0, q-1}, j = \overline{0, m_S-1}\},$$

$B$  — множина перших елементів слів з  $Pr_2 P$ .

При доведенні  $L^*(L, \xi, W) = S(G_{L, \xi, W})$  будемо дотримуватись введених при означенні  $L^*(L, \xi, W)$

позначень. Крім того, будемо вважати, що продукції нетерміналів пронумеровані за індексом  $j$ . Вузли ламаних  $L^{(i)}$  множини  $L^*(L, \xi, W)$  і  $S(G_{L, \xi, W})$  не розрізняють, тому далі їх не розглядаємо.

Нехай  $z \in L^*(L, \xi, W)$ ,  $z = (x', y')$ , і  $z \neq a_l$ . Тоді для деякого числа  $t \in [0; 1)$   $z = (x', y') = (\lim_{i \rightarrow \infty} x_i(t), \lim_{i \rightarrow \infty} y_i(t))$ . Побудуємо за  $t$  послідовність натуральних чисел  $m_0, m_1, \dots$  таку, що  $m_0 = n_0$ ,  $m_i = n_i \cdot p_i$ ,  $i \geq 1$ , де числа  $n_i, p_i$  визначаються з умов: в ламаній  $L^{(i)}$  точка  $(x_i(t), y_i(t))$  належить  $n_i$ -ій ланці, але не є її кінцем (але, можливо, є початком); початок  $n_{i-1}$ -ої ланки ламаної  $L^{(i-1)}$  в ламаній  $L^{(i)}$  є початком  $p_i$ -ої ланки. Отримана послідовність визначає послідовність продукцій нетерміналів в нескінченному виводі точки  $z$ . Отже,  $z \in S(G_{L, \xi, W})$ .

Кожний нескінченний вивід в  $R$ -системі задає послідовність номерів продукцій нетерміналів  $m_0, m_1, \dots$ , за якою можна відновити число  $t \in [0; 1)$ , для якого  $z = (\lim_{i \rightarrow \infty} x_i(t), \lim_{i \rightarrow \infty} y_i(t)) \in L^*(L, \xi, W)$ . Теорема доведена.

Теорема 3 дозволяє отримати  $R$ -системи для сніжинки Коха, кривої фон Коші, фрактала Мінковського, кривої "дракон Хартера-Хайвея".

На закінчення зазначимо, що наведено в даній роботі техніку можна перенести на евклідові простори більшої розмірності та на побудову  $R^*$ -перетворювачів, що реалізують сюр'єктивні відображення множини  $V\{0, 1\}^m$  на геометричні фрактали.

#### Список використаних джерел

1. Barnsley M. "Fractals Everywhere". — Boston: Academic Press, 1988. — 394 p.
2. Вурт Н. Алгоритмы + Структуры данных = Программы. — М.: Мир, 1985. — 406 с.
3. Лисовик Л.П., Коваль Д.А., Мартинес С.В.  $R^*$ -преобразователи и фрактальные кривые. //Кибернетика и системный анализ. — 1999. — №3. — С.95-105.
4. Лисовик Л.П., Карнаух Т.А. Об одном методе задания фрактальных множеств. //Алгебра, логика и кибернетика: Материалы международной конференции. — Иркутск: Издательство ГОУ ВПО "Иркутский государственный педагогический университет". — 2004. — С. 171-172.

Надійшла до редколегії 22.01.07



УДК 517.988

Кашпур О.Ф., канд. фіз.-мат. наук, доцент,  
Малишева Т.М., Хлобистов доктор фіз.-мат.  
наук, професор

## Про точні на поліномах інтерполяційні формули в гільбертовому просторі

В гільбертовому просторі наведено інтерполяційні формули типу Лагранжа, Ерміта, Ерміта-Біркхофа, що є альтернативою відомим операторним інтерполантам. Дані формули набагато простіші за конструкцією побудови та асимптотично інваріантні щодо поліномів відповідного степеня. Наявність оцінок точності дозволяє застосовувати такі інтерполанти для наближення поліноміальних, цілих та диференційованих операторів.

Ключові слова: гільбертів простір, операторний поліном, інтерполант, цілий оператор, диференційований оператор.

\*E-mail: malysheva.t@gmail.com, khl@i.com.ua

**Вступ.** Нехай  $X$  – гільбертів,  $Y$  – векторний простори,  $F: X \rightarrow Y$  – деякий, в загальному випадку нелінійний, оператор,  $\Pi_n$  – множина поліномів  $n$ -го степеня вигляду

$$\Pi_n = \left\{ P_n; P_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k x^k, x \in X \right\}, \quad (1)$$

де  $L_k x^k: X \rightarrow Y$  –  $k$ -тий операторний степінь, що отримується з  $k$ -лінійної симетричної неперервної операторної форми  $L_k(v_1, v_2, \dots, v_k): X^k \rightarrow Y$ , коли  $v_1 = v_2 = \dots = v_k = x$ ,  $k = \overline{1, n}$ . Нехай, надалі,  $x_i \in X$ ,

$i = \overline{1, 2, \dots, m}$ ,  $m \geq n$ , матриця  $\Gamma = \left\| \sum_{k=0}^n (x_i, x_j)^k \right\|_{i,j=1}^m$ ,

$\theta^0 = 1$ ,  $(\cdot, \cdot)$  – скалярний добуток в  $X$ ,  $\Gamma^+$  – псевдообернена матриця Мура-Пенроуза до матриці  $\Gamma$ ,  $Z$  – матриця, рядками якої є координати ортонормальних власних векторів матриці  $\Gamma$  з нульовим власним числом,  $\bar{F} = \{F(x_i)\}_{i=1}^m$ . В [1] наведено наступне

**Твердження 1.** Для розв'язності задачі поліноміального операторного інтерполювання, тобто знаходження такого полінома  $P_{m,n}(F; x) \in \Pi_n$  з умовами

O.F. Kashpur, Cand. of Ph. and M. Sc., Associate Professor, T.M. Malysheva, V.V. Khlobystov, Doc. of Ph. and M. Sc., Professor

## On interpolation formulas which are accurate on polynomials in Hilbert space

In Hilbert space we give Lagrange, Hermite, Hermite-Birkhoff type interpolation formulas which are alternative of known operator interpolants. These formulas have more simpler construction structure and asymptotically invariant to polynomials of the same degree. Presence of accuracy estimation allows to use such interpolants for approximation of polynomial, entire and differentiable operators.

Key Words: Hilbert space, operator polynomial, interpolant, entire operator, differentiable operator.

$$P_{m,n}(F; x_i) = F(x_i), \quad i = \overline{1, 2, \dots, m}, \quad (2)$$

необхідно та достатньо виконання рівності  $Z\bar{F} = \bar{0}$ , а вся множина цих інтерполантів надається за формулою

$$P_{m,n}(F; x) = Q_n(x) + \left\langle \bar{F} - \bar{Q}_n, \Gamma^+ \left\{ \sum_{k=0}^n (x, x_i)^k \right\}_{i=1}^m \right\rangle, \quad (3)$$

де  $Q_n \in \Pi_n$ ,  $\langle \bar{a}, \bar{b} \rangle = \sum_{i=1}^m a_i b_i$ ,  $\bar{a} = \{a_i\}_{i=1}^m$ ,  $\bar{b} = \{b_i\}_{i=1}^m$ ,  $a_i \in Y$ ,  $b_i \in R_1$ .

Для конструктивної побудови інтерполанта (3) необхідна інформація у вигляді значень оператора  $F(x_i)$ ,  $i = \overline{1, 2, \dots, m}$ , однак одразу підкреслимо, що ці інтерполанти в загальному випадку не “зберігають” поліноми відповідного степеня (“збереження” – в сенсі того, що  $P_{m,n}(P_n; x) = P_n(x)$ ,  $P_n \in \Pi_n$ ,  $x \in X$ ), як це притаманно інтерполантам в скінченновимірних просторах. Важливість цієї властивості безумовна, оскільки вона використовується в задачах на операторному рівні так саме, як і в аналогічних задачах інтерполяції функцій багатьох змінних. Відмітимо, що в [2, 4] ця умова “збереження” належить до постановки інтерполяційної задачі. В [6] досліджується питання точності на поліномах операторних



інтерполянтів з множини (3). Розглянуто два випадки: перший – коли оператор  $F$   $n$  разів диференційований за Гато і другий – коли він не має цієї властивості за винятком належності оператора до множини поліномів степеня не вищого за  $n$ . У першому випадку в формулі (3) покладемо  $Q_n(x) = T_n(F; x)$  – поліном Тейлора для  $F$ . Нехай  $P_n \in \Pi_n$ . Тоді

$$P_{m,n}(P_n; x) = T_n(P_n; x) + \left\langle \bar{P}_n - \bar{T}_n, \Gamma^+ \left\{ \sum_{k=0}^n (x, x_k)^k \right\}_{i=1}^m \right\rangle = P_n(x),$$

оскільки  $T_n(P_n; x) = P_n(x)$ . Однак побудова полінома Тейлора для оператора є набагато більш складною задачею, ніж знаходження інтерполяційного полінома за формулою (3). Відмітимо, що  $T_n(F; x)$  – найкраще наближення до  $F$  на множині  $\Pi_n$  в метриці, пов'язаній з деякою гаусовою мірою на  $X$  [1]. У другому випадку проведемо наступні міркування. Нехай  $e_1, e_2, \dots, e_m$  – перші  $m$  елементів ортонормального базису в  $X$ . В [7] узагальнено метод ортогональних моментів [3] для операторних поліномів в гільбертовому просторі. Згідно з цим методом розглянемо систему вузлів  $z_i, i = 0, 1, \dots, N$ , побудовану таким чином:  $z_0 = 0$ , а решта – як всілякі суми елементів  $e_i, i = 1, 2, \dots, m, m \geq N$ , по одному, по двоє і т.д. до  $n$  доданків в кожній сумі включно з

повтореннями,  $N = \sum_{k=1}^n C_{m+k-1}^k$ . Нехай

$$R_n(x) = P_n(x) \in \Pi_n,$$

$$R_{m,n}(x) = \sum_{k=0}^n L_k \left( \sum_{i=1}^m (x, e_i) e_i \right)^k = \quad (4)$$

$$= \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k}) (x, e_{i_1}) (x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_k}).$$

Згідно [7] значення  $L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k})$  за умов

$$R_{m,n}(z_i) = R_n(z_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (5)$$

отримуємо однозначно за відповідною рекурентною процедурою. Тому матриця системи рівнянь (5) є невиродженою, а сама система має єдиний розв'язок. З іншого боку з (3), коли  $Q_n(x) \equiv 0, F \equiv R_n$ , маємо

$$P_{m,n}(R_n; x) = \left\langle \bar{R}_n, \Gamma^+ \left\{ \sum_{k=0}^n (x, z_i)^k \right\}_{i=0}^N \right\rangle =$$

$$= \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m a_{i_1 i_2 \dots i_k} (R_n) (x, e_{i_1}) (x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_k}). \quad (6)$$

Враховуючи (6) та однозначність визначення  $L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k})$  в (4) отримуємо, що система рівнянь

$$P_{m,n}(R_n; z_i) = R_n(z_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (7)$$

також має єдиний розв'язок для будь-яких значень  $R_n(z_i)$ .

Порівнюючи (4)-(5) з (6)-(7), приходимо до висновку, що, по-перше, матриця системи (7) співпадає з матрицею системи (5), а отже є невиродженою, а по-друге,

$$a_{i_1 i_2 \dots i_k} (R_n) = L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k}), \quad 1 \leq i_j \leq m, \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (8)$$

Крім того, матриця  $Z$ , що пов'язана з матрицею  $\Gamma$ , є нуль-матриця і  $\Gamma^+ = \Gamma^{-1}$  в (6). Приймаючи до уваги (8)  $P_{m,n}(R_n; x)$  запишемо у вигляді

$$P_{m,n}(R_n; x) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m L_k(e_{i_1}, \dots, e_{i_k}) (x, e_{i_1}) \dots (x, e_{i_k}) = \sum_{k=0}^n L_k \left( \sum_{i=1}^m (x, e_i) e_i \right)^k. \quad (9)$$

Позначимо через  $\mathfrak{Z}_m$  підпростір, утворений базисом  $e_1, e_2, \dots, e_m$ . Тоді остаточно маємо, що  $P_{m,n}(R_n; x) \equiv R_n(x), x \in \mathfrak{Z}_m$ , та

$$P_{m,n}(R_n; x) \rightarrow R_n(x), \quad m \rightarrow \infty, \quad x \in X.$$

Сформулюємо тепер важливі наслідки, що випливають з вищенаведених міркувань.

**Твердження 2.** Нехай оператор  $F$  диференційований за Гато  $n$  разів. Тоді інтерполянт (3), коли  $Q_n(x) = T_n(F; x)$ , “зберігає” поліноми відповідного степеня. Якщо ж оператор  $F$  не має такої властивості, за винятком належності до множини поліномів степеня не більше ніж  $n$ , то існує така послідовність вузлів  $z_i, i = 0, 1, 2, \dots, N$ , що визначена вище, на якій побудований інтерполянт з (3) асимптотично “зберігає” поліноми відповідного степеня, а інтерполяційна формула

$$P_{m,n}(F; x) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m a_{i_1 i_2 \dots i_k} (F) * (x, e_{i_1}) (x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_k}), \quad (10)$$

де елементи  $a_{i_1 i_2 \dots i_k} (F) \in Y$  визначаються однозначно з умов  $P_{m,n}(F; z_i) = F(z_i)$ , є частинним випадком інтерполянта з множини (3).

**Постановка задачі.** На основі вищенаведеного сформулюємо таку задачу поліноміального операторного інтерполювання. З



множини операторних поліномів (10) виокремити такі, для яких  $N+1$  інтерполяційна умова на підпросторі  $\mathfrak{Z}_m$  дає систему лінійних рівнянь відносно невідомих  $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$  з невідродженою матрицею для будь-якого  $m \geq n$ , що в свою чергу однозначно визначає коефіцієнти  $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$ ,  $1 \leq i_j \leq m$ ,  $k = 0, 1, \dots, n$ . Такими

інтерполяційними умовами можуть бути умови типу Лагранжа, Ерміта та Ерміта-Біркхофа. Всі ці побудовані інтерполянти будуть мати властивість асимптотичного "збереження" полінома відповідного степеня, оскільки для  $P_n \in \Pi_n$  згідно (8), (9) маємо

$$a_{i_1 i_2 \dots i_k}(P_n) = L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k}) \text{ і}$$

$$P_{m,n}(P_n; x) \rightarrow P_n(x), \quad m \rightarrow \infty, \quad x \in X.$$

Зауваження. Відмітимо, що у випадку  $F \equiv P_n \in \Pi_n$  всі ці інтерполянти співпадають, а для  $F \neq P_n$  різні.

**Розв'язки інтерполяційної задачі.** Наведемо відомі нам розв'язки поставленої інтерполяційної задачі.

1) Поліном типу Лагранжа. Інтерполяційні умови

$$P_{m,n}(z_i) = F(z_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N$$

приводять до однозначного визначення коефіцієнтів в (10) при будь-якому  $m \geq n$  за допомогою рекурентних співвідношень [7]

$$a_{i_1 i_2 \dots i_n}(F) = \frac{1}{n!} \{ F(e_{i_1} + e_{i_2} + \dots + e_{i_n}) - \\ - [F(e_{i_1} + e_{i_2} + \dots + e_{i_{n-1}}) + \dots + F(e_{i_2} + e_{i_3} + \dots + e_{i_n})] + \\ + [F(e_{i_1} + e_{i_2} + \dots + e_{i_{n-2}}) + \dots + F(e_{i_3} + e_{i_4} + \dots + e_{i_n})] + \\ + \dots + (-1)^{n-1} [F(e_{i_1}) + F(e_{i_2}) + \dots + F(e_{i_n})] + (-1)^n F(0) \}.$$

$a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1}}(F)$  обчислюються за даною формулою із заміною  $n$  на  $n-1$ ,  $F(x)$  — на

$$F(x) = \sum_{i_1 i_2 \dots i_{n-1}} a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1}}(F)(x, e_{i_1})(x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_{n-1}}) \text{ і т.д.}$$

Таким чином побудований інтерполянт (10) будемо називати інтерполяційним поліномом типу Лагранжа, що має властивість асимптотичного "збереження" поліномів відповідного степеня.

2) Інтерполяційний поліном Ерміта в одному вузлі. Якщо інтерполяційні умови мають вигляд

$$P_{m,n}^{(k)}(0; F) e_{i_k} e_{i_{k-1}} \dots e_{i_1} = F^{(k)}(0) e_{i_k} e_{i_{k-1}} \dots e_{i_1},$$

$$1 \leq i_j \leq m, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n,$$

то коефіцієнти в (10) також визначаються

однозначно для будь-якого  $m \geq n$  [10]

$$a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F) = \frac{1}{k!} F^{(k)}(0) e_{i_k} e_{i_{k-1}} \dots e_{i_1}, \quad 1 \leq i_j \leq m, \\ k = 0, 1, 2, \dots, n,$$

а отриманий інтерполянт з (10) будемо називати інтерполянтом Ерміта, який теж буде асимптотично точним на поліномах відповідного степеня.

3) Інтерполянт типу Абеля-Гончарова. Інтерполяційні умови надамо у вигляді<sup>\*)</sup>

$$P_{m,n}^{(k)}(e_k) e_{i_k} e_{i_{k-1}} \dots e_{i_1} = F^{(k)}(e_k) e_{i_k} e_{i_{k-1}} \dots e_{i_1},$$

$$1 \leq i_j \leq m, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Тоді коефіцієнти  $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$  в (10) визначаються однозначно для будь-якого  $m \geq n$  за допомогою рекурентних співвідношень [8]

$$a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F) = \frac{1}{k!} F^{(k)}(e_k) e_{i_k} \dots e_{i_1} - \sum_{j=1}^{n-k} C_{k+j}^j a_{i_1 \dots i_k \frac{k+j}{j}}(F), \\ k = n, n-1, \dots, 0,$$

а сам інтерполянт будемо називати інтерполянтом Абеля-Гончарова, що є асимптотично інваріантним щодо поліномів відповідного степеня.

4) Загальна множина інтерполянтів. До цієї множини віднесемо всі можливі інтерполянти з інтерполяційними умовами, що забезпечують однозначність визначення полілінійних операторних форм. Всі три попередні інтерполянти належать до цієї множини, крім того, побудовано інтерполяційні поліноми типу Ерміта та Ерміта-Біркхофа степеня  $n = 2, 3, 4, 5$  вигляду (10) для довільного  $m \geq n$ , що відрізняються від вище наведених. Так, наприклад, для  $n = 2$  інтерполяційні умови типу Ерміта можна подати у вигляді

$$P_{m,2}(0) = F(0), \quad P_{m,2}(e_i) = F(e_i),$$

$$P'_{m,2}(e_i) e_i = F'(e_i) e_i, \quad i = \overline{1, m},$$

$$P''_{m,2}(e_i) e_k e_i = F''(e_i) e_k e_i, \quad i \neq k, \quad i = \overline{1, m}, \quad k = \overline{1, m}.$$

Тоді коефіцієнти в (10) однозначно визначаються за формулами

$$a_0(F) = F(0), \quad a_i(F) = 2F(e_i) - F'(e_i) e_i - 2F(0),$$

$$a_{ii}(F) = F'(e_i) e_i - F(e_i) + F(0), \quad i = \overline{1, m},$$

$$a_{ik}(F) = \frac{1}{2} F''(e_i) e_k e_i, \quad i \neq k, \quad i = \overline{1, m}, \quad k = \overline{1, m}.$$

<sup>\*)</sup> Пропозиція щодо побудови та дослідження інтерполянта Абеля-Гончарова на операторному рівні належить В.Л. Макарову.



Для  $n=2$  інтерполяційний поліном типу Ерміта-Біркхофа можна однозначно визначити на підставі наступних інтерполяційних умов

$$P_{m,2}(0) = F(0), \quad P'_{m,2}(e_i)e_i = F'(e_i)e_i,$$

$$P''_{m,2}(e_i)e_i e_i = F''(e_i)e_i e_i, \quad i = \overline{1, m},$$

$$P''_{m,2}(e_i)e_k e_i = F''(e_i)e_k e_i, \quad i \neq k, \quad i = \overline{1, m}, \quad k = \overline{1, m};$$

$$\text{або } P_{m,2}(0) = F(0), \quad P_{m,2}(e_i) = F(e_i),$$

$$P''_{m,2}(e_i)e_i e_i = F''(e_i)e_i e_i, \quad i = \overline{1, m},$$

$$P''_{m,2}(e_i)e_k e_i = F''(e_i)e_k e_i, \quad i \neq k, \quad i = \overline{1, m}, \quad k = \overline{1, m},$$

де коефіцієнти в (10) знаходяться із наступних співвідношень:

$$a_0(F) = F(0), \quad a_i(F) = F'(e_i)e_i - F''(e_i)e_i e_i,$$

$$a_{ii}(F) = \frac{1}{2} F''(e_i)e_i e_i, \quad a_{ik}(F) = \frac{1}{2} F''(e_i)e_k e_i; \text{ або}$$

$$a_0(F) = F(0), \quad a_i(F) = F(e_i) - F(0) - F''(e_i)e_i e_i,$$

$$a_{ii}(F) = \frac{1}{2} F''(e_i)e_i e_i, \quad a_{ik}(F) = \frac{1}{2} F''(e_i)e_k e_i$$

відповідно.

Побудовані інтерполяційні поліноми типу Ерміта та Ерміта-Біркхофа також мають властивість асимптотичного збереження поліномів відповідного степеня.

**Висновки.** Отримано множину поліномів (10), з якої інтерполяційні умови на підпросторі  $\mathfrak{Z}_m$  у випадках 1)-4) виділяють інтерполянти з однозначним визначенням коефіцієнтів  $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$ ,  $1 \leq i_j \leq m$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ , для будь-якого  $m \geq n$ . Всі ці інтерполянти співпадають, якщо  $F \equiv P_n \in \Pi_n$  і різні, якщо  $F \neq P_n \in \Pi_n$  мають властивість "збереження" поліномів відповідного степеня на підпросторі  $\mathfrak{Z}_m$  та асимптотичного "збереження" на всьому просторі  $X$ . Однак зауважимо, що існують інтерполяційні формули [2, 4, 5], що є точними на поліномах відповідного степеня. Для їх побудови необхідно існування кратних інтегралів Рімана-Стільтєса по оператору скалярного аргументу від похідних вищих порядків оператора  $F$ , інтегралів Рімана від змішаних похідних функціоналу  $F$ .

В роботах [9, 10] отримано оцінки точності інтерполяції поліноміальних, цілих та диференційованих операторів. Враховуючи важливість задач наближення таких класів операторів та можливість знаходження таких  $m$ , що забезпечують задану точність інтерполяційного наближення, можна казати про певні переваги інтерполяції (10) для багатьох прикладних задач. Сформулюємо основний висновок, що випливає з попередніх міркувань, а

саме: інтерполяційні формули вигляду (10) можуть бути вдалою альтернативою до інтерполянтів точних на поліномах (див. [1, 2, 4, 5]). Дійсно, по-перше, вони набагато простіші за конструкцію побудови (не вимагають континуальності вхідної інформації). По-друге, "збереження" ними в асимптотиці відповідних поліномів за наявності оцінок точності дозволяє обмежуватись скінченною сумою (10) та застосовувати її для інтерполяційного наближення поліноміальних, цілих та диференційованих операторів.

#### Список використаних джерел

1. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Янович Л.А. Интерполирование операторов. – Киев: Наукова думка, 2000. – 407с.
2. Егоров А.Д., Соболевский П.Н., Янович Л.А. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов. – Минск: Наука и техника, 1985. – 310с.
3. Пупков К.И., Капалин В.И., Ющенко А.С. Функциональные ряды в теории нелинейных систем. – М.: Наука, 1976. – 448с.
4. Filipsson L. Kergin interpolation in Banach Spaces // Journal of Approximation Theory 127(2004). – Р.108–123.
5. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Кашипур Е.Ф., Михальчук Б.Р. Интегральные полиномы типа Ньютона с континуальными узлами // Укр. мат. журн. – 2003. – 55, №6. – С. 779–789.
6. Хлобыстов В.В. Интерполяционные формулы типа Лагранжа в гильбертовом пространстве, инвариантные относительно полиномов // Кибернетика и системный анализ. – 2001. – №3. – С.179–184.
7. Хлобыстов В.В., Кашипур Е.Ф. К задаче интерполирования полиномиальных операторов // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №3. – С.106–108.
8. Хлобыстов В.В., Кашипур О.Ф., Малишева Т.М. Про множину операторних інтерполянтів, гранично інваріантних щодо поліномів // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки (в друці).
9. Хлобыстов В.В. К вопросу о сходимости интерполяционных процессов в гильбертовом пространстве // Кибернетика и системный анализ. – 2000. – №6. – С.166–172.
10. Хлобыстов В.В., Поповичева Т.Н. Об интерполяционном приближении дифференцируемых операторов в гильбертовом пространстве // Укр. мат. журн. – 2006. – 58, №4. – С. 554–565.

Надійшла до редакції 9.10.2007 р.



УДК 681.14

Коцовський В.М., асистент УжНУ

## Нейронні елементи над полем комплексних чисел

В роботі розглядаються нейронні елементи з комплексними вагами. Наведені алгоритми навчання цих нейронів для деяких видів функцій активації.

Ключові слова: нейронний елемент, нейромережа, порогова логіка.

\*E-mail: [cyber@mail.uzhgorod.ua](mailto:cyber@mail.uzhgorod.ua)

Нейронні елементи (НЕ) використовуються при побудові нейромереж, які є ефективним механізмом вирішення широкого кола задач класифікації об'єктів, розпізнавання образів, стиску інформації, прогнозування поведінки динамічних систем, наближення і екстраполяції функцій. При цьому застосовуються різноманітні підходи по визначенню конфігурації НЕ і зв'язків між ними у нейромережах. В роботах [1-7] розглядаються НЕ як з неперервними, так і з розривними функціями активації. Перші з них використовуються для наближення неперервних функцій, другі – для наближення (здебільшого точної реалізації) дискретних функцій. Особливо важливим є вивчення властивостей булевих функцій, які можна задати на НЕ за допомогою різних функцій активації.

Розглянемо класичний підхід щодо реалізації булевих функцій на НЕ. Розглядаються булеві функції в алфавітах  $Z_2 = \{0, 1\}$  або  $H_2 = \{-1, 1\}$ . Якщо для булевої функції  $f: H_2^n \rightarrow H_2$  знайдеться такий  $n+1$ -вимірний дійсний вектор  $w = (w_1, \dots, w_n, w_{n+1}) \in R^{n+1}$ , що для всіх векторів  $(x_1, \dots, x_n) \in Z_2^n$  має місце співвідношення  $\sum_{j=1}^n w_j x_j + w_{n+1} < 0 \Leftrightarrow f(x_1, \dots, x_n) = -1$ , то кажуть, що булева функція  $f(x_1, \dots, x_n)$  є нейрофункцією (пороговою функцією) і реалізується на НЕ з ваговим вектором  $w \in R^{n+1}$ .

Скалярний добуток  $(w, x) = \sum_{j=1}^n w_j x_j + w_{n+1}$ , де  $x = (x_1, \dots, x_n, 1)$  називають зваженою сумою, що відповідає вхідному вектору  $x$ . Надалі будемо використовувати позначення  $f(x) = f(x_1, \dots, x_n)$ .

V. M. Kotsovsky, assistant UzhNU

## Neural elements over the complex field

Neural elements with complex weights have been studied in the paper. Learning algorithms for some kind of activation functions are given in the paper.

Key Words: neural element, neural network, threshold logic.

вважаючи, що функція  $f(x)$  не залежить від змінної  $x_{n+1}$ .

Зауваження 1. В деяких випадках зручно вважати, що  $x_{n+1}$  дорівнює деякій наперед визначеній константі, яка відмінна від нуля.

У зв'язку з "невеликою" потужністю класу булевих нейрофункцій (див. [3]) багатьма авторами робилися спроби розширити його за рахунок НЕ більш загального вигляду. Одним з можливих підходів є розгляд комплексних булевих нейрофункцій в алфавіті  $\{\alpha, \beta\} \subset C$ , які породжуються ваговим вектором  $w \in C^{n+1}$ , де  $C$  – поле комплексних чисел. Будемо визначати знакову функцію  $L\text{sign}: C \rightarrow H_2$  так: нехай  $l$  – довільна пряма на площині, яка розбиває її на дві півплощини  $C_-$  і  $C_+$ . Тоді

$$L\text{sign} z = \begin{cases} -1, & z \in C_- \\ 1, & z \in C_+ \cup l. \end{cases}$$

Застосовуючи до зважених суми  $(w, z)$  знакову функцію  $L\text{sign}$ , отримаємо відображення  $f: \{\alpha, \beta\}^n \rightarrow H_2$ , яке будемо називати комплексною булевою нейрофункцією в алфавіті  $\{\alpha, \beta\}$ . Визначення знакової функції  $L\text{sign}$  є досить загальним. Покажемо, що його можна спростити, не звузивши при цьому класу комплексних булевих нейрофункцій. Справді, за рахунок вибору вільного члена  $w_{n+1}$  у зваженій сумі  $(w, z)$ , домноження всіх вагових коефіцієнтів на множник вигляду  $e^{i\varphi}$  і певних змін вагового вектора [1], без втрати загальності можна обмежитися наступною знаковою функцією:



$$\text{Resign } z = \begin{cases} -1, & \text{Re } z < 0, \\ 1, & \text{Re } z > 0. \end{cases}$$

Схожий підхід до визначення знакових функцій був застосований в [1]. Позначимо через  $P(\{\alpha, \beta\}, C)$  клас всіх комплексних нейрофункцій в алфавіті  $\{\alpha, \beta\}$ . Виникає питання, як пов'язані між собою класи комплексних нейрофункцій у різних алфавітах. Відповідь на це питання дає

**Лема 1.** Для довільних алфавітів  $\{\alpha, \beta\}$ ,  $\{\gamma, \delta\}$  має місце взаємно однозначна відповідність  $P(\{\alpha, \beta\}, C) \leftrightarrow P(\{\gamma, \delta\}, C)$ .

**Доведення.** Нехай  $f(z) \in P(\{\alpha, \beta\}, C)$ . Тоді знайдеться такий вектор  $w \in C^{n+1}$ , що для всіх  $z \in \{\alpha, \beta\}^n$   $f(z) = \text{Resign}(w, z)$ . Відображення  $z' \rightarrow \frac{\beta - \alpha}{\delta - \gamma}(z' - \gamma) + \alpha$  здійснює взаємно однозначну відповідність між елементами множин  $\{\gamma, \delta\}^n$  і  $\{\alpha, \beta\}^n$ . Тоді

$$\begin{aligned} (w, z) &= \sum_{j=1}^n w_j z_j + w_{n+1} = \frac{\beta - \alpha}{\delta - \gamma} \sum_{j=1}^n w_j z'_j + \\ &+ \left( \alpha - \frac{\beta - \alpha}{\delta - \gamma} \gamma \right) \sum_{j=1}^n w_j z'_j + w_{n+1} = (w', z'), \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} w'_j &= \frac{\beta - \alpha}{\delta - \gamma} w_j, \quad (j = 1, 2, \dots, n), \\ w'_{n+1} &= \left( \alpha - \frac{\beta - \alpha}{\delta - \gamma} \gamma \right) \sum_{j=1}^n w_j + w_{n+1}. \end{aligned}$$

Нехай  $g(z')$  – булева функція в алфавіті  $\{\gamma, \delta\}$ , яка реалізується на НЕ з ваговим вектором  $w'$ . Легко бачити, що відображення  $f \rightarrow g$  є бієкцією між елементами множин  $P(\{\alpha, \beta\}, C)$  і  $P(\{\gamma, \delta\}, C)$ . Лема доведена.

**Зауваження 2.** Лема 1 показує, що не можна за рахунок вибору алфавіту отримати клас булевих функцій, який би мав більшу потужність, ніж клас  $P(H_2, C)$ .

Виникає питання про зв'язок між класами  $P(\{\alpha, \beta\}, C)$  і  $P(\{\alpha, \beta\}, D)$ , де  $D$  – деяка власна підмножина поля  $C$ .

**Лема 2.** Якщо для алфавіту  $\{\alpha, \beta\}$  виконується умова  $\text{Re } \alpha \neq \text{Re } \beta$ , то

$$P(\{\alpha, \beta\}, C) = P(\{\alpha, \beta\}, R).$$

**Доведення.** Нехай  $P_n(\{\alpha, \beta\}, C)$  – множина всіх  $n$ -місних комплексних нейрофункцій в алфавіті

$\{\alpha, \beta\}$ . Покажемо, що для всіх натуральних  $n$   $P_n(\{\alpha, \beta\}, C) = P_n(\{\alpha, \beta\}, R)$ . Згідно леми 1  $P_n(\{\alpha, \beta\}, C) \leftrightarrow P_n(\{\text{Re } \alpha, \text{Re } \beta\}, C)$ . Нехай  $f$  – довільний представник класу  $P_n(\{\text{Re } \alpha, \text{Re } \beta\}, C)$ ,  $z \in \{\alpha, \beta\}^n \times \{1\}$ ,  $z_j = x_j + iy_j$ ,  $x_j, y_j \in R$ ,  $(j = 1, \dots, n)$ ,  $w_j = u_j + iv_j$ ,  $u_j, v_j \in R$ ,  $(j = 1, \dots, n+1)$ . Тоді

$$\begin{aligned} f(z) &= \text{Re} \left( \sum_{j=1}^n w_j z_j + w_{n+1} \right) = \sum_{j=1}^n u_j x_j + u_{n+1} = \\ &= \text{Re} \left( \sum_{j=1}^n u_j z_j + u_{n+1} \right). \end{aligned}$$

З останньої рівності випливає, що класи булевих функцій  $P_n(\{\text{Re } \alpha, \text{Re } \beta\}, C)$  і  $P_n(\{\alpha, \beta\}, R)$  мають однакову потужність. Тоді множини  $P_n(\{\alpha, \beta\}, R)$  і  $P_n(\{\alpha, \beta\}, C)$  також мають однакову потужність. Оскільки перша з них є підмножиною другої, то вони є рівними. Лема доведена.

**Зауваження 3.** Для алфавіту  $H_2$  лема 2 доведена в роботі [2].

З доведеної леми випливає, що НЕ, коефіцієнти вагових векторів яких належать дійсній осі, породжують клас усіх комплексних нейрофункцій. Виявляється, що цей факт є типовим і має місце для НЕ, вагові коефіцієнти яких належать деякій прямій у комплексній площині.

**Теорема 1.** Якщо  $R(\gamma) = \{\gamma x \mid x \in R^{n+1}\}$  і для комплексних чисел  $\alpha, \beta, \gamma$  виконуються умови

$\text{Arg } \gamma < \frac{\pi}{2}$ ,  $\text{Re}(\alpha - \beta)\gamma \neq 0$ , то класи булевих нейрофункцій  $P(\{\alpha, \beta\}, C)$  і  $P(\{\alpha, \beta\}, R(\gamma))$  співпадають.

**Доведення.** Розглянемо довільну нейрофункцію  $f(z) \in P(\{\alpha, \beta\}, C)$ . Тоді знайдеться такий вектор  $w \in C^{n+1}$ , що для всіх  $z \in \{\alpha, \beta\}^n$  має місце рівність  $\text{Resign}(w, z) = f(z)$ . Звідси

$$(w, z) = \sum_{j=1}^n w_j z_j + w_{n+1} = \sum_{j=1}^n w_j \gamma^{-1} \gamma z_j + w_{n+1} = (w', z')$$

де  $w'_j = w_j \gamma^{-1}$ ,  $z'_j = \gamma z_j$  ( $j = 1, \dots, n$ )  $w'_{n+1} = w_{n+1}$ .

Тому кожній комплексній нейрофункції  $f(z)$  в алфавіті  $\{\alpha, \beta\}$  взаємно однозначно відповідає нейрофункція  $g(z')$  в алфавіті  $\{\gamma\alpha, \gamma\beta\}$ , причому для всіх  $z \in \{\alpha, \beta\}^n$  має місце рівність  $f(z) = g(z')$ . Застосувавши лему 2 до функції  $g(z')$ , отримаємо



$$\operatorname{Re}(w, \bar{z}) = \operatorname{Re}(w', \bar{z}') = \operatorname{Re}\left(\sum_{j=1}^n u_j z'_j + u_{n+1}\right) = \\ \operatorname{Re}\left(\sum_{j=1}^n u_j \gamma \cdot z_j + u_{n+1}\right) = \operatorname{Re}(\tilde{w}, \bar{z}),$$

$$\text{де } u_j \in R, \tilde{w}_j = u_j \gamma, (j=1, \dots, n), \tilde{w}_{n+1} = \frac{u_{n+1} \gamma}{\operatorname{Re} \gamma}.$$

Отже, бульова функція  $f(z)$  реалізується на НЕ з ваговим вектором  $\tilde{w} \in R(\gamma)$ . Теорема доведена.

Виникає питання про алгоритм знаходження для комплексної нейрофункції вагових коефіцієнтів НЕ, який реалізує цю функцію, тобто про алгоритм навчання НЕ, при умові, що  $w \in R(\gamma)$ .

Нехай  $A_+, A_-$  – скінченні підмножини, які складаються з векторів, що належать множині  $C^n \times \{\gamma\}$ , такі, що  $A_+ \cap A_- = \emptyset$ . Множини  $A_+$  і  $A_-$  назвемо  $\gamma$ -відділимими, якщо знайдеться такий вектор  $w \in R(\gamma)$ , що для всіх  $z \in A = A_+ \cup A_-$  мають місце співвідношення

$$\begin{aligned} (w, z) &> 0, \text{ якщо } z \in A_+, \\ (w, z) &< 0, \text{ якщо } z \in A_-. \end{aligned}$$

Крім того, будемо вважати, що

$$\forall z \in A \quad \operatorname{Re}(e^{i\varphi} z_j) \geq c > 0 \quad (j=1, \dots, n). \quad (1)$$

Нехай послідовність векторів  $\{z^k\}$  (навчальна послідовність) задовольняє наступні дві умови: 1)  $z^k \in A, k \in N$ ; 2) кожний елемент множини  $A$  входить у цю послідовність нескінченну кількість раз. Не втрачаючи загальності, будемо вважати,

що  $\gamma = e^{i\varphi}$ , де  $-\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}$ . Покладемо

$w^0 = (0, \dots, 0)$  і будемо будувати послідовність векторів  $\{w^k\}$  наступним чином:

$$w^k = w^{k-1} + t_k h_\varphi(z^k) e^{i\varphi}, \quad (2)$$

де  $h_\varphi(z) = (\operatorname{Re}(\bar{z}_1 e^{-i\varphi}), \dots, \operatorname{Re}(\bar{z}_n e^{-i\varphi}), 1)$ , а коефіцієнт  $t_k$  визначається так:

$$t_k = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \operatorname{Re}(w^{k-1}, \bar{z}^k) \leq 0 \text{ і } z \in A_+, \\ -1, & \text{якщо } \operatorname{Re}(w^{k-1}, \bar{z}^k) \geq 0 \text{ і } z \in A_-, \\ 0, & \text{в інших випадках.} \end{cases} \quad (3)$$

Алгоритм побудови послідовності  $\{w^k\}$  за правилом (2) назвемо алгоритмом навчання НЕ.

**Теорема 2.** Якщо скінченні множини  $A_+$  і  $A_-$

є  $\gamma$ -відділимими, то послідовність вагових векторів (2) стабілізується через деяку кількість кроків на деякому векторі  $w^m$ , який відокремлює ці множини.

*Доведення.* Припустимо протилежне. Будемо вважати, що на кожному кроці алгоритму  $t_k \neq 0$  (можна відкинути такі  $z^k$ , для яких  $t_k = 0$ , оскільки на відповідних їм кроках алгоритму не змінюються вагові вектори). Тоді  $w^{m+1} = t_1 h_\varphi(z^1) e^{i\varphi} + \dots + t_m h_\varphi(z^m) e^{i\varphi}$ . Помножимо останню рівність скалярно на вектор  $w \in R(\gamma)$ , який відокремлює множини  $A_+$  і  $A_-$ . Без обмеження загальності можна вважати, що знайдеться таке  $d > 0$ , що  $\forall z \in A$  виконується нерівність  $(w, h_\varphi(z)) \geq d > 0$  (цього можна досягти змінивши відповідним чином вільний член  $w_{n+1}$ ). Тоді з нерівності Коші-Шварца отримасмо, що

$$(w, w^{m+1}) \geq (w, w^{m+1}) \geq \sum_{k=1}^m (w, h_\varphi(z^k)) \geq md.$$

З останньої нерівності випливає, що

$$(w^{m+1}, z) \geq \frac{m^2 d^2}{w^2}. \quad (4)$$

З іншого боку, підносячи рівність (2) скалярно до квадрату, отримасмо:

$$w^{k+1} = w^k + 2t_{k+1} \operatorname{Re}(w^k, h_\varphi(z^{k+1}) e^{i\varphi}) + h_\varphi(z^{k+1})^2.$$

Відповідно до алгоритму навчання всі вектори  $w^k$  задовольняють умову  $w^k = u^k e^{i\varphi}$ , де  $u^k \in R^{n+1}$ . Тому

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(w^k, h_\varphi(z^{k+1}) e^{i\varphi}) &= \operatorname{Re} \sum_{j=1}^n u_j^k e^{i\varphi} \operatorname{Re}(\bar{z}_j^{k+1} e^{-i\varphi}) e^{i\varphi} + \\ &+ \operatorname{Re}(u_{n+1}^k e^{i\varphi} \overline{e^{i\varphi}}) = \operatorname{Re} \sum_{j=1}^n u_j^k (x_j^{k+1} \cos \varphi - y_j^{k+1} \sin \varphi) + \\ &+ u_{n+1}^k = \operatorname{Re} \left( \sum_{j=1}^n \operatorname{Re}(u_j^k e^{i\varphi} (x_j^{k+1} + i y_j^{k+1})) + u_{n+1}^k e^{i\varphi} \overline{e^{i\varphi}} \right) = \\ &= \operatorname{Re} \left( \sum_{j=1}^n w_j^k \bar{z}_j^{k+1} + w_{n+1}^k \overline{e^{i\varphi}} \right) = \operatorname{Re}(w^k, \bar{z}^{k+1}). \end{aligned}$$

З (3) випливає, що  $t_k \operatorname{Re}(w^k, \bar{z}^{k+1}) \leq 0$ . Тоді з урахуванням попередніх рівностей і умови (1)



отримуємо, що

$$\|w^{k+1}\|^2 - \|w^k\|^2 \leq \|h_\varphi(z^{k+1})\|^2 \leq nc^2 + 1, \quad (k = 0, 1, \dots, m)$$

Просумуємо останню нерівність по  $k$  від 0 до  $m$ .  
Тоді

$$\|w^{m+1}\|^2 \leq \sum_{k=0}^m \|h_\varphi(z^{k+1})\|^2 \leq (m+1)(nc^2 + 1). \quad (5)$$

Нерівності (4) і (5) суперечливі при великих  $m$ .  
Отже, процес навчання (2) не може тривати нескінченно довго. Теорема доведена.

Як показує лема 2, вибір вагових коефіцієнтів з поля  $C$  не приводить до збільшення кількості нейрофункцій. В той же час використання комплексних векторів збільшує витрати пам'яті ЕОМ при побудові нейромереж і кількість операцій при обчисленні зважених сум. Все це приводить до необхідності вивчення НЕ з більш складними знаковими функціями, які б враховували специфіку комплексної площини. Розглянемо один з можливих підходів визначення функції активації. Візьмемо на площині деякий кут. Тоді можна визначити знакову функцію наступним чином:

$$\text{Asign } z = \begin{cases} 1, & \text{якщо } z \text{ лежить між сторонами кута,} \\ -1, & \text{в іншому випадку.} \end{cases}$$

Не втрачаючи загальності, можна обмежитися розглядом знакових функцій вигляду

$$\text{sign}_\varphi z = \begin{cases} 1, & 0 \leq \text{Arg } z \leq \varphi, \\ -1, & \text{в іншому випадку.} \end{cases} \quad (6)$$

Бульову функцію  $f: \{\alpha, \beta\}^n \rightarrow H_2$ , для якої для всіх  $z \in \{\alpha, \beta\}^n \times \{1\}$  справджується рівність  $f(z) = \text{sign}_\varphi(w, z)$ , будемо називати  $\varphi$ -нейрофункцією в алфавіті  $\{\alpha, \beta\}$ . Клас всіх  $\varphi$ -нейрофункцій в алфавіті  $\{\alpha, \beta\}$  позначимо через  $P_\varphi(\{\alpha, \beta\}, C)$ . Покажемо, що клас  $\varphi$ -нейрофункцій є розширенням класу нейрофункцій. Нехай  $w_1 = 1 - i$ ,  $w_2 = -1 + i$ ,  $w_3 = 1 + i$ . Тоді функція  $z_1 z_2$  належить класу  $P_{\frac{\pi}{2}}(H_2, C)$ ,

оскільки  $z_1 z_2 = \text{sign}_{\frac{\pi}{2}}(w, z)$ . Відомо, що функція

$z_1 z_2$  не є нейрофункцією. В той же час можна легко показати, що кожна нейрофункція є  $\varphi$ -нейрофункцією.

**Лема 3.** Для довільних алфавітів  $\{\alpha, \beta\}$ ,  $\{\gamma, \delta\}$  має місце взаємно однозначна відповідність  $P_\varphi(\{\alpha, \beta\}, C) \leftrightarrow P_\varphi(\{\gamma, \delta\}, C)$ .

Неважко навести приклади, які показують, що лема 2 і теорема 1 не виконуються для  $\varphi$ -нейрофункцій. Наведемо деякі результати, які стосуються  $\varphi$ -нейрофункцій.

**Теорема 3.** Якщо  $0 < \varphi < \pi$ , то бульова функція  $f(z)$  є  $\varphi$ -нейрофункцією в алфавіті  $\{\alpha, \beta\}$  тоді і тільки тоді, коли знайдуться такі нейрофункції  $f_1(z)$ ,  $f_2(z)$ , що має місце рівність  $f(z) = f_1(z) \wedge f_2(z)$ .

**Теорема 4.** Якщо скінченні множини  $A_1, A_2 \subset C^n \times \{1\}$  можна відокремити за допомогою НЕ зі знаковою функцією виду (5) при деякому  $\varphi \in (0, \pi)$ , то при довільному  $\psi \in (0, \pi)$  їх можна відокремити за допомогою НЕ зі знаковою функцією  $\text{sign}_\psi$  за допомогою алгоритму навчання, подібного до алгоритму (2).

#### Список використаних джерел

1. Айзенберг Н.Н., Иваський Ю.Л. Многозначная пороговая логика. – Київ: Наукова думка, 1977.
2. Уоссермен Ф. Нейрокомпьютерная техника: теория и практика. – М.: Мир, 1992.
3. Гече Ф.Е., Коцовський В.М. Оцінка числа бульових функцій, реалізованих на нейронних елементах. // Вісник Ужгородського університету. Серія: фіз.-мат. – 2002. – с. 32-37.
4. Aizenberg N.N., Aizenberg I.N., Krivosheev G.A. CNN based on Universal Binary Neurons: Learning algorithm with Error-Correction and Application to Impulsive-Noise Filtering on Gray-Scale Images // Proceedings of the Fourth International Workshop on Cellular Neural Networks and their Applications, Seville, Spain, June 24-26, 1996. – P. 309-314.
5. Айзенберг И. Н. Универсальный пороговый элемент над полем комплексных чисел // Кибернетика. – 1991. – № 3 с. 272-285.
6. Заенцев И. В. Нейронные сети: основные модели. – Воронеж: изд. ВГУ, 1999.
7. Горбань А.Н., Россиев Д.А. Нейронные сети на персональном компьютере. – Новосибирск: Наука, 1996.

Надійшла до редакції 10.10.2006



УДК 517.977.1

Кудін Г.І., канд. фіз.-мат. наук,<sup>1</sup>  
Бублик С.Б., асп.

# Синтез лінійних дискретних систем керування з крайовими умовами засобами псевдообернення. I

Розв'язана задача синтезу лінійної дискретної системи керування з крайовими умовами згідно критеріїв мінімуму нев'язки та норми головного розв'язку задачі на заданих однопараметричних підмножинах лінійних комбінацій векторів системи керування.

Ключові слова: лінійна дискретна система, керування, синтез, псевдообернення

<sup>1</sup> E-mail: kuding@univ.kiev.ua

Kudin G.I., cand. phys.-mat. nauk,<sup>1</sup>  
Bublik S.B., asp.

# Synthesis of the linear discrete systems control with boundary conditions by means of pseudo-inversion. I

The synthesis problem of the linear discrete control system with boundary conditions is solved as per criteria of minimum-residual and minimum-norm of principal solution of the problem on given one-parameter subsets of linear combinations of control system vector.

Keywords: linear discrete system, control, synthesis, pseudoinversion

Розглядається динамічна система керування з дискретним аргументом, яка описується системою рівнянь

$$x(k+1) = A(k)x(k) + b(k)u(k), \quad k = \overline{0, N}, \quad (1)$$

де  $x(k) \in R^{n \times 1}$  - вектор фазового стану системи,  $A(k) \in R^{n \times n}$  - відома матриця,  $b(k) \in R^{n \times 1}$  - невизначений вектор,  $u(k) \in R$  - керування.

Фазовий стан системи керування (1) має обмеження на кінцях інтервалу зміни аргументу:

$$C_1 x(0) = d_1, \quad (2)$$

$$C_2 x(N+1) = d_2, \quad (3)$$

де  $C_1 \in R^{s_1 \times n}$ ,  $C_2 \in R^{s_2 \times n}$  - відомі матриці,  $d_1 \in R^{s_1 \times 1}$ ,  $d_2 \in R^{s_2 \times 1}$  - відомі вектори.

Згідно результатів, викладених у роботі [1], система лінійних алгебраїчних рівнянь

$$A_1 x_u = d, \quad d^T = (d_1^T, d_2^T), \quad (4)$$

де

$$A_1 = (X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(N)) \in R^{s \times n_1}, \quad (5)$$

$$X_{(c)} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 X(N+1, 0) \end{pmatrix} \in R^{s \times n}, \quad (6)$$

$$s = s_1 + s_2, \quad n_1 = n + (N+1),$$

$$W_{(c)}(k) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(k)} b(k) \end{pmatrix} \in R^{s \times 1}, \quad k = \overline{0, N}, \quad (7)$$

$$0 \in R^{s_1 \times 1}, \quad A_{(c)}^{(k)} = C_2 A^{(k)} \in R^{s_2 \times n}, \quad A_{(c)}^{(0)} = C_2, \quad (8)$$

$$A^{(k)} = A(N-1)A(N-2)\dots A(k+1) \in R^{n \times n} \quad (9)$$

$$X(N+1, 0) = A(N)A(N-1)\dots A(0) \in R^{n \times n}, \quad (10)$$

а невідомий вектор

$$x_u^T = (x^T(0); u^T) \in R^n \quad (11)$$

сформовано з невідомих векторів

$$x(0) \in R^n, \quad u^T = (u^T(0); \dots; u^T(N)) \in R^{(N+1)}, \quad (12)$$

еквівалентна поставленій задачі (1) - (3).

## 1. Мінімізація нев'язки розв'язку задачі керування (1) - (3)

Якщо лінійна система рівнянь (4) при деякому визначеному наборі векторів системи керування  $b(k) \in R^n$  несумісна, тобто вектори-стовпчики матриці  $A_1$  утворюють лінійну оболонку, якій не належить вектор  $d$ , а, отже, мають місце випадки існування лише псевдорозв'язків - єдиного чи множини, то в термінах теорії псевдообернених і проєкційних операторів [2] це означає, що

$$\|d - A_1 x_u\|^2 = d^T Z(A_1^T) d > 0, \quad (13)$$

$$\text{де } x_u = A_1^T (A_1 A_1^T)^+ d + Z(A_1) v, \quad v \in R^n, \quad (14)$$

$$Z(A_1^T) = I_s - A_1 A_1^+, \quad Z(A_1) = I_{n_1} - A_1^+ A_1,$$

$Z(A_1^T)$ ,  $Z(A_1)$  - проєкційні оператори на ортогональні доповнення до лінійної оболонки стовпців та рядків матриці  $A_1$  відповідно.

Система керування (1) - (3) при невизначених векторах  $b(k) \in R^{n \times 1}$ ,  $k = \overline{0, N}$  розглядається за умов, коли ці вектори вибираються на зада-



них однопараметричних підмножинах лінійних комбінацій, а саме

$$b(\alpha_k, k) = b_0(k) + \alpha_k b_1(k), \quad k = \overline{0, N}, \quad (15)$$

де  $b_0(k), b_1(k) \in R^n$  задані вектори,

$\alpha_k \in [\alpha_k^h, \alpha_k^g]$ ,  $-\infty < \alpha_k^h < \alpha_k^g < \infty$  - параметри, які визначаються в процесі оптимізації.

Критерій оптимальності для задачі синтезу системи керування задається у такому вигляді

$$\alpha_k^{(0)} = \arg \min_{\alpha_k \in [\alpha_k^h, \alpha_k^g]} d^T Z(A_1^T(\alpha_k)) d, \quad k = \overline{0, N}, \quad (16)$$

тобто потрібно мінімізувати нев'язку розв'язку задачі керування.

Очевидно, що розв'язати оптимізаційну задачу (16) - це знайти мінімум функції багатьох змінних на багатомірному паралелепіпеді. Для розв'язання цієї задачі доцільно мати апіорну інформацію про характер залежності функції багатьох змінних від кожної із змінних. Наприклад, монотонність функції по кожній змінній на своєму сегменті гарантує знаходження глобального мінімуму. Отже, доцільно проаналізувати характер залежності функції  $d^T Z(A_1^T(\alpha_k)) d$  від параметра  $\alpha_k$ , вважаючи інші параметри замороженими.

Враховуючи властивість проекційного оператора  $Z(A_1^T)$  не змінюватись при поповненні матриці  $A_1$  вектор-стовпцем, якщо останній належить до лінійної оболонки стовпців матриці  $A_1$ , вважаємо, що вектор-стовпець  $b(\alpha_k, k) \forall \alpha_k \in [\alpha_k^h, \alpha_k^g]$  не належить до лінійної оболонки стовпців матриці

$$A_2(k) = (X_{(c)} : W_{(c)}(0) : \dots : W_{(c)}(k-1) : \\ : W_{(c)}(k+1) : \dots : W_{(c)}(N)) \quad (17)$$

і тому має місце представлення для проекційного оператора

$$Z(A_1^T(\alpha_k)) = Z(A_2^T(k)) - \\ - \frac{Z(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k) b^T(\alpha_k, k) Z(A_2^T(k))}{b^T(\alpha_k, k) Z(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k)} \quad (18)$$

Нескладно переконатись, що за таких умов

$$D(A_1^T(\alpha_k)) = D(A_2^T(k)) - \\ - \frac{(d^T Z(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k)) (d^T Z(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k))^T}{b^T(\alpha_k, k) Z(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k)}, \quad (19)$$

а після введення позначень

$$d_0 = d^T Z(A_2^T(k)) b_0(\alpha_k, k), \quad (20)$$

$$d_1 = d^T Z(A_2^T(k)) b_1(\alpha_k, k), \quad (21)$$

$$c_0 = b_0^T(\alpha_k, k) Z(A_2^T(k)) b_0(\alpha_k, k), \quad (22)$$

$$c_1 = b_0^T(\alpha_k, k) Z(A_2^T(k)) b_1(\alpha_k, k), \quad (23)$$

$$c_2 = b_1^T(\alpha_k, k) Z(A_2^T(k)) b_1(\alpha_k, k), \quad (24)$$

$$D(A_1^T(\alpha_k)) = D(A_2^T(k)) - \frac{(d_0 + d_1 \alpha_k)^2}{c_0 + 2c_1 \alpha_k + c_2 \alpha_k^2}. \quad (25)$$

В зв'язку з умовою, що вектор-стовпець  $b(\alpha_k, k) \forall \alpha_k \in [\alpha_k^h, \alpha_k^g]$  не належить до лінійної оболонки стовпців матриці  $A_2(k)$ , має місце нерівність

$$c_1^2 - c_0 c_2 < 0. \quad (26)$$

Мінімізація функції (25) еквівалентна максимізації функції

$$y(\alpha_k) = \frac{(d_0 + d_1 \alpha_k)^2}{c_0 + 2c_1 \alpha_k + c_2 \alpha_k^2}, \quad (27)$$

дослідження якої доцільно провести, виділивши два випадки.

Випадок 1. Коефіцієнт  $d_0 \neq 0$ .

Якщо ввести заміни змінної

$$\alpha_k d_1 / d_0 = \beta \quad (28)$$

та коефіцієнтів

$$q_0 = c_0 / d_0^2, \quad q_1 = c_0 / (d_0 d_1), \quad q_2 = c_2 / d_1^2, \quad (29)$$

то задача зводиться до максимізації функції

$$z(\beta) = \frac{(1 + \beta)^2}{q_0 + 2q_1 \beta + q_2 \beta^2} \quad (30)$$

на сегменті  $\beta \in [\alpha_k^h d_1 / d_0, \alpha_k^g d_1 / d_0]$ .

Екстремуми функція (30) досягає в точках

$$\beta_1 = -1, \quad \beta_2 = (q_1 - q_0) / (2(q_1 - q_2)), \quad (31)$$

де  $(q_1 - q_2) \neq 0$  в силу нерівності (26),

а значення функції (30) в цих точках такі

$$z_{\min}(\beta_1) = 0,$$

$$z_{\max}(\beta_2) = \frac{(1 + \beta_2)^2}{q_0 + 2q_1 \beta_2 + q_2 \beta_2^2} > 0. \quad (32)$$

Випадок 2. Коефіцієнт  $d_0 = 0$ .

Виникає необхідність дослідити функцію

$$y(\alpha_k) = \frac{d_1^2 \alpha_k^2}{c_0 + 2c_1 \alpha_k + c_2 \alpha_k^2}, \quad (33)$$

властивості якої легко описати, маючи всі характеристики функції (27), бо заміна змінної в функції (33)

$$\alpha_k = \beta + 1 \quad (34)$$

дає функцію

$$z_1(\beta) = \frac{(1 + \beta)^2}{l_0 + 2l_1 \beta + l_2 \beta^2}, \quad (35)$$

для якої виконується умова

$$l_1^2 - l_0 l_2 < 0. \quad (36)$$



## 2. Мінімізація норми головного розв'язку задачі (1) - (3)

Система керування з дискретним аргументом (1)–(3) при невизначених векторах  $b(k) \in \mathbb{R}^n$ ,  $k = \overline{0, N}$ , може розглядатись за умов, коли ці вектори вибираються з метою визначити можливе мінімальне значення норми головного розв'язку системи (14) - вектору  $x_u = A_1^T (A_1 A_1^T)^+ d$  на заданих однопараметричних підмножинах лінійних комбінацій (15). Вектори  $b(k) \in \mathbb{R}^n$ ,  $k = \overline{0, N}$ , вибирати треба не порушуючи умови існування розв'язку системи (4).

Критерій умовної оптимальності в цьому випадку записується у такому вигляді

$$\alpha_k^{(0)} = \arg \min_{\alpha_k \in [\alpha_k^u, \alpha_k^g]} d^T R(A_1^T(\alpha_k)) d, \quad k = \overline{0, N}, \quad (37)$$

за умови виконання рівності

$$d^T Z(A_1^T(\alpha_k)) d = 0, \quad (38)$$

де  $R(A_1^T) = (A_1^T)^+ A_1^T$  - проекційний оператор.

Доцільно проаналізувати характер залежності функції  $d^T R(A_1^T(\alpha_k)) d$  від параметра  $\alpha_k$ , вважаючи інші параметри  $\alpha_i$ ,  $i = \overline{0, N}$ ,  $i \neq k$  замороженими.

Оптимізаційна задача на умовний екстремум суттєво спроститься, якщо при виборі векторів системи керування

$$b(\alpha_k, k) = b_0(k) + \alpha_k b_1(k)$$

вибрати вектори  $b_0(k)$ ,  $b_1(k)$ , для яких виконуються обмеження:

$$d^T Z(A_1^T(\alpha_k) \Leftrightarrow b_j(k)) d = 0, \quad j = \overline{0, 1}.$$

Знак  $\Leftrightarrow$  означає заміну  $k$ -го стовпчика матриці  $A_1^T(\alpha_k)$  стовпчиком  $b_j(k)$ .

Для подальших досліджень важливі такі співвідношення:

$$Z(A_1^T(\alpha_k)) = Z(A_2^T(k)), \quad (39)$$

$$R(A_1^T(\alpha_k)) = R(A_2^T(k)) -$$

$$\frac{R(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k) b^T(\alpha_k, k) R(A_2^T(k))}{1 + b^T(\alpha_k, k) R(A_2^T(k)) b(\alpha_k, k)}$$

Нескладно переконатись, що функція

$$D_{\text{гол}}(A_1^T(\alpha_k)) = d^T R(A_1^T(\alpha_k)) d \quad (40)$$

- критерій оптимальності задачі (37) за таких умов матиме вигляд

$$D_{\text{гол}}(A_1^T) = D_{\text{гол}}(A_2^T(k)) - \quad (41)$$

$$\frac{(d^T R(A_1^T(k)) b(\alpha_k, k)) (d^T R(A_1^T(k)) b(\alpha_k, k))^T}{1 + b^T(\alpha_k, k) R(A_1^T(k)) b(\alpha_k, k)},$$

який, в свою чергу, після введення позначень

$$r_0 = d^T R(A_2^T(k)) b_0(\alpha_k, k), \quad (42)$$

$$r_1 = d^T R(A_2^T(k)) b_1(\alpha_k, k), \quad (43)$$

$$l_0 = 1 + b_0^T(\alpha_k, k) R(A_2^T(k)) b_0(\alpha_k, k), \quad (44)$$

$$l_1 = b_0^T(\alpha_k, k) R(A_2^T(k)) b_1(\alpha_k, k), \quad (45)$$

$$l_2 = b_1^T(\alpha_k, k) R(A_2^T(k)) b_1(\alpha_k, k), \quad (46)$$

можна переписати так

$$D_{\text{гол}}(A_1^T(\alpha_k)) = D_{\text{гол}}(A_2^T(k)) - \frac{(r_0 + r_1 \alpha_k)^2}{l_0 + 2l_1 \alpha_k + l_2 \alpha_k^2}. \quad (47)$$

Так як  $R(A_2^T(k))$  - проекційний оператор, то параметри задачі  $l_0, l_1, l_2$  задовільняють нерівності

$$l_1^2 - l_0 l_2 < 0, \quad (48)$$

бо  $\forall \alpha_k$  з сегменту  $[\alpha_k^u, \alpha_k^g]$  має місце

$$l_0 + 2l_1 \alpha_k + l_2 \alpha_k^2 > 0. \quad (49)$$

Дослідження функції (47) проводиться по схемі, розглянутій раніше.

Таким чином, за умов поставленої вихідної задачі, виявлено умови, які гарантують за скінчене число кроків мінімізувати як функцію нев'язки розв'язку задачі, так і норму головного розв'язку на заданих однопараметричних підмножинах лінійних комбінацій множини вектор-стовпців системи.

## Література

1. Бублик С.Б., Кудін Г.І. Системний аналіз задачі керування лінійною системою з дискретним аргументом і крайовими умовами. //Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. науки.- 2004.- №3. - С. 157-164.
2. Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П. Применение псевдообратных и проекционных матриц к исследованию задач управления, наблюдения и идентификации. //Кибернетика и системный анализ. 2002. - №4. - С. 107-124.

Надійшла до редколегії 16.03.2007р.



УДК 519.925.51

Кулян В.Р., к.т.н, доц., Рутіцька В.В., к.т.н.,  
Юнькова О.О., к.ф.-м.н., доц.

## Множина досяжності в задачах фінансового менеджменту

*Розглядається проблема побудови математичної моделі та управління портфелем цінних паперів як задача оптимального керування динамічною системою.*

*Ключові слова: математична модель, оптимальний портфель, оптимальне керування.*

\*E-mail: kulyan@unicyb.kiev.ua

Розглянемо об'єкт керування, який заданий системою рівнянь

$$\dot{x} = f(x, u, t), \quad t \geq s. \quad (1)$$

Тут  $x = (x_1, \dots, x_n)$  –  $n$ -вимірний вектор фазових координат, або вектор стану системи ( $x \in R^n$ );  $u = (u_1, \dots, u_m)$  –  $m$ -вимірний вектор керувань ( $u \in R^m$ );  $t$  – час;  $f = (f_1, \dots, f_n)$  – задана вектор-функція своїх аргументів. Задавши функцію  $u(t)$ , яка задовольняє при  $t \geq s$  обмеженню

$$u(t) \in U, \quad (2)$$

де  $U$  – задана замкнута множина у  $m$ -мірному просторі керувань; а також початковий вектор  $x^0$ , що належить множині початкових станів  $M$ :

$$x(s) = x^0, \quad (3)$$

яка є замкнутою у  $n$ -вимірному просторі станів і визначає множину можливих початкових станів системи; отримаємо задачу Коші

$$\dot{x} = f(x, u(t), t), \quad t \geq s \quad (4)$$

$$x(s) \in M, \quad (5)$$

Будемо вважати, що розв'язок задачі (4), (5) існує і єдиний. Це фазова траєкторія.

Згідно означення [1], множиною досяжності  $D(t, s, M)$  системи керування (1) з початковою умовою (5) при виконанні (3) є сукупність кінців траєкторій  $x(\cdot)$  цієї системи,

V.R. Kulyan, c.t.n., doc., V.V. Rutytska, c.t.n., O.O. Yun'kova, c.f.-m.n., doc.

## Achievement set for financial management problems decision

*The problems of construct of mathematical model and achievement set for optimal portfolio selection are investigated.*

*Key Words: mathematical model, optimal portfolio, optimal control.*

що починаються у момент  $s$  в точках множини початкових станів  $M$ . Розв'язок задачі Коші запишемо у вигляді  $x = x(t, s, x^0)$ , для  $u(t) = u^*(t)$  – вибране керування, аналогічному запису множини досяжності  $D(t, s, M)$ .

На даному етапі дослідження про застосування множини досяжності для формулювання та розв'язання задач фінансового менеджменту, наприклад, портфельного аналізу, можна сформулювати такі нові прикладні проблеми:

1. Знаючи множину досяжності  $D(t, s, M)$  системи керування можна оцінити можливості керування. Так, необхідно відповісти на питання, чи можливо перевести систему керування у заданий фазовий стан  $x^*$  у деякий фіксований момент  $T > s$ .
2. Перевести систему у заданий момент  $T$  на задану множину  $N$  у фазовому просторі. Ця задача, очевидно, має розв'язок у тому і тільки у тому випадку, коли  $N \cap D(t, s, M) \neq \emptyset$ .
3. Знайти таке керування  $u(t)$  і такий початковий вектор  $x(s) \in M$ , що для системи (1) при виконанні обмежень (2) досягається мінімальне значення функціонала  $J = F(x(T))$ ,  $T > s$ . (6)

Це задача з вільним правим кінцем траєкторії, фіксованим часом та термінальним



функціоналом. Її можна сформулювати і як задачу про пошук мінімуму на множині досяжності

$$F^* = \min_{x \in D(T, s, M)} F(x). \quad (7)$$

Ця задача не є задачею оптимального керування, а являється задачею мінімізації функції  $n$  змінних на заданій множині.

4. Необхідно знайти керування  $u(t)$ , які задовольняють умовам (2), (3), при яких система (1) попаде на задану термінальну множину  $N$  у фазовому просторі за найменший час.

До найбільш важливих властивостей множини досяжності, які можна використати при розв'язанні задач прикладного фінансового аналізу можна віднести еволюційність

$$D(t, s, M) = D(t, \tau, D(\tau, s, M))$$

та опуклість [3].

Розглянемо задачу про оптимізацію портфеля цінних паперів на інтервалі часу  $t \in [t_0, T]$

$$\sum_i x_i(t) r_i(t) \geq P, \quad \dot{r}(t) = A(t)r(t) + g(t), \quad (8)$$

$$\sum_i x_i(t_k) \leq 1, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

$$x_i(t_k) \geq 0,$$

де  $x_i$  – частка цінного паперу  $i$ -го виду у портфелі;  $r_i$  – норма прибутковості  $i$ -го цінного паперу;  $P$  – заданий рівень прибутковості портфеля;  $n$  – кількість інтервалів розбиття часового проміжку  $[t_0, T]$

Застосовуючи процедуру побудови динамічної моделі формування ціни акції [2], загальний вигляд моделі динаміки ціноутворення портфеля акцій матиме вигляд

$$\dot{r}_p(t) = A(t)r_p(t) + B(t)u(t) + g(t),$$

$$u(t) \in U, \quad r_p(t_0) = r_{p0},$$

де  $u(t)$  – функція керувань, множина досяжності якої  $D(t, t_0, r_0)$  є опуклою. Необхідно побудувати керування  $u(t)$  і

відповідну траєкторію  $r(t)$ , на яких досягає свого мінімального значення функціонал

$$J = (x, r(T)), \quad T > t_0, \quad |x| > 0.$$

Тут  $T$  – фіксований момент закінчення процесу формування оптимального портфеля;  $x$  – заданий ненульовий вектор структури портфеля цінних паперів. В такій постановці це є задача з фіксованим часом і вільним правим кінцем траєкторії.

Нехай її розв'язком є оптимальний процес  $(u^*(t), r^*(t))$ . Тоді

$$J^* = (x, r^*(t)) = \min_{x \in D(T, t_0, x^0)} (x, r), \quad (9)$$

Очевидно, що

$$\max_{x \in D(T, t_0, x^0)} (-x, r) = -J^*.$$

Опорною функцією множини досяжності  $D(T, t_0, x^0)$  буде

$$\rho(-x, D(T, t_0, x^0)) = -J^*.$$

Розв'язуючи цю задачу для можливих часток складових портфеля  $x$ , нормованих умовою  $\|x\| = 1$ , можна побудувати опорну функцію множини досяжності  $D(T, t_0, x^0)$ .

При дослідженні задач задач з фазовими та змішаними обмеженнями

$$\{x(t), r(t)\} \in Y(t)$$

систему (1) заміщають багатокроковою системою з дискретним часом, а множину  $Y(t)$  – опуклим багатогранником. Далі будується множина досяжності апроксимуючої дискретної системи, для чого використовуються методи теорії лінійних нерівностей.

Задача оптимального керування портфелем цінних паперів може бути розв'язана за допомогою, наприклад, методу послідовних наближень, де для вибраного початкового складу портфеля  $x_{p0}$  на кожному кроці ітераційної процедури за допомогою розв'язання відповідних задач Коші та з використанням умови максимуму функції Гамільтона – Понтрягіна шукають нові значення функції керувань.



Що стосується динаміки формування вартості портфеля цінних паперів, то детальніше її можна описати рівнянням

$$\dot{r}_p = (\alpha_1 S M_{ind}(t) + \alpha_2 I(t)) r_p(t) + \alpha_3 (x(t), r(t)) \quad (10)$$

У цьому співвідношенні перший доданок є фундаментальною складовою і враховує макроекономічний вплив при формуванні портфеля цінних паперів; другий – структурну. Тут  $x(t)$  – вектор часток цінних паперів, представлених на ринку, у портфелі;  $r(t)$  – вектор, координатами якого є норми прибутковостей відповідних цінних паперів. Коефіцієнти  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  – відповідний обернений час реакції системи на зміну динаміки. Динаміка ж формування вартості акції, як показано у [1] може бути описана співвідношенням

$$\dot{r}_i = (\bar{\alpha}_1 S M_{ind}(t) + \bar{\alpha}_2 I(t)) r_i(t) + \sum_j \rho_{ij} r_j + \varepsilon(t). \quad (11)$$

Для визначення або побудови множинних оцінок параметрів математичних моделей (11), (12) використовують методи імітаційного моделювання або самоорганізації моделі.

До сформульованих вище задач оптимізації процесу інвестування в цінні папери, зважаючи на сказане вище, можна додати такі:

5. Задача про оптимальне розбиття інтервалу інвестування, або, так звана, задача про оптимізацію моментів диверсифікації інвестиційного портфеля.
6. Задача про побудову оптимального початкового портфеля цінних паперів на основі інформації про бажані параметри портфеля у кінцевий момент часу.

Алгоритм розв'язання задачі оптимального інвестування у цінні папери можна записати у вигляді:

Крок 1: Знайти максимальне значення  $\Delta t$  для якого існує розв'язок задачі оптимального керування (1), (2), (3), (6).

Крок 2: Побудувати множину досяжності  $D(t, t - \Delta t, M_M)$  для системи (1) для моменту часу  $T - \Delta t$ .

Крок 3: Виконувати кроки 1,2 до тих пір, доки  $t \neq t_0$ .

Крок 4: Побудувати початкову множину досяжності  $D(t, t_0, M_{t_0})$ .

Множина  $D(t, t_0, M_{t_0})$  є множиною початкових портфелів цінних паперів, вартість яких, за умов відповідної диверсифікації, у кінцевий момент часу  $T$  є наперед заданою.

Процедура розв'язання задачі оптимального керування параметрами портфеля цінних паперів ґрунтується на побудові функції Гамільтона-Понтрягіна  $H(r_p(t), x(t), \phi(t), t)$

$$\text{де } \frac{d\phi(t)}{dt} = - \frac{\partial H(r_p(t), x(t), \phi(t), t)}{\partial r_p}$$

Задача оптимального керування портфелем цінних паперів може бути розв'язана також за допомогою методу послідовних наближень, де для вибраного початкового складу портфеля  $x_p^0$  на кожному кроці ітераційної процедури за допомогою розв'язання відповідних задач Коші та з використанням умови максимуму функції Гамільтона-Понтрягіна будують нове значення функції керувань.

Система (12) є лінійною з нестационарними елементами на діагоналі.

Розглянемо випадок, коли задано обмеження на координати фазового стану динамічної системи формування ринкової вартості портфеля цінних паперів. Це є актуальна прикладна задача інвестиційного менеджменту. Кожен інвестор відслідковує вартість портфеля цінних паперів, ним визначено моменти, в які параметри портфеля мають задовольняти накладеним на них обмеженням. Наприклад: прибутковість та ризикованість цінних паперів, що входять до складу портфеля цінних паперів, мають фіксовані інвестором обмеження. В той же час, прибутковість і ризикованість портфеля цінних паперів повинні задовольняти раніше визначеним інвестором обмеженням, при цьому структура портфеля цінних паперів на початок та упродовж періоду інвестування повинна бути оптимальною.

Нехай в момент  $t=T$  на стан системи (11) накладено обмеження:

$$q_i(r(T), \lambda) = 0, i \in \overline{1, N_1}, \quad (12)$$

де  $\lambda$  – об'єднаний вектор параметрів системи за яким буде здійснюватись оптимізація. Зміна значень компонент вектора  $\lambda$  обумовлює можливі зміни ринкових вартостей цінних паперів та стану ринку. Функції  $q_i(r, \lambda)$  – це неперервно-диференційовані скалярні функції



своїх аргументів. Дані функції саме і визначають обмеження, які інвестор накладає на параметри, що характеризують портфель цінних паперів: прибутковість і ризикованість.

Нехай сукупність усіх траєкторій системи (12), які задовольняють (13), в початковий момент часу  $t = t_0$  належать множині  $G_0$ , міра якої характеризується функцією

$$I = \Phi(r(t_0)). \quad (14)$$

Необхідно визначити такий вектор параметрів  $\lambda^0$ , який би функції (14) надавав максимального значення. Це дозволить інвестору визначити оптимальну структуру портфеля у початковий момент інвестування.

Визначимо функції:

$$r(t) = \varphi(r(t_0), t, t_0, \lambda), \quad r(t_0) = \varphi_1(r(t), t, t_0, \lambda),$$

за допомогою яких екстремальну задачу для (14) можна записати у вигляді:

$$\max_{\lambda} \Phi(\varphi_1(r(T), T, t_0, \lambda)), \quad q_i(r(T), \lambda) = 0, i \in \overline{1, N_1}.$$

Ця задача може бути розв'язана відомими методами нелінійного програмування, наприклад: методом проекції градієнтів, методом штрафів, коли можливою є побудова взаємно-однозначного відображення.

Для знаходження градієнту функції

$$L(r(T), r(t_0), \lambda) = \Phi(r(t_0)) + \sum_{i=1}^{N_1} \omega_i q_i(r(T), \lambda)$$

необхідно розв'язати систему диференціальних рівнянь

$$\frac{d\psi^{(i)}(t)}{dt} = - \frac{\partial H(\psi^{(i)}(t), r(t), t, \lambda)}{\partial r}, i \in \overline{1, N_1} \quad (15)$$

з крайовими умовами

$$\psi^{(i)}(T) = - \frac{\partial q_i(r(T), \lambda)}{\partial \lambda}.$$

Тут:  $\omega_i$  - функція штрафу, яка дорівнює 0, якщо  $i$ -те обмеження не порушується і дорівнює малому від'ємному значенню у випадку порушення умови

$H(\psi^{(i)}(t), r(t), t, \lambda) = \psi^{(i)T} f(r(t), \lambda), t, \lambda)$  функція Гамільтона, за допомогою якої знаходимо градієнт критерія якості за вектором  $\lambda$ .

Якщо порушень фазових обмежень декілька, то для розв'язання оптимізаційної задачі, будемо максимізувати функцію (14). Такий же підхід можна застосувати у випадку, коли обмеження на фазові координати задаються у формі нерівностей:

$$q_i(r(t), t, \lambda) \leq 0, i \in \overline{1, N_1}.$$

На інтервалі  $[t_0, T]$  вибираємо точки

$$\tau_i, i \in \overline{0, Q}, \quad \tau_0 = t_0, \quad \tau_Q = T, \quad Q = \text{const} \quad i$$

обмеження враховуємо тільки в моменти  $\tau_i$ :

$$q_i(r(\tau_j), \tau_j, \lambda) \leq 0, i \in \overline{1, N_1}, j = \overline{0, Q}.$$

Для визначення градієнту функції цілі за параметрами оптимізації будемо інтегрувати зліва направо  $N_1$  спряжених систем:

$$\frac{d\psi^{(i)}(t)}{dt} = \frac{\partial H(\psi^{(i)}(t), r(t), t, \lambda)}{\partial r},$$

$$\psi^{(i)}(T) = -\mu_{iT} \frac{\partial q_i(r(T), \lambda)}{\partial r}, i \in \overline{1, N_1}.$$

У точках  $\tau_i$ , в яких порушується  $i$ -те обмеження, вектор-функції  $\psi^{(i)}(t)$  мають стрибки вигляду:

$$\psi^{(i)}(\tau_j - 0) = \psi^{(i)}(\tau_j + 0) - \mu_{ij} \frac{\partial q_i(r(\tau_j), \tau_j, \lambda)}{\partial r}, \text{ де}$$

$\mu_{iT} = 1$  у випадку порушення  $i$ -го обмеження в момент  $t = T$ , і  $\mu_{iT} = 0$  інакше. Аналогічно  $\mu_{ij} = 1$  у випадку порушення  $i$ -го обмеження в момент  $\tau_j$  та  $\mu_{ij} = 0$  у іншому випадку. Далі можливим є застосування звичайної градієнтної процедури.

Отже, за допомогою описаного вище методу оптимізації динамічної системи при обмеженнях на фазові координати і параметри можна чисельно розв'язувати задачі моніторингу інвестиційної діяльності на ринку цінних паперів.

## Література

1. Крылов И.А., Черноусько Ф.Л. Алгоритм метода последовательных приближений для решения задач оптимального управления. - М.: Наука, 1971. - 258с.
2. Гаращенко Ф.Г., Кулян В.Р., Рутцкая В.В. Качественный анализ математических моделей инвестиционного менеджмента// Кибернетика и вычислительная техника. - 2005. - №148. - С 279-285.
3. Бушенков В.А., Лотов А.В. Методы построения и использования обобщенных множеств достижимости. - М.: Вычислительный центр АН СРСР, 1982. - 243с.

Надійшла до редакції 01.03.2007



УДК 519.925

Меркур'єв\* М.Г., аспірант

## Стійкість неперервних гібридних автоматів

Отримано умови стійкості тривіальних фазових орбіт гібридних автоматів, що не потребують обчислення розв'язків системи. Умови побудовано за допомогою  $s$ -функцій Ляпунова.

Ключові слова: сімейство функцій Ляпунова, тривіальна фазова орбіта,  $s$ -функції Ляпунова.

\*E-mail: mercury13@ukr.net

У динамічних системах можуть виникати якісно різні й різномасштабні процеси. Труднощі дослідження таких систем очевидні. Прикладом може бути система, що описує рух вантажного літака. При моделюванні руху, необхідно врахувати різну поведінку літака, що відбувається на різних швидкостях і, відповідно, використовувати різні математичні моделі. Іноді вдається розділити швидкі й повільні рухи та розглядати їх окремо. У цьому випадку кожна з моделей має свій характерний масштаб часу та фізичні властивості [1]. Подібні задачі також виникають в системах автоматичного керування, коли керуючий вплив є дискретним.

Такі процеси, що описуються набором з  $N$  різних математичних моделей, зветься неперервно-дискретними. Ці системи неможливо звести до суто дискретних моделей, оскільки динаміка її неперервних компонентів може бути досить складною. Але їх неможливо подати і в рамках звичайної теорії динамічних систем, оскільки в системі можуть виникати події, в результаті яких миттєво змінюється поведінка і структура системи [8].

Неперервно-дискретні процеси можна описати такими формалізмами:

- системи з переключенням з однієї моделі на іншу в заздалегідь задані моменти часу;
- системи з переключенням в недетерміновані (випадкові) моменти часу;
- системи з переключенням за станом — тобто, система перемикається з однієї

Mikhail Merkuryev\*, PhD student

## Stability of continuous hybrid automata

Conditions of stability for trivial state orbits of hybrid automata that don't require solutions of the automaton are obtained. The conditions are based on Lyapunov  $s$ -functions.

Key Words: family of Lyapunov-like functions, trivial state orbit, Lyapunov  $s$ -functions.

математичної моделі на іншу, коли її траєкторія потрапляє в деяку множину.

В даній статті розглядається останній підхід.

Нехай в  $i$ -му локальному стані процес описується системою диференціальних рівнянь

$$\dot{x}(t) = f_i(t, x(t)) .$$

Багато досліджень стійкості полягали у визначенні сімейства функцій Ляпунова  $\{V_i, i=1, \dots, N\}$ , кожна з яких пов'язана з векторним полем  $f_i(t, x(t))$ . Функція Ляпунова для системи  $\dot{x} = f(x)$  і точки рівноваги  $\bar{x}$  — це дійсна функція  $V_i(x)$  (з неперервними похідними), що визначена в околі  $\bar{x}$  і така, що задовольняє умови:

— додатно визначена  $V(\bar{x}) = 0$ ,  
 $V(x) > 0, \bar{x} \neq x$ ;

— від'ємно визначена похідна  
 $\dot{V}(x) = \frac{dV(x)}{dx} f(x) \leq 0$ .

Існуючі підходи до дослідження стійкості базуються на побудові сімейства функцій Ляпунова, що задовольняють додаткову умову незростання її значень на траєкторіях системи у точках перемикань. Наприклад, в [10, 11] для асимптотичної стійкості передбачається виконання умови

$$V_j(x(t_{j+1})) - V_i(x(t_{i+1})) \leq -\gamma \|x(t_{i+1})\|^2, \gamma > 0,$$

де  $t_i < t_j, i < j \in$  моменти часу перемикання.



$$V_j(x(t_{j+1})) - V_i(x(t_{j+1})) \leq -\gamma \|x(t_{j+1})\|^2, \gamma > 0,$$

де  $t_i < t_j, i < j$  є моменти часу перемикавання.

Найбільш часто в дослідженнях стійкості використовується умова вигляду [6]

$$V_i(x(t_{i,k})) \leq V_i(x(t_{i,k-1})),$$

де  $t_{i,k}$  означає  $k$ -й момент часу переходу у векторне поле  $f_i$ .

У роботах [13,14] використовується поняття слабкої функції Ляпунова, тобто для кожної функції  $V_i$  попередня умова замінена виразом:

$$V_j(x(t)) \leq h(V_i(x(t_j))), t \in (t_j, t_{j+1}),$$

де  $h: R^+ \rightarrow R^+$  — неперервна функція, що задовольняє початкову умову  $h(0)=0$ ,  $t_j$  — довільний момент часу перемикавання.

Таким чином, подібні умови стійкості неконструктивні, та їх перевірка незручна через залежність від розв'язків систем диференціальних рівнянь.

В [5] пропонується використовувати схожий підхід. Але цей підхід дозволяє досліджувати стійкість гібридних автоматів, розв'язуючи лише алгебраїчні рівняння, в які входять  $s$ -функції та не використовувати значення траєкторій в точках перемикавань.

В запропонованій статті пропонується використовувати введені в [5]  $s$ -функції для аналізу стійкості гібридних автоматів з неперервним переключенням. Передбачається отримати умови, що визначають стійкість тривіальних фазових орбіт у випадках з будь-якою комбінацією стійких та нестійких локальних систем. Будемо вважати, що поведінка в локальних станах описується звичайними автономними диференціальними рівняннями.

Нехай відомо, що динаміка процесу описується різними математичними моделями в  $N$  різних станах. Введемо множину  $Q = \{1, \dots, N\}$  для нумерації цих станів. Для формалізації динаміки об'єкта будемо використовувати в кожному локальному стані системи автономних диференціальних рівнянь.

Позначимо через  $X = \{x_1, \dots, x_n\}, n \geq 0, x_i \in R$  дійсні фазові змінні, а через  $F = \{f_i : Q \times R^n \rightarrow R^n, i = \overline{1, N}\}$  — множину

неперервних вектор-функцій, що задовольняють умову Ліпшица. На початку функціонування необхідно задавати початкові умови системи: номер локального стану та значення неперервних координат. Для ініціалізації цих значень введемо множину  $Init : Init \subset Q \times R^n$ . Запис  $(i, x) \in Init$  означає, що динаміка починається з  $i$ -го стану та описується  $i$ -ю системою диференціальних рівнянь. При цьому початкове значення фазової змінної дорівнює  $x$ .

Нехай система перебуває в  $i$ -му стані. Тоді для фазових змінних виконується умова належності до деякої множини, що описує цей стан. І поки виконується ця умова, динаміка буде описуватися  $i$ -ю системою диференціальних рівнянь. Для задання цієї умови введемо позначення  $Inv : Inv \subset Q \times R^n$ . Множина  $Inv_i = \{x : (i, x) \in Inv\}$  є областю визначення  $i$ -ї системи диференціальних рівнянь.

Для переключення із стану в стан необхідно задати умову такого переходу.  $Jump$  — це множиннозначна функція

$Jump : Q \times R^n \rightarrow \beta(Q \times R^n)$ , де через  $\beta(\cdot)$  позначено множину усіх підмножин. Якщо  $Jump(i, x) \neq \emptyset$ , то, опинившись у стані  $(i, x)$ , автомат недетермінованим чином переходить в один із станів з множини  $Jump(i, x)$ .

Означення 1 [7]. Гібридним автоматом назовемо кортеж  $H = (Q, X, F, Init, Inv, Jump)$ .

Гібридні автомати є розширенням формалізму диференціальних рівнянь з розривною правою частиною [4]. Є дві відмінності між гібридними автоматами і диференціальними рівняннями з розривною правою частиною. По-перше, траєкторії диференціальних рівнянь з розривною правою частиною всюди неперервні, у той час як у гібридного автомата в точках перемикавання вони можуть мати розрив. По-друге, області визначення локальних станів  $Inv_i$  можуть перетинатися, і задання лише одних неперервних координат ( $x \in R^n$ ) недостатньо, щоб задати стан системи.

У класичній динамічній системі роль часу виконувала незалежна змінна  $t$ . Час був упорядкований, неперервний і рівномірно пробігав значення від нуля до нескінченності:



$[0, \infty)$ . У гібридній системі розглядаються розв'язки рівняння на послідовно розташованих відрізках часу, тому природно назвати цю послідовність часових відрізків часом. Ця послідовність може перетворюватись у скінченну послідовність або у один інтервал  $[\tau_M, \infty)$  у випадку, якщо гібридна система вироджується в класичну динамічну систему.

**Означення 2.** Фазовою орбітою гібридного автомата для будь-якого  $t_0 \in R$  і будь-якої пари  $(q_0, x_0) \in \text{Init}$  назвемо послідовність  $(\tau_i, q_i, x_i(t), \tau'_i)_{i=1}^M$  з такими властивостями:

1.  $M$  — натуральне число або нескінченність; при скінченному  $M$  можливо  $\tau'_M = \infty$ ;
2.  $\tau_1 = t_0, x_1(t_0) = x_0, q_1 = q_0$ ;
3. На відрізку  $(\tau_i, \tau'_i)$  поведінка автомата описується диференціальним рівнянням  $\frac{dx_i(t)}{dt} = F(q_i, x_i(t))$ , причому  $(q_i, x_i(t)) \in \text{Inv}$  і  $\text{Jump}(q_i, x_i(t)) = \emptyset$ ;
4. В точках  $\tau'_i$  виконується  $\tau_{i+1} = \tau'_i$  і  $(q_{i+1}, x_{i+1}(\tau_{i+1})) \in \text{Jump}(q_i, x_i(\tau'_i))$ ;
5. Якщо  $M$  скінченне, цю послідовність неможливо продовжити, не порушивши правила 1—4.

Відмітимо, що якщо множина  $\text{Jump}(q_i, x_i(\tau'_i))$  містить більше за одну точку, переключення відбувається недетермінованим чином в одну з цих точок.

Таким чином, поведінка реального об'єкта може бути цілком задовільно описано послідовністю «склеєних» між собою розв'язків диференціального рівняння на окремих проміжках.

Послідовність відрізків  $\tau = \{\tau_i, \tau'_i\}_{i=1}^M$  назвемо гібридним часом [7].

Є декілька типів фазових орбіт гібридного автомата, а саме:

1. Якщо  $M = \infty, \lim_{i \rightarrow \infty} \tau'_i = \infty$  або  $M < \infty, \tau'_M = \infty$ , це звичайна орбіта. До цього ж класу можна віднести випадок  $M < \infty, \tau'_M < \infty, \lim_{t \rightarrow \tau'_M} |x(t)| = \infty$  (розв'язок іде до нескінченності за скінченний час).

2. Якщо  $M < \infty, \tau'_M < \infty$  та  $\lim_{t \rightarrow \tau'_M} |x(t)| < \infty$ , орбіта зветься тупиковою.

3. Нарешті, якщо  $M = \infty, \lim_{i \rightarrow \infty} \tau'_i < \infty$ , то гібридний автомат робить нескінченну кількість переключень за скінченний час. Таку орбіту називають зенонівською (за аналогією з парадоксом Зенона про Ахіллеса та черепаху). Є дві причини появи тупикових орбіт.

а) розв'язок  $i$ -ї системи диференціальних рівнянь виходить за межі області  $\text{Inv}_i$  і не робить переключення;

б) на одній і тій же кривій відбувається переключення зі стану  $i$  в стан  $j$  та, навпаки, з  $j$  в  $i$ . Просте означення 2 вважає цю ситуацію тупиком. Більш докладні означення, які дозволяють працювати з такими розв'язками, наведені в [4].

**Означення 3.** Неперервний стан  $x = 0$  назвемо тривіальною фазовою орбітою гібридного автомата  $H$ , якщо існує непорожня множина  $\bar{Q} \subset Q$  така, що для всіх  $i \in \bar{Q}$  виконується

1. з  $(i', z') \in \text{Jump}(i, 0)$  випливає, що  $z' = 0$  та  $i' \in \bar{Q}$ ;
2.  $f(i, 0) = 0$  для всіх  $i \in \bar{Q}$ .

**Означення 4.** Тривіальна фазова орбіта  $x = 0$  гібридного автомата  $H$  називається стійкою за Ляпуновим, якщо для довільного  $\varepsilon > 0$  існує  $\delta > 0$  таке, що для всіх  $\chi = (\tau, i, x)$ , що задовольняють умову  $|x_0| < \delta$ , виконується  $|x(t)| < \varepsilon$  для всіх  $t \in \tau$ .

Нехай для кожного локального стану гібридного автомата існує власна додатно визначена функція Ляпунова  $V^i(x)$ .

Вважатимемо, що

$$\text{Jump}(i, x) = \emptyset \vee \{(i \bmod N) + 1, x\},$$

тобто переключення циклічне  $(1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow N \rightarrow 1)$  і не змінює неперервну фазову координату  $x$ .

Позначимо через  $T$  множину усіх можливих  $\tau, x^i|_{i \rightarrow i+1}$  — значення фазової змінної при переході з  $i$ -го стану в  $i+1$ -й,



$$B_r = \{x \in R^n : |x| \leq r\}, \quad S_r = \{x \in R^n : |x| = r\}.$$

Через  $\|\cdot\|$  позначено евклідову норму.

Візьмемо деяке додатне число  $C > 0$  і побудуємо таку послідовність  $\{c^i\}$ ,  $i = \overline{0, N}$ :

$$\begin{aligned} c^0 &\in (0, C), \quad c^1 = \sup_{\substack{x^1 \in S_{c^0} \\ V^1(x^1) = c^0}} V^2(x^1), \\ c^2 &= \sup_{\substack{x^2 \in S_{c^1} \\ V^2(x^2) = c^1}} V^3(x^2), \dots, \\ c^N &= \sup_{\substack{x^N \in S_{c^{N-1}} \\ V^N(x^N) = c^{N-1}}} V^1(x^N). \end{aligned} \quad (1)$$

**Означення 5.** Назвемо  $V(i, x) = \{V^i(x)\}_i$ ,  $i = \overline{1, N}$  гібридною  $s$ -функцією, якщо  $V^i(x)$  додатно визначені та для будь-якої послідовності  $\{c^i\}$ ,  $i = \overline{0, N}$ , визначеної в (1), виконується  $c^N \leq c^0$ .

Будемо використовувати гібридну  $s$ -функцію для дослідження стійкості тривіальної фазової орбіти гібридного автомата.

**Означення 6.** Похідною гібридної  $s$ -функції  $V(i, x)$  в силу гібридного автомата назвемо вираз

$$\dot{V}(i, x) = \left\{ \frac{dV^i(x)}{dx} f_i(x(t)), i = \overline{1, N} \right\}.$$

**Теорема 1.** Нехай гібридний автомат  $H$  має тривіальну фазову орбіту  $x=0$ , та для нього  $|Q| < \infty$ ,  $\text{Jump}(i, x) = \emptyset \vee \{(i+1, x)\}$  для всіх  $i = \overline{1, N-1}$ ,  $\text{Jump}(N, x) = \emptyset \vee (1, x)$ . Також, нехай задано окіл початку координат  $D \subset R^n$ . Якщо для  $H$  існує додатно визначена гібридна  $s$ -функція  $V(i, x): Q \times D \rightarrow R$  така, що  $\dot{V}(i, x) \leq 0$  для всіх  $x \in D \cap \text{Inv}_i$  та  $i = \overline{1, N}$ , тоді  $x=0$  — стійка тривіальна фазова орбіта гібридного автомата  $H$ .

**Доведення.** Доведемо теорему лише для випадку  $Q = \{1, 2\}$ . Для більшого числа локальних станів доведення аналогічне.

Позначимо  $\Omega_r(i) = \{x \in R^n : V^i(x) \leq r\}$ . Виберемо довільне  $\varepsilon > 0$ . Покажемо, що можна,

в умовах теореми, знайти  $\delta > 0$  таке, що всі орбіти  $(\tau, i, x)$ , для яких виконується  $x(\tau_0) \in B_\delta$ , задовольняють умову  $x(t) \in B_\varepsilon$  для всіх  $t \in \tau$ .

Виберемо  $r \in (0, \varepsilon)$  таке, що  $B_r \subseteq D$ .

Покладемо  $a_2(i) = \min_{x \in S_r} V^i(x)$  та  $b_2(i) \in (0, a_2(i))$ .

Тоді  $\Omega_{b_2(i)}(i) \subseteq B_r$ . Далі, нехай  $p_2(i) > 0$  таке, що  $B_{p_2(i)} \subseteq \Omega_{b_2(i)}(i)$ . Покладемо  $r_1 = \min_{i \in Q} p_2(i)$ .

Аналогічно будемо  $a_1(i) = \min_{x \in S_{r_1}} V^i(x)$ ,

$b_1(i) \in (0, a_1(i))$ . Тоді  $\Omega_{b_1(i)}(i) \subseteq B_{r_1}$ . Беремо  $p_1(i) > 0$  таке, що  $B_{p_1(i)} \subseteq \Omega_{b_1(i)}(i)$ . Покладемо  $\delta = \min_{i \in Q} p_1(i)$ .

Нехай для визначеності орбіта починається в стані 1. Якщо орбіта не переходить із стану 1 у стан 2, теорема вироджується у теорему Ляпунова. Розглянемо тепер випадок, коли система переходить із стану 1 в стан 2 у момент  $\tau'_0 = \tau_1$ .

Для всіх  $t \in [\tau_0, \tau'_0]$  виконується  $V^1(x(t)) < a_1(1)$ , тому  $|x(\tau'_0)| = |x(\tau_1)| < r_1$ . Якщо траєкторія не переходить із стану 2 в стан 1, теорему доведено. Якщо ж система робить перехід із стану 2 в стан 1 у точці  $\tau'_1 = \tau_2$ , то для всіх  $t \in [\tau_1, \tau'_1]$  виконується  $V^2(x(t)) < a_2(2)$ , тому  $|x(\tau'_1)| = |x(\tau_2)| < r_2$ .

За умовою теореми для гібридного автомата існує додатно визначена гібридна  $s$ -функція. Взявши в означенні  $s$ -функції  $c^0 = V^1(x(\tau_0))$ , маємо, що  $V^1(x(\tau_2)) \leq c^2 \leq c^0 = V^1(x(\tau_0)) < a_1(1)$ , тобто  $|V^1(x(\tau_2))| < a_1(1)$ . Повторюючи ці ж викладки за індукцією, отримуємо, що для будь-якого  $t \geq \tau_0$  в першому стані виконується  $|V^1(x(t))| < a_1(1)$ , в другому —  $|V^2(x(t))| < a_2(2)$ . В обох випадках  $|x(t)| < r_2 < \varepsilon$ . Теорему доведено.

Позитивною рисою цих умов є той факт, що не потрібно виявляти, чи завжди досяжні всі стани гібридного автомата (тобто, чи з будь-якого початкового стану  $(q_0, x_0)$  автомат відвідає усі локальні стани і повернеться в  $q_0$ ). Дійсно,



якщо фазова орбіта опиниться в деякому стані  $i \in Q$  і більше не залишить його, працює теорема Ляпунова про стійкість диференціального рівняння, і автомат є стійким.

Для цієї теореми також не важлива наявність або відсутність тупикових та зенонівських орбіт. Навіть якщо через скінченний час траєкторія зайде в тупик, все рівно буде виконуватись  $|x(t)| < \varepsilon$ , тобто буде виконуватись означення стійкості тривіальної фазової орбіти за Ляпуновим. Але відсутність тупикових точок обов'язкова, наприклад, при дослідженні асимптотичної стійкості фазових орбіт. Дійсно, якщо орбіта, що починається в  $\delta$ -околі, потрапляє в тупик, збіжності до  $x = 0$  нема, а значить, нема асимптотичної стійкості.

Таким чином, в роботі отримано умови стійкості тривіальних фазових орбіт неперервних гібридних автоматів. Доведення базується на існуванні гібридних  $s$ -функцій. Отримані умови не базуються на поведінці функції Ляпунова на розв'язках гібридного автомата в моменти переключень, тому їх можна досить легко обчислювати.

#### Список використаних джерел

1. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. — М.: Наука, 1978г.
2. Программное обеспечение моделирования непрерывно-дискретных систем. Под ред. В.Глушкова. — М.: Наука, 1975г.
3. Теория систем с переменной структурой. Под ред. С.В.Емельянова. — М.: Наука, 1972.
4. Filippov F. Differential Equations with Discontinuous Righthand Sides. Kluwer Academic Publishers, 1988.
5. Бичков О. Застосування другого методу Ляпунова для дослідження стійкості гібридних систем. — Вісник Київського університету, серія: фізико-математичні науки, №1, 2005р.
6. Branicky M. Stability of switched and hybrid systems // Proc. 33-rd Conf. Decision and Control, Lake Buena Vista, FL, Dec. 1994, p.3498–3503.

7. Парийская Е.: Гибридный подход к моделированию и качественному анализу динамических систем. Алгоритмы линейной аппроксимации нелинейного гибридного автомата. — Труды 2-ой межд. н.-т. конф. «Дифференциальные уравнения и приложения», с. 174–177, С.-Петербург, 1998г.
8. Парийская Е.: Сравнительный анализ математических моделей и подходов к моделированию и анализу непрерывно-дискретных систем. — Дифференциальные уравнения и процессы управления, №1, 1997. — Электронный журнал, <http://www.neva.ru/journal/>.
9. Kesten Y., Pnueli A. Timed and Hybrid statecharts and their textual representation // Lec. Notes in Comp. Sci. Springer-Verlag, 1992. — p.591-620.
10. Liberzon D., Morse A.S. (1999). Basic problems in stability and design of switched systems // IEEE Contr. Syst. Mag. 19(5), 59–70.
11. Peleties P., DeCarlo R. Asymptotic stability of  $m$ -switched systems using Lyapunov-like functions // Proc. American Control Conf., Boston, MA, June 1991, pp. 1679–1684.
12. Pettersson S., Lennartson B. Stability and robustness for hybrid systems // Proc. of 35th CDC, 1996, p.1202–1207.
13. Ye H., Michel A., Hou L. Stability theory for hybrid dynamical systems // Proc. 34th IEEE Conf. Decision and Control, New Orleans, LA, Dec. 1995, pp. 2679–2684.
14. Ye H., Michel A., Hou L. Stability theory for hybrid dynamical systems // IEEE Transactions on Automatic Control, 43(4), April 1998, p.461–474.

Надійшла до редколегії 12.01.07.



УДК 519.633:004.94

Середенко В.М., д.т.н., проф., Коновалова\* О.М.

# Комп'ютерно - математичне моделювання задач динаміки міжфазової взаємодії в композитах

Досліджується вплив динамічних навантажень представницького елемента композитної системи, що включає міжфазовий прошарок. Комп'ютерно-математична модель вивчена для різноманітних типів зовнішніх силових факторів, крайових, початкових та неоднорідних умов спряження неідеального контакту.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, нестационарна крайова задача, узагальнений розв'язок, міжфазова взаємодія.

\*E-mail: knolly@mail.ru

В рамках теорії міжфазової взаємодії в композитних середовищах представницький елемент цього середовища складається з трьох областей: матриці, армуючої компоненти та міжфазового прошарку. Міжфазовий перехідний шар утворюється в ході технологічного процесу виготовлення композитного матеріалу, експлуатації елементів конструкцій з них тощо. Фізико-механічні характеристики цього утворення суттєво відрізняються від характеристик контактуючих компонентів композиту. В цьому випадку прошарок відіграє роль фактора передачі напружень від однієї фази композитної системи до іншої і забезпечує міцність і монолітність композитного матеріалу [1].

Комп'ютерно-математичне дослідження коливань композитних систем дозволяє прогнозувати поведінку елементів конструкцій з них, а також створювати нові матеріали з наперед заданими властивостями. Існуючі моделі поздовжніх коливань композитного середовища не припускають наявності перехідного прошарку на межі поділу фаз цього середовища. Дана стаття присвячена уточненню моделей динамічної рівноваги представницького елемента композитної системи з врахуванням міжфазового прошарку, а також вивченню впливу цього прошарку на форму та динаміку коливань.

V. M. Seredenko, Dr.Sci.Tech., professor,  
O. M. Konovalova\*

# Computer - mathematical modelling of dynamic problems of interphase interaction in composites

Under investigation is influence of dynamic loads of representative element of composite system, including an interphase layer. Computer-mathematical model has been studied for diversity of types of external force factors, boundary, initial and heterogeneous adjoint conditions of nonideal contact.

Key Words: computer modelling, non-stationary boundary value problem, generalized solution, interphase interaction.

Розглянемо представницький елемент композитного середовища, який складається з трьох областей [1], зайнятих матеріалом армуючої компоненти<sup>(3)</sup>  $F$ , матричним матеріалом<sup>(1)</sup>  $M$  та продуктом їх міжфазової взаємодії<sup>(2)</sup>  $S_{FM}$  (рис. 1).

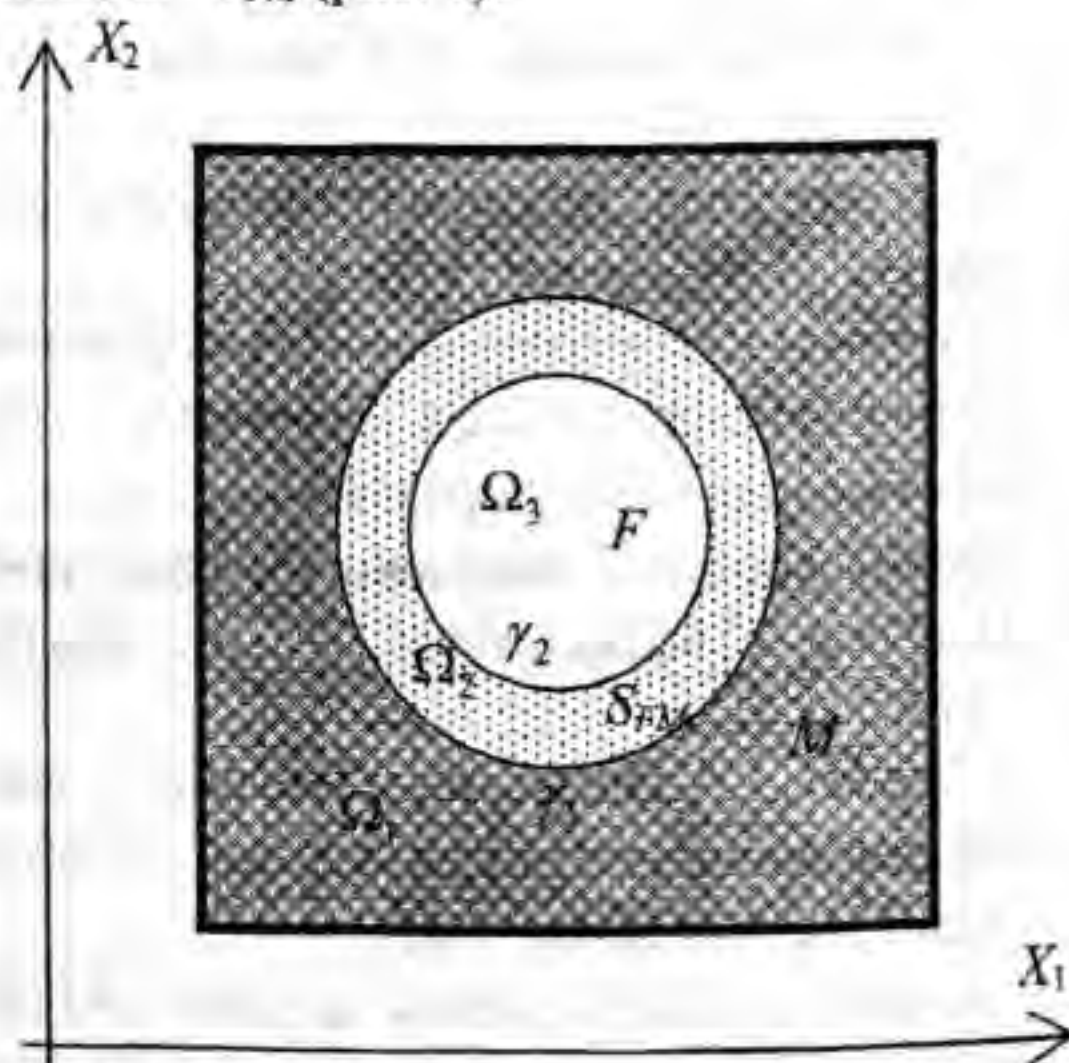


Рис. 1 Представницький елемент композитного середовища з міжфазовим утворенням  $S_{FM}$

Зміщення точок  $(x_1, x_2)$  кожної з трьох областей під дією масових сил протягом часу  $t$  може описуватись наступною системою рівнянь динамічної рівноваги [2, 3]:



$$\begin{aligned} \mu_i \Delta u_i + (\lambda_i + \mu_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) + f_i(x_1, x_2, t) &= \rho_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \\ \mu_i \Delta u_i + (\lambda_i + \mu_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) + f_i(x_1, x_2, t) &= \rho_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \end{aligned} \quad (1)$$

Тут  $u_1, u_2$  – компоненти вектора переміщень по координатним осям  $OX_1, OX_2$ ;  $\lambda_i, \mu_i$  – сталі пружності Ламе кожної із областей  $\Omega_i$  ( $i = 1, 2, 3$ );  $\rho_i$  – щільність середовища, зайнятого відповідною областю;  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$  – оператор Лапласа;  $f_1, f_2$  – компоненти вектора масової сили.

Такі рівняння мають місце в кожній із областей  $\Omega_i^T$  ( $\Omega_i^T = \Omega_i \times ]0, T]$ ,  $i = 1, 2, 3$ ).

Слід зазначити, що спряження області  $\bar{\Omega}_1$  з областю  $\Omega_2$  здійснюється по кривій  $\gamma_1$ , відповідно  $\bar{\Omega}_2$  з  $\Omega_3$  – по  $\gamma_2$ .

Крайові умови задачі матимуть вигляд

$$u = \varphi(x_1, x_2, t), (x_1, x_2, t) \in \partial\Omega^T \quad (2)$$

Відповідно, неоднорідні умови спряження неідеального контакту [3, 6]

$$u_n^+(x_1, x_2, t) = u_n^-(x_1, x_2, t), \quad (3)$$

$$\sigma_n^+(x_1, x_2, t) = \sigma_n^-(x_1, x_2, t) = -P, \quad (4)$$

$$\tau_s^+(x_1, x_2, t) = \tau_s^-(x_1, x_2, t), \{ \tau_s \}^\pm = R[u_s] \quad (5)$$

$$(x_1, x_2, t) \in \gamma_j \times ]0, T] \quad (j = 1, 2)$$

Тут  $\partial\Omega^T = \bigcup_{i=1}^3 \partial\Omega_i \times ]0, T]$ ;  $u_n, u_s$  – нормальна

та дотична складова вектора переміщень;  $\sigma_n, \tau_s$  – нормальна та дотична компоненти напружень;

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega_i} \rho_i \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} V_1(x_1, x_2) + \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} V_2(x_1, x_2) \right) d\Omega_i + \iint_{\Omega_i} \left\{ 2\mu_i \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \frac{\partial V_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \frac{\partial V_2}{\partial x_2} \right) + \right. \\ & + \lambda_i \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) \left( \frac{\partial V_1}{\partial x_1} + \frac{\partial V_2}{\partial x_2} \right) + \mu_i \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial V_1}{\partial x_2} + \frac{\partial V_2}{\partial x_1} \right) \Big\} d\Omega_i + \\ & + R \int_{\gamma_j} [u_s][V_s] d\gamma_j + 2 \int_{\gamma_j} P V_n d\gamma_j = \iint_{\Omega_i} (f_1(x_1, x_2, t) V_1(x_1, x_2) + f_2(x_1, x_2, t) V_2(x_1, x_2)) d\Omega_i, \end{aligned} \quad (8)$$

$t \in ]0, T]$ , вектор-функції  $V_1(x_1, x_2)$  та  $V_2(x_1, x_2)$  на кожній із областей  $\Omega_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) належать

$P$  – сила, що діє на контурі  $\gamma_j \times ]0, T]$  ( $j = 1, 2$ );  $R = \text{const} \geq 0$ .

До нестационарної задачі динамічної рівноваги слід додати також початкові умови

$$u(x_1, x_2, t)|_{t=0} = u_0(x_1, x_2), (x_1, x_2) \in \bigcup_{i=1}^3 \bar{\Omega}_i \quad (6)$$

$$\frac{\partial u(x_1, x_2, t)}{\partial t} \Big|_{t=0} = u_{10}(x_1, x_2), (x_1, x_2) \in \bigcup_{i=1}^3 \bar{\Omega}_i \quad (7)$$

Таким чином, нами поставлена початково-крайова задача (1)-(7). Розв'язок  $u(x_1, x_2, t)$  цієї задачі в класичному розумінні є переміщення будь-якої точки областей  $\Omega_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) під дією масових сил  $f_1$  та  $f_2$ . Такий розв'язок отримується при досить жорстких обмеженнях на коефіцієнти розглядуваної задачі.

Досить важливою особливістю задач такого типу є можливість розглянути розв'язок у так званому узагальненому розумінні. Це дозволяє досліджувати задачу при значно послаблених обмеженнях на її коефіцієнти, тобто в так званих соболевських просторах [4]. Окрім того, вдвічі зменшується порядок диференціальних операторів, що є незаперечною перевагою чисельної реалізації.

Отже, нескладними перетвореннями початково-крайова задача (1)-(7) зводиться до системи наступних інтегральних співвідношень:

соболевському  $W_2^0$  та задовольняють крайовим умовам та відповідним умовам спряження.



З початкових умов (6), (7) отримуємо наступні інтегральні співвідношення

$$\iint_{\Omega_i} u(x_1, x_2, 0) V(x_1, x_2) d\Omega_i = \iint_{\Omega_i} u_0(x_1, x_2) V(x_1, x_2) d\Omega_i \quad (9)$$

$$\iint_{\Omega_i} \rho_i u_i(x_1, x_2, 0) V(x_1, x_2) d\Omega_i = \iint_{\Omega_i} \rho_i u_{i0}(x_1, x_2) V(x_1, x_2) d\Omega_i \quad (10)$$

Зрозуміло, що наші інтегральні співвідношення (9)-(10) мають місце на більш широкому просторі функцій, ніж простір класичного розв'язку  $u(x_1, x_2, t)$ .

Тоді узагальненим розв'язком початково-крайової задачі з неоднорідними умовами спряження неідеального контакту слід вважати таку вектор-функцію  $u(x_1, x_2, t) \in W_2^1$ , яка для всіх  $t \in ]0, T]$  та при  $V(x_1, x_2) \in W_2^1$  задовольняє інтегральне співвідношення (8), а при  $t = 0$  відповідно (9) та (10).

Чисельна реалізація побудованої математичної моделі динаміки міжфазової взаємодії в композитах здійснювалась методом скінчених елементів із застосуванням кусково-лінійних базисних функцій.

Для проведення комп'ютерного моделювання було обрано пакет Partial Differential Equation Toolbox (PDE Toolbox) середовища MATLAB [5], який містить засоби для дослідження і розв'язання диференціальних рівнянь другого порядку в частинних похідних за допомогою методу скінчених елементів.

Проте даний пакет PDE Toolbox зовсім не дозволяє моделювати вищезазначені початково-крайові задачі для систем рівнянь динамічної рівноваги, а тим більше з умовами спряження. Тому для розв'язання задач такого типу здійснено доповнення пакету новими функціями та виконана модифікація вже існуючих функцій. Суттєвим доповненням пакету слід вважати наступні розроблені нами функції:

- побудова дискретизованого варіанту системи рівнянь динамічної рівноваги;
- врахування неоднорідних умов спряження неідеального контакту областей, що складають композитну систему;
- введення подвійної нумерації вузлів на межі поділу областей після проведення їх триангуляції. Для визначення номерів вузлів, що належать цій межі, пакет доповнений новою функцією.

Наведемо деякі з результатів багатьох чисельних експериментів.

Розрахунки проводились за схемою представницького елемента композита, зображеною на рис. 2, для трьох часових шарів.

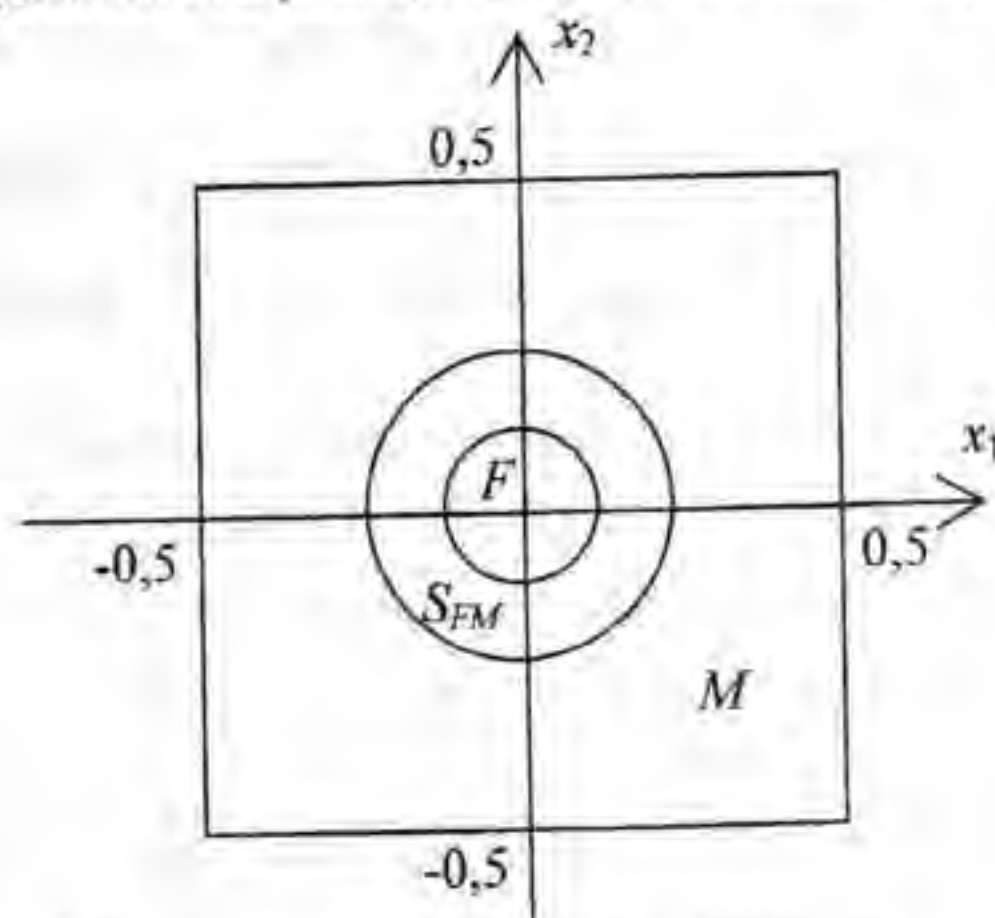


Рис. 2 Схематичне зображення елемента, що моделюється

Приймалось, що  $\mu_1 = \lambda_1 = 2,8$ ,  $\rho_1 = 0,27$ ,  $\mu_2 = \lambda_2 = 5,5$ ,  $\rho_2 = 0,55$ ,  $\mu_3 = \lambda_3 = 7,6$ ,  $\rho_3 = 0,77$ ;  $f_1 = \sin(x_2)$ ,  $f_2 = \sin(x_1)$ .

Крайові умови мали вигляд:

$$u|_{x_1=-0,5} = 0, u|_{x_1=0,5} = 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}|_{x_2=-0,5} = 0, \frac{\partial u}{\partial n}|_{x_2=0,5} = 0,$$

Початкові умови:

$$u|_{t=0} = 0, \frac{\partial u}{\partial t}|_{t=0} = 0$$

Умови спряження варіювались для кожного випадку окремо.

Наведемо результати чисельного дослідження задачі динамічної рівноваги композитної системи з діаметром волокна 0,4 та шириною міжфазової прошарку 0,05.

Представницький елемент композита розглядається на завершальному етапі при  $t = 3$  технологічного процесу утворення чи динамічного навантаження композитної системи.



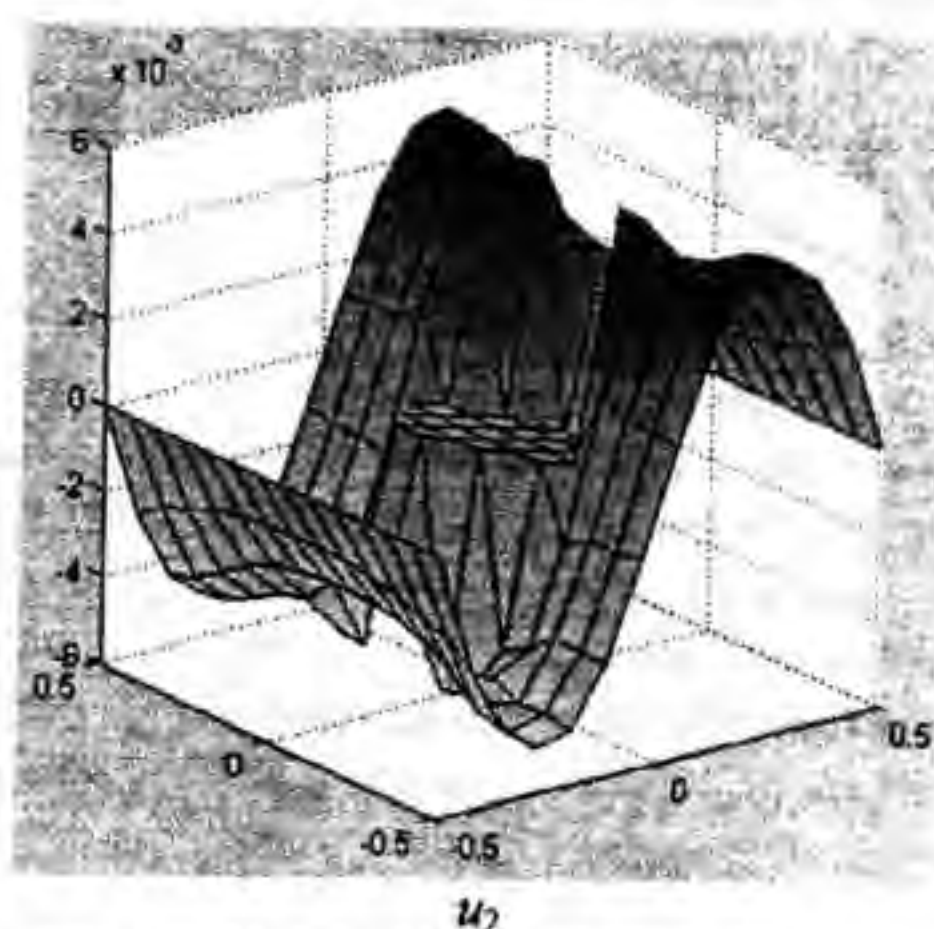
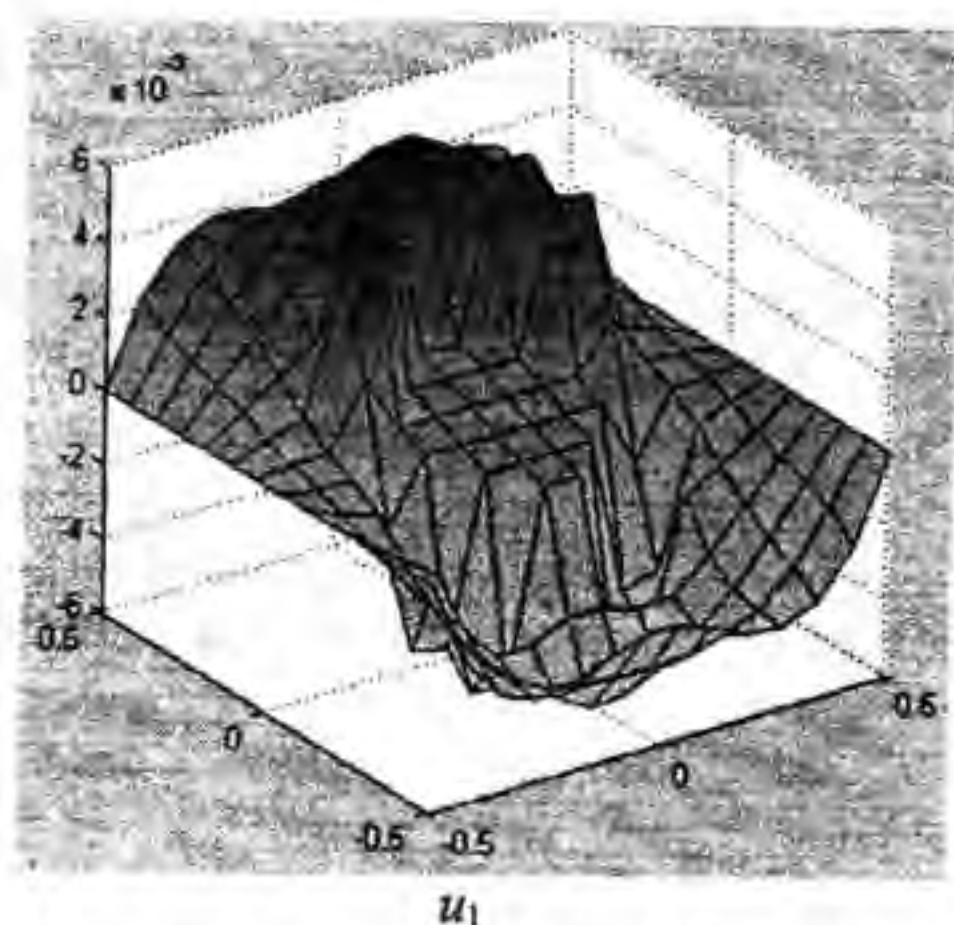


Рис. 3 Поверхні наближеного розв'язку при  $P = 0$ ,  $R = 0,1$  на обох межах міжфазового утворення для моменту часу  $t = 3$

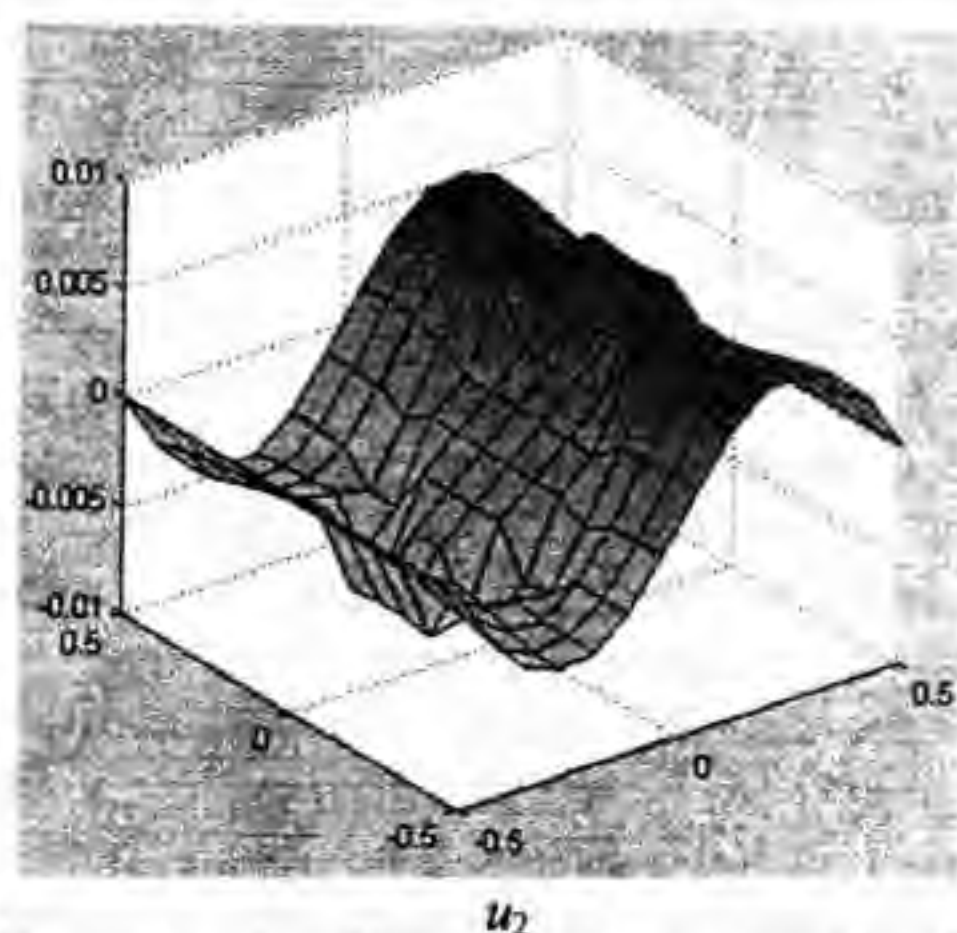
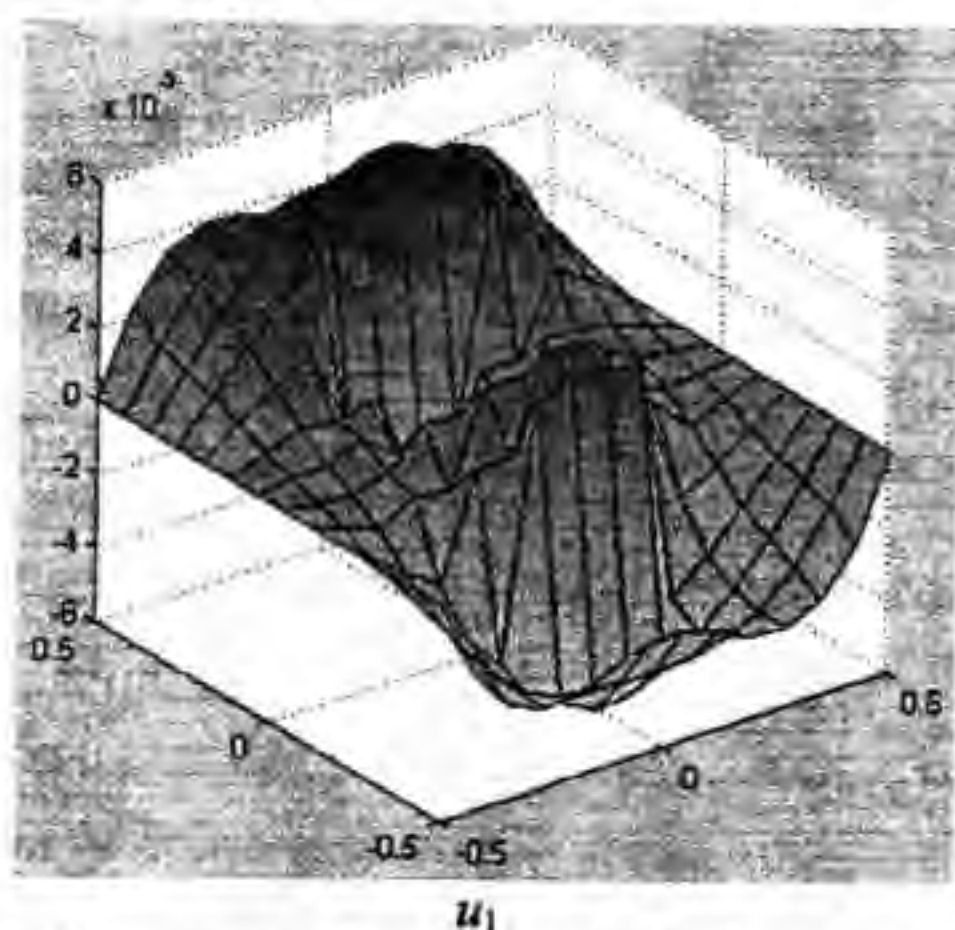


Рис. 4 Поверхні наближеного розв'язку при  $P = 0$ ,  $R = 10$  на внутрішній межі прошарку та  $P = 0,0001$ ,  $R = 0$  на зовнішній межі для моменту часу  $t = 3$

На рис. 3-4 зображені поверхні розв'язку відповідно по компонентам  $u_1$ ,  $u_2$  для неоднорідних умов спряження неідеального контакту при різних значеннях  $P$  і  $R$  на межах міжфазового утворення. В результаті аналізу отриманих поверхонь розв'язків було виявлено залежність форми, динаміки та амплітуди коливань від характерних розмірів армуючої компоненти і міжфазового прошарку композитного середовища, а також значень умов спряження на межах цього прошарку. При цьому очевидною стає важливість комп'ютерного моделювання для виявлення та передбачення нетривіальних ефектів функціонування композитних систем.

#### Список використаних джерел

1. Каюк Я.Ф., Середенко В.М. Механіка міжфазової взаємодії в композитних матеріалах. – Черкаси, 2005. – 172 с.
2. Дейнека В.С., Сергиенко И.В., Скопецкий В.В. Математические модели и

методы расчета задач с разрывными решениями. – К.: Наукова думка, 1995. – 263 с.

3. Дейнека В.С., Сергиенко И.В., Скопецкий В.В. Модели и методы решения задач с условиями сопряжения. – К.: Наукова думка, 1998. – 615 с.
4. Лебедев В.И. Функциональный анализ и вычислительная математика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. – 296 с.
5. Мэтьюз, Джон, Г., Финк, Куртис, Д. Численные методы. Использование MATLAB. – М.: Изд. дом «Вильямс», 2001. – 720 с.
6. Коновалова О.М., Середенко В.М. Комп'ютерне моделювання умов спряження компонентів при тепломасопереносі в композитах // Вісник Черкаського університету. Серія „Прикладна математика”. – 2006. – № 83. – С. 72-78.

Надійшла до редколегії 23.03.2007



УДК 519.21

Турбал Ю.В., к. ф.-м. н., доцент

## Про самоорганізацію динамічних систем у векторних полях.

Розглядається деяка динамічна система, елементи якої породжують векторне поле, що поширюється в просторі-часі. Характер цього поля та вплив його на траєкторії точок системи досліджується в даній роботі.

Ключові слова: динамічна система, траєкторія, векторне поле

Y.V. Turbal

## About the dynamic systems self-organizing in vector fields

It is considered some dynamic system which elements generate extending in space-time vector field. Character of this field and its influence on trajectories of the points of system is investigated in this paper.

Keywords: dynamic system, trajectory, vector field

\*E-mail: turbal@ukrwest.net, turbal@regi.rovno.ua

### 1. Вступ

Останнім часом з'являється багато публікацій, що стосуються ефектів самоорганізації. Нові властивості сукупностей об'єктів у порівнянні з окремими, ізольованими об'єктами, проявляються у багатьох галузях наукових досліджень. В даній роботі буде розглядатись явище, яке також в деякому розумінні можна інтерпретувати як самоорганізацію. При цьому мова буде йти про деяку динамічну систему, що являє собою скінчену множину точок, які рухаються за однаковим законом, що описується системою нелінійних диференціальних рівнянь. Специфіка моделі полягає в тому, що кожна точка системи в кожен момент часу породжує деяке векторне поле, яке, в свою чергу, впливає на динамічну систему. При цьому система буде вважатись відкритою, тобто у неї постійно "надходять" точки ззовні за деяким законом.

Відмітимо, що векторне поле можна пов'язати з випромінюванням. В такому випадку досліджувана система може виступати як математична модель ряду реальних фізичних процесів. Наприклад, якщо розглянути рух деякої сукупності заряджених частинок, то вони будуть породжувати електромагнітне випромінювання, яке, звичайно, впливатиме на саму систему. Якщо є рух частинок, що мають деяку масу спокою – то будемо мати випромінювання гравітаційних хвиль. Можемо розглянути і рух деяких тіл в певному пружному середовищі (вода, газ), то, очевидно, будемо мати випромінювання деяких поздовжніх хвиль пружності, що поширюються з деякою швидкістю в цьому середовищі. Однак, в останньому випадку необхідно враховувати взаємодію окремих частинок системи.

Зазначимо, що в роботі [1] було розглянуто операторний підхід до моделювання множин з спіральною структурою. Однак, виникало ряд запитань стосовно фізичної інтерпретації дії моделюючого оператора. Однак, таку інтерпретацію легко знайти, якщо відповідний оператор розглядати як такий, що визначає екстремум енергії випромінювання, породженого в деякій точці.

### 2 Математична модель

Будемо розглядати динамічну систему виду:

$$\Sigma = \{T, G, G_0, X, A, I, E, Y\} \quad (2.1)$$

де  $T = [t_0, t_1] \subset R$  - часовий інтервал дослідження;

$G \subset R^n$  - множина станів (фазовий простір);

$G_0$  - скінченна множина,  $G_0 \subset G$ , що визначає початкові положення точок системи;

$X: T \times T \times G \rightarrow G$  - оператор, що визначає траєкторії точок системи без врахування функції корекції (базовий закон руху) (тобто  $X(t, s, x_0) = X(t, s)x_0$  визначає положення деякої точки системи в момент часу  $t$ ,  $t \geq s$ , яка в момент часу  $s$  знаходилась в положенні  $x_0$ );

$A: T \times T \times G \rightarrow G$  - оператор, що визначає поширення векторного поля в просторі-часі (тобто  $A(t, s, x_0)$  визначає положення у фазовому просторі точкового векторного поля, яке породжене точкою системи, що знаходилась в положенні  $x_0$  в момент часу  $s$ );

$I$  - дисципліна надходження нових точок у систему (область  $G$ );

$Y: T \times T \times G \rightarrow G$  - оператор, що визначає конфігурацію точок системи у момент часу  $t$  (будемо позначати її  $G_t$ ). Цей оператор



залежить від дисципліни надходження точок  $I$ , енергетичної функції  $E$ , оператора  $X$  та множини  $G_0: G_t = Y(s, t, G_s, X, E, I)$ ;

$E: T \times G \rightarrow R^+$  - енергетична функція або функція корекції, що може залежати від множини  $G_t$ ;

Отже, для визначення математичної моделі, нам необхідно конкретизувати деякі поняття, наведені вище.

Нехай  $G_0$  - це деяка скінчена множина випадкових векторів, що мають рівномірний розподіл в області  $G$ .

Будемо вважати, що закон руху визначається системою диференціальних рівнянь:

$$dx(t) = f(x(t))dt + dA(t) \quad (2.2)$$

де  $x(t) \in R^n$ ,  $A(t)$  - узагальнений векторний пуассонівський процес з параметрами  $(\lambda, G_\xi(x_1, x_2, \dots, x_n))$ . Для спрощення викладок, тут будемо розглядати випадок, коли  $M\xi_i = 0$  і процес  $A(t)$  має дуже малу інтенсивність ( $\lambda \rightarrow 0$ ). Тоді, враховуючи синергетичний характер системи у розумінні сукупності великої кількості точок, впливом випадкових стрибків траєкторій окремих точок можна знехтувати. Отже, будемо мати закон руху:

$$x'(t) = f(x(t)) \quad (2.3)$$

Як приклад, далі будемо розглядати систему рівнянь:

$$\begin{cases} x'(t) = x^2(t) - y^2(t) - z^2(t) - x(t) + c_x \\ y'(t) = 2x(t)y(t) - y(t) + c_y \\ z'(t) = 2x(t)z(t) - z(t) + c_z \end{cases} \quad (2.4)$$

Запишемо її у вигляді:

$$\bar{x}'(t) = \tilde{A}\bar{x}(t) - \bar{x}(t) \quad (2.5)$$

де  $\bar{x}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ ,  $\tilde{A}$  - відповідний оператор.

Будемо вважати, що система є відкритою, тобто в області  $G \subset R^n$  в процесі дослідження з'являються нові точки (з моменту надходження вони рухаються за законом, що визначається системою (2.3)).

Нехай дисципліна надходження точок в систему така, що виконується умова:

$$\begin{aligned} \exists \varepsilon_{\min} > 0: \forall \varepsilon \geq \varepsilon_{\min}, \forall S_\varepsilon: \mu(S_\varepsilon) = \varepsilon, \forall t \in [t_0, T]: \\ P\{S_\varepsilon \cap G_t \neq \emptyset\} = 1 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Будемо вважати, що кожна точка системи  $x_i \in G_t$  в кожен момент часу  $t$  породжує деяке векторне поле (точкове випромінювання), що являє собою точку, яка рухається в напрямку

вектора  $A_i(x_i) = (\tilde{A}x_i - x_i) / \|\tilde{A}x_i - x_i\|$  з деякою швидкістю, де  $\tilde{A}x = f(x) + x$ . Оператор  $\tilde{A}$  можемо розглядати як такий, що задає екстремум енергії випромінювання.

Визначимо деяку скалярну функцію  $p(x, t)$ , яку будемо інтерпретувати як модуль вектора швидкості поля,  $\|v(x, t)\| = p(x, t)$ . Тоді сам вектор швидкості в точці  $x$  буде мати вигляд:  $v(x, s) = p(x, s)A_i(x)$ .

Нехай  $r(t, s, x, A)$  - функція, яка описує координату точкового випромінювання, що породжене в точці  $x$  в момент часу  $s$  в напрямі вектора  $A_i(x)$ , визначена в момент часу  $t$ . Легко показати, що ця функція задовольняє рівняння:

$$r(t, s, x, A) = \int_s^t p(r(\tau, s, x, A)A_i(x))d\tau + x \quad (2.7)$$

**Означення 1.** Слідом векторного поля рухомої частинки, траєкторія якої є  $x(s)$ ,  $s \in (t_0, t)$ , в момент часу  $t$  будемо називати множини точок виду:

$$\{x(s) + \bar{r}(t, x(s)), s \in [t_0, t]\},$$

$$\text{де } \bar{r}(t, x(s)) = r(t, s, x(s), \tilde{A}) - x(s),$$

$$r(t, s, x(s), \tilde{A}) \text{ є розв'язком рівняння (2.7).}$$

Відмітимо, що такий підхід до векторного поля добре узгоджується з практикою. Адже відомо, наприклад ([7]), що енергія ультрарелятивістської зарядженої частинки випромінюється в малому тілесному куті в околі вектора швидкості. Якщо частинка буде мати меншу швидкість, ніж швидкість світла, то максимум енергії випромінювання також буде зосереджений в напрямі вектора швидкості.

### 3 Про енергетичні функції

Якщо пов'язати векторні поля з поширенням хвиль, то необхідно ввести деяку функцію, що буде описувати вплив відповідних хвиль на точки простору (слід векторного поля визначає область, де амплітуда хвилі є максимальною).

Нехай  $f(x, t)$  - функція, що описує щільність точок системи в момент часу  $t$  (без врахування впливу екстремумів енергетичних функцій на систему). Звичайно, ця функція буде залежати від дисципліни надходження точок в систему. Припустимо, що в початковий момент часу точки системи випромінювали точкове векторне поле. За цими точками зразу ж випромінюється наступна



множина точок поля і т.д. Очевидно, що максимальна кількість точок початкового випромінювання буде з часом зосереджуватись у тих точках фазового простору, де щільність  $f_{A(t)\xi}(z)$  максимальна. Відзначимо, що в початковий момент часу щільність точок системи  $f(x, t_0)$  є константою.

Нехай  $\varepsilon_\varepsilon$  - це мінімальна відстань, на якій вплив сліда на довільну точку системи можна вважати нульовим. Нехай  $p(\bar{x}, t) = c|\tilde{A}\bar{x} - \bar{x}|$ .

Тоді при  $c=1$  можемо визначити енергетичну функцію так:

$$E(z, t) = C \int_{0, S_{\varepsilon_\varepsilon}(z)}^{t-t_0} \int f_{\tilde{A}(s)\xi(t-t_0-s)}(x) dx ds \quad (3.1)$$

де  $\tilde{\xi}(t-t_0-s) = X(t-t_0-s)\xi_{t_0}$ ,  $C$ -деяка константа. В такому випадку при  $s \rightarrow t-t_0$   $\tilde{\xi}(t-t_0-s) = X(0)\xi_{t_0} = \xi_{t_0}$ . Очевидно, що при  $t=t_0+\Delta$  та малому  $\Delta$

$$\tilde{\xi}(t-t_0-s) = \tilde{\xi}(\Delta-s) = X(\Delta-s)\xi_{t_0} \approx \xi_{t_0}.$$

Тоді

$$E(z, t) = C \int_{0, S_{\varepsilon_\varepsilon}(z)}^{t-t_0} \int f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx ds \quad (3.2)$$

Якщо розглянути випадок довільного  $c \gg 1$ , то можемо розглянути функцію виду:

$$E(z, t) = C \int_{0, S_{\varepsilon_\varepsilon}(z)}^{t-t_0} \int f_{\tilde{A}(cs)\xi_{t_0}}(x) dx ds = \frac{C}{c} \int_{0, S_{\varepsilon_\varepsilon}(z)}^{t-t_0} \int f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx ds \quad (3.3)$$

#### 4. Деякі властивості щільностей векторів при операторних перетвореннях

Розглянемо систему (2.4). В подальшому нам будуть необхідними наступні прості результати:

I) Система рівнянь  $\tilde{A}\bar{x} = c$ ,  $\bar{x} = (x, y, z)$   $c = (c_x, c_y, c_z)$  має єдиний розв'язок  $(0, 0, 0)$ .

II) Система  $\tilde{A}\bar{x} = \bar{z}$ ,  $\bar{z} = (z_1, z_2, z_3)$  має два розв'язки:

$$p = \pm \sqrt{c_x - z_1 + \sqrt{(c_y - z_2)^2 + \frac{1}{4}(c_x - z_2)^2 + \frac{1}{4}(c_z - z_3)^2}} \\ (p, (z_2 - c_y)/2p, (z_3 - c_z)/2p),$$

III) Система  $\bar{x} + t(\tilde{A}\bar{x} - \bar{x}) = ct$  має два розв'язки:

$$(0, 0, 0) \text{ та } ((t-1)/t, 0, 0),$$

IV) Система  $\bar{x} + t(\tilde{A}\bar{x} - \bar{x}) = \bar{z}$  має розв'язки:

а) при  $1-t+2xt \neq 0$

$$(p, (z_2 - tc_y)/(1-t+2tp), (z_3 - tc_z)/(1-t+2tp)),$$

$$p = \frac{t-1}{2t} \pm$$

$$\pm \frac{\sqrt{16t^2\alpha(t) - 8(tc_x - z_1)(t-1)^2 + (t-1)^4 - 4t(tc_x - z_1) + (t-1)^2}}{2t},$$

$$\alpha(t) = (tc_x - z_1)^2 + (tc_y - z_2)^2 + (tc_z - z_3)^2.$$

б) при  $1-t+2xt = 0$  та  $z_2 = tc_y$ ,  $z_3 = tc_z$

будемо мати безліч розв'язків виду

$$\left(\frac{t-1}{2t}, y, z\right), y^2 + z^2 = \frac{1}{t}(tc_x - \frac{(t-1)^2}{4t} - z_1).$$

**Лема 1** Щільність випадкового вектора  $\eta = \xi + t(\tilde{A}\xi - \xi) = \tilde{A}(t)\xi$ , де  $\xi$  має рівномірний розподіл в  $G$ , має вигляд:

$$f_{\tilde{A}(t)\xi}(z) = \begin{cases} \frac{1}{\mu(G)2\sqrt{2}t^{3/2}\sqrt{\alpha(z_1, z_2, z_3)}\sqrt{\alpha(z_1, z_2, z_3)} - \beta(t, z_1)} & z \in \tilde{A}(t)G, \tilde{A}^{-1}(t)z \in G, z_1 \neq \frac{t-1}{2t} \\ \frac{1}{\mu(G)4\sqrt{2}t^{3/2}\sqrt{\alpha(z_1, z_2, z_3)}\sqrt{\alpha(z_1, z_2, z_3)} - \beta(t, z_1)} & z \in \tilde{A}(t)G, z_1 \neq \frac{t-1}{2t} \text{ і } (\tilde{A}^{-1}(t)z)_1 \in G, (\tilde{A}^{-1}(t)z) \in G, \\ & \text{або } (\tilde{A}^{-1}(t)z)_1 \notin G, (\tilde{A}^{-1}(t)z) \in G, \\ & 0, z \notin \tilde{A}(t)G \end{cases} \quad (4.1)$$

де

$$\alpha(z_1, z_2, z_3) = (tc_y - z_2)^2 + (tc_z - z_3)^2 + (tc_x - \frac{(t-1)^2}{4t} - z_1)^2$$

$$\beta(t, z_1) = tc_x - \frac{(t-1)^2}{4t} - z_1, \quad \mu(G) - \text{міра Лебега області } G,$$

Доведення

<

Маємо:

$$P\{\xi + t(\tilde{A}\xi - \xi) \in dz\} = P\{\xi + t(\tilde{A}\xi - \xi) \in dz / \xi_1 \neq \frac{t-1}{2t}\} \times \\ \times P\{\xi_1 \neq \frac{t-1}{2t}\} + P\{\xi + t(\tilde{A}\xi - \xi) \in dz / \xi_1 = \frac{t-1}{2t}\} \times$$



$$\times P\{\xi_1 = \frac{t-1}{2t}\} = P\{\xi + t(\tilde{A}\xi - \xi) \in dz / \xi_1 \neq \frac{t-1}{2t}\} \times \\ \times P\{\xi_1 \neq \frac{t-1}{2t}\}.$$

Як відомо ([1]), виконуються співвідношення:

$$f_\eta(Y) = f_\xi(\Phi_+^{-1}(Y)) / \frac{\partial \Phi}{\partial x}(\Phi_+^{-1}(Y)) + f_\xi(\Phi_-^{-1}(Y)) / \frac{\partial \Phi}{\partial x}(\Phi_-^{-1}(Y))$$

Нехай  $\Phi(Y) = \tilde{A}(t)Y$ .

Тоді

$$\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} = \begin{vmatrix} 1+2tx-t & -2ty & -2tz \\ 2ty & 1+2tx-t & 0 \\ 2tz & 0 & 1+2tx-t \end{vmatrix} = \\ = (1-t+2tx)^3 + (1-t+2tx)4t^2(y^2+z^2),$$

$$\frac{\partial \Phi(\Phi_+^{-1}(z))}{\partial x} = \left| s^3 + \frac{4t^2}{s}(z_2 - tc_y)^2 + \frac{4t^2}{s}(z_3 - tc_z)^2 \right| = \\ = \frac{\partial \Phi(\Phi_-^{-1}(z))}{\partial x},$$

$$\text{де } s = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{2\tau} - 4t(tc_x - z_1) + (t-1)^2},$$

$$\tau = 8t^2\alpha - 4t(tc_x - z_1)(t-1)^2 + \frac{1}{2}(t-1)^4,$$

$$\alpha = (tc_x - z_1)^2 + (tc_y - z_2)^2 + (tc_z - z_3)^2.$$

Тоді, враховуючи, що  $\xi$  має рівномірний розподіл в  $G$ , отримуємо:

$$f_{\tilde{A}(t)\xi}(z) = \begin{cases} \frac{2}{\mu(G)\sqrt{\tau(\sqrt{2\tau} - 4t(tc_x - z_1) + (t-1)^2)}}, & z \in \tilde{A}(t)G, \tilde{A}^{-1}(t)z \in G, z_1 \neq \frac{t-1}{2t} \\ \frac{1}{\mu(G)\sqrt{\tau(\sqrt{2\tau} - 4t(tc_x - z_1) + (t-1)^2)}}, & z \in \tilde{A}(t)G, z_1 \neq \frac{t-1}{2t} \text{ і } (\tilde{A}^{-1}(t)z)_+ \in G, \\ & (\tilde{A}^{-1}(t)z) \notin G, \text{ або } (\tilde{A}^{-1}(t)z)_+ \notin G, \\ & (\tilde{A}^{-1}(t)z) \in G \\ 0, & z \notin \tilde{A}(t)G \end{cases}$$

Використовуючи нескладні перетворення виразів  $\tau$  та  $\sqrt{2\tau} - 4t(tc_x - z_1) + (t-1)^2$ , отримуємо необхідний вираз для функції щільності. Лема доведена. >

**Наслідок** Область, де функція щільності (4.1) рівна  $\infty$  (не визначена) має вигляд:

$$\Omega_\infty = \bigcup_{t>0} \Omega_\infty^t, \text{ де}$$

$$\Omega_\infty^t = \{(z_1, z_2, z_3) : z_1 \leq tc_x - \frac{(t-1)^2}{4t}, z_2 = tc_y, \\ z_3 = tc_z\} \cap G$$

< Розглядаючи функцію (4.1), отримаємо рівняння:

$$\alpha(z_1, z_2, z_3) = 0 \text{ та}$$

$$\sqrt{\alpha(z_1, z_2, z_3) - (tc_x - \frac{(t-1)^2}{4t} - z_1)} = 0,$$

звідки випливає відповідне твердження >

### Теорема

Нехай  $p(x, t) = c|\tilde{A}x - x|$ ,

$$\tilde{t} = \min\{t > 0 : B_t = (tc_x - \frac{(t-1)^2}{4t}, tc_y, tc_z) \in G\}$$

та виконуються умови:

$$\forall z \in G \quad \rho(B_s, z) \geq \rho(B_s, B_{\tilde{t}})$$

$$z_1 \geq \tilde{t}c_x - \frac{(\tilde{t}-1)^2}{4\tilde{t}} \quad (4.3)$$

( $\rho(x, y)$ -метрика в просторі  $R^3$ ).

Тоді існує такий момент часу  $t_{\min}$ , що  $\forall t_{\min} < t < \tilde{t}$  екстремум енергетичних функцій (3.2) та (3.3) досягається в точці  $B_{\tilde{t}}$ .

Доведення

< Покажемо, що

$$\forall z \in G, \forall s < \tilde{t} :$$

$$\int_{S_{E_E}(z)} f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx \leq \int_{S_{E_E}(B)} f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx.$$

Розглянемо функцію (4.1). За наслідком з Лема 1, екстремум цієї функції на інтервалі  $[t_0, \tilde{t}]$  досягається за межами області  $G$  в точці

$$B_s = (sc_x - \frac{(s-1)^2}{4s}, sc_y, sc_z), \quad s \in [t_0, \tilde{t}].$$

Розглянемо довільну точку  $z \in G$  та момент часу  $s \in [t_0, \tilde{t}]$ ,  $f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(z)$  та  $f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(B_{\tilde{t}})$ .

Покажемо, що  $f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(z) \leq f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(B_{\tilde{t}})$ .

Зауважимо, що  $\alpha(s, z) = \rho^2(B_s, z)$

$$\alpha(\tilde{t}, B_{\tilde{t}}) = 0$$

В силу умов теореми:  $\forall z \in G$

$$\rho^2(B_s, z) \geq \rho^2(B_s, B_{\tilde{t}}) \text{ або}$$

$$\alpha(s, z_1, z_2, z_3) \geq \alpha(s, B_{\tilde{t}}).$$



$$\text{А також } z_1 \geq \tilde{t} c_x - \frac{(\tilde{t}-1)^2}{4\tilde{t}},$$

Тоді

$$\sqrt{\alpha(s, z_1, z_2, z_3)} - (sc_x - \frac{(s-1)^2}{4s} - z_1) \geq \sqrt{\alpha(s, B_{\tilde{t}})} - (sc_x - \frac{(s-1)^2}{4s} - (\tilde{t}c_x - \frac{(\tilde{t}-1)^2}{4\tilde{t}})).$$

Звідси маємо нерівності:

$$f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(z) \leq f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(B_{\tilde{t}}),$$

$$\forall z \in G, \forall s < \tilde{t}:$$

$$\int_{S_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(z)} f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx \leq \int_{S_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(B_{\tilde{t}})} f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx,$$

$$\forall z \in G, \forall s < \tilde{t}:$$

$$\int_0^{\tilde{t}} \int_{S_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(z)} f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx ds \leq \int_0^{\tilde{t}} \int_{S_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(B_{\tilde{t}})} f_{\tilde{A}(s)\xi_{t_0}}(x) dx ds.$$

$$\text{Отже, } E(z, \tilde{t}) \leq E(B_{\tilde{t}}, \tilde{t}).$$

>

## 5 Деякі міркування стосовно впливу векторного поля на динамічну систему

Припустимо, що векторне поле, утворене системою, впливає на цю ж систему шляхом зміни (коррекції) траєкторій точок, що рухаються поблизу точок екстремуму. Тоді рівняння руху (2.3) необхідно уточнити, ввівши деяку коректуючу вектор-функцію  $\mu(t, x(t))$ :

$$x'(t) = f(x(t), t) + \mu(t, x(t)) \quad (5.1)$$

Вектор  $\mu(t, x(t))$  буде направлений від точки  $x(t)$  до найближчої точки екстремуму енергетичної функції а модуль його визначатиме силу взаємодії. Якщо сила взаємодії досить значна, то можемо навіть припустити утворення мікро-вихора в околі відповідного екстремуму (такі явища спостерігаються, зокрема, в гідродинаміці). При малій силі будемо мати незначне відхилення траєкторії точки.

Якщо екстремум енергетичної функції на деякому часовому інтервалі знаходиться в деякій області  $D_0$ , то в цій області фазового простору з часом буде зростати щільність точок системи. Випромінювання цих точок знову може утворити якийсь локальний екстремум енергетичної функції у іншій області простору і т.д.

В результаті ми отримаємо деяку конфігурацію точок екстремумів енергетичної функції. Зрозуміло, що вона буде мати вигляд:

$$D_E = D_0 \cup \tilde{A}(\tilde{t}_1)D_0 \cup \tilde{A}^2(\tilde{t}_2)D_0 \cup \dots \quad (5.2)$$

Якщо область  $D_0$  - точка, то множина екстремумів енергетичної функції буде

утворювати позитивну напівтраєкторію Жюліа для оператора  $\tilde{A}(\tilde{t})$ . Отже, послідовність Жюліа  $O_{\tilde{A}}^+(x_0) = \{x_n : x_n = \tilde{A}(x_{n-1}), n = 1, 2, \dots, x_0 = c\}$  буде визначати точки локального екстремуму енергетичної функції  $E$  при певній дисципліні надходження точок в систему. Відмітимо, що вплив екстремумів енергетичних функцій буде суттєвим, якщо ці екстремуми потрапляють в область  $G$ . Розглянемо приклади позитивних напівтраєкторій Жюліа (рис.1-рис.3) для різних значень параметрів  $c_x, c_y, c_z$  оператора (2.5).

Приклад 1

$$c_x = -0.483218$$

$$c_y = 0.522552$$

$$c_z = 0$$

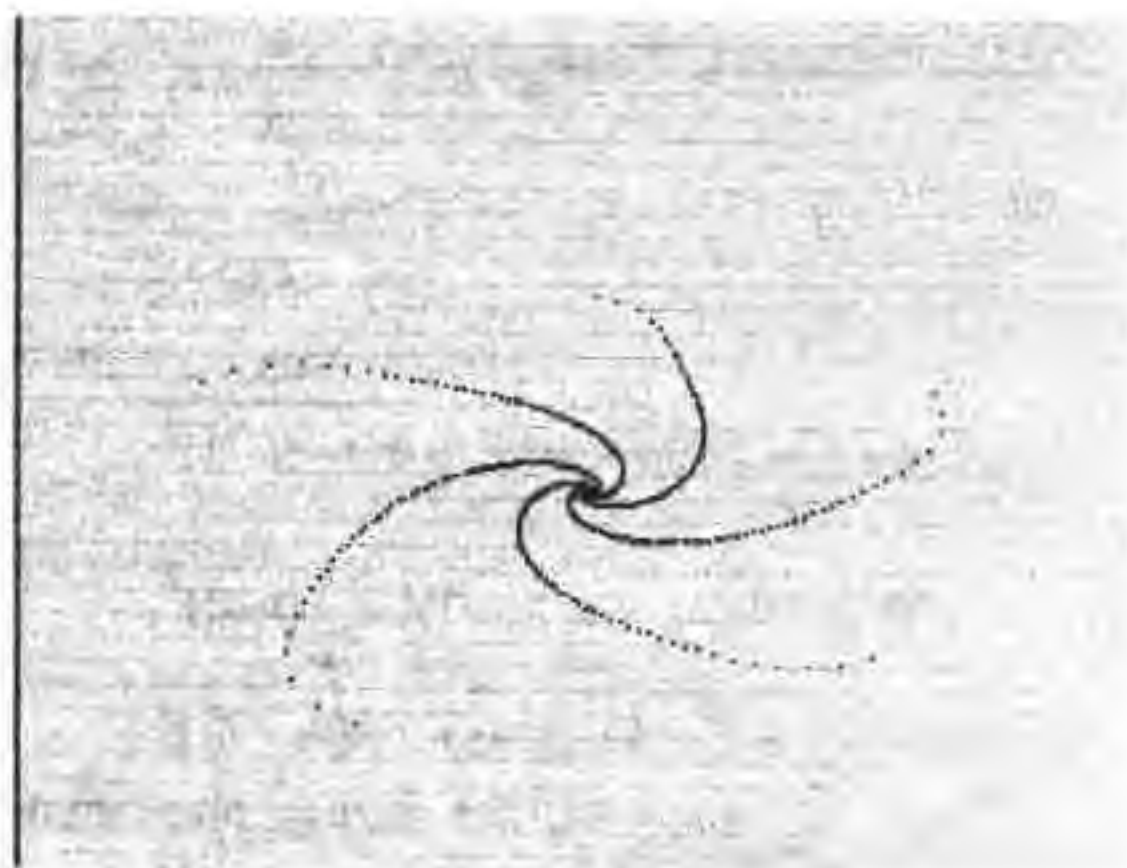


Рис.1

Приклад 2

$$c_x = -0.413218$$

$$c_y = 0.522552$$

$$c_z = 0$$

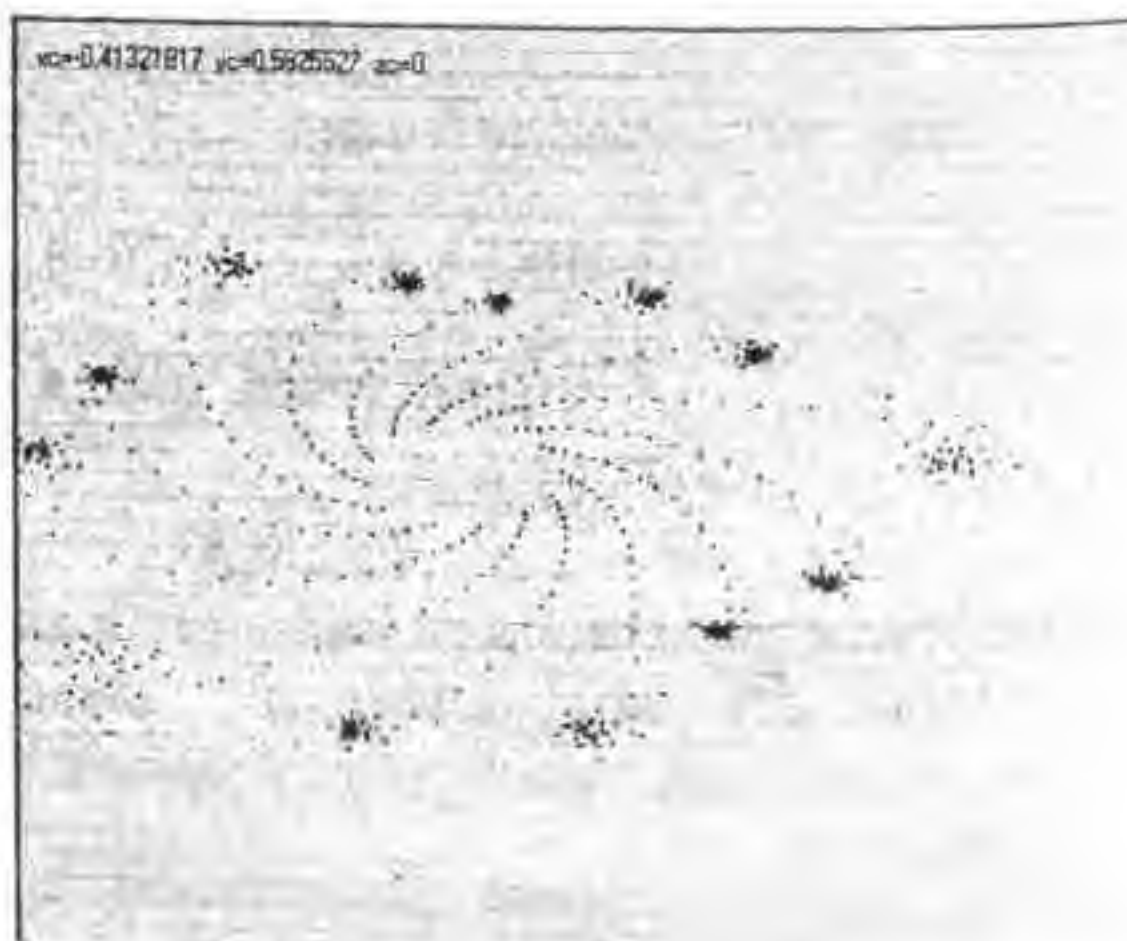


Рис.2



Приклад 3

$$c_x = -0.333218$$

$$c_y = 0.612552$$

$$c_z = 0$$

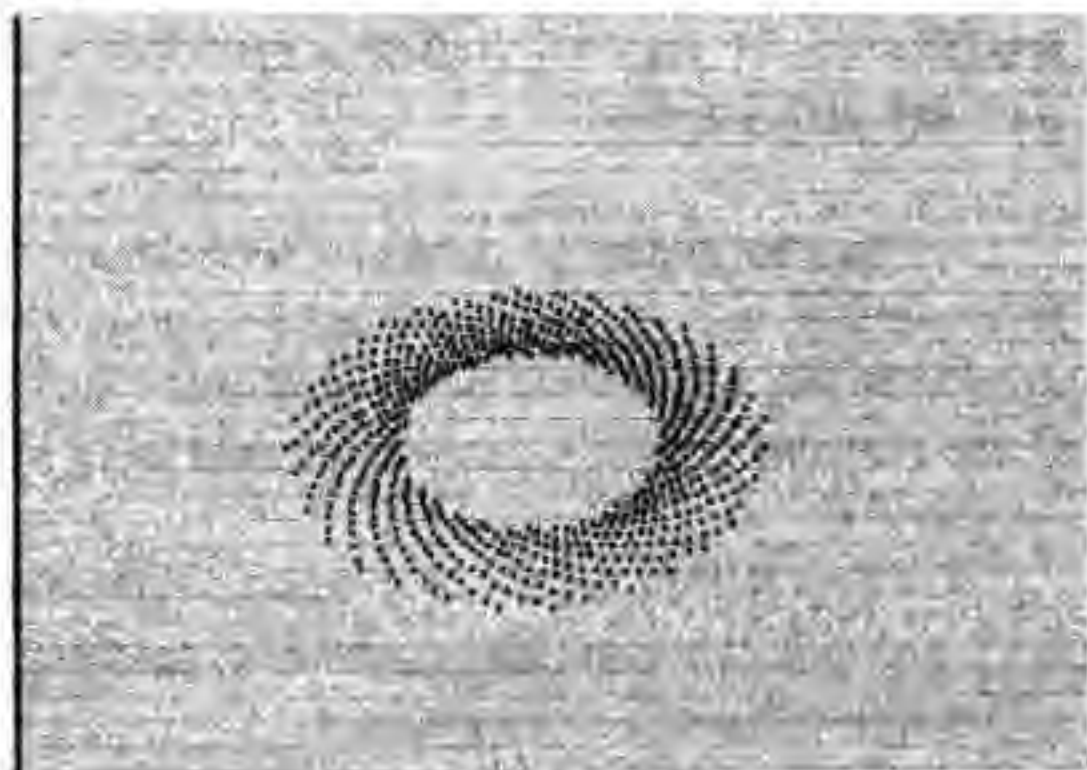


Рис.3

Розглянемо конфігурацію точок екстремуму енергетичної функції, яка виникає у випадку закону руху (2.4). В роботі [1] множина, що зображена на Мал. 4, виникала як результат серії операторних перетворень. З врахуванням результатів, наведених вище, цю множину можна розглядати як частину конфігурації множини  $G_t$ . Дійсно, оскільки екстремум функції  $E$  досягається в точці  $c$  (це частковий випадок), то позитивна напівтраєкторія Жюліа  $O_x^+(c) = \{x_n : x_n = \tilde{A}(x_{n-1}), x_0 = c, n = 1, 2, \dots\}$  буде належати області, що визначає конфігурацію екстремумів щільності точок динамічної системи на деякому часовому інтервалі дослідження.

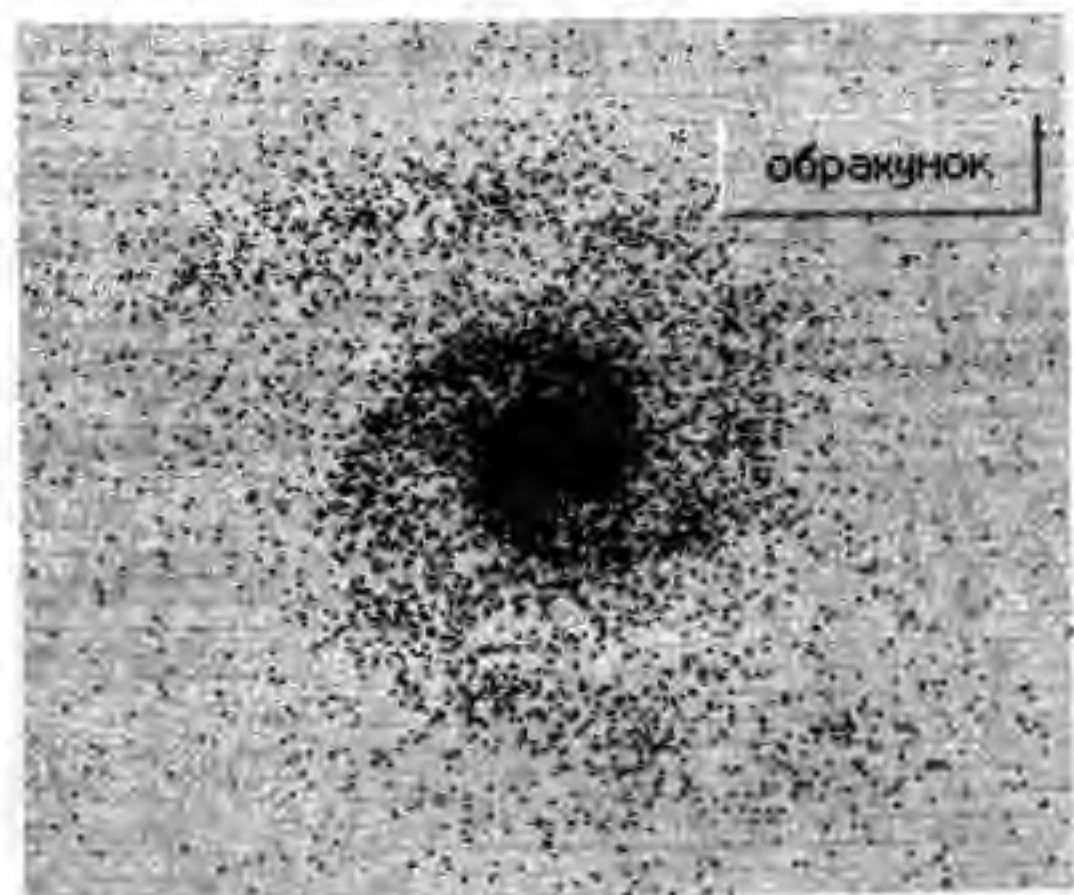


Рис. 4

Список використаних джерел

1. Турбал Ю.В. Про операторний метод моделювання спіральних структур.// Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-

Детальний аналіз множини  $G_t$  та характер множини екстремумів енергетичних функцій буде проведений у наступних публікаціях. Однак, результат візуально буде мало відрізнятися від наведеного (отримаємо ті ж самі спіральні рукави відповідної кривизни).

Відзначимо, що використовуючи різні методики оцінки параметрів, можна отримати множину  $G_t$ , що має спіральну  $m$ -рукавну структуру з довільною кількістю рукавів та їх кривизною, яка у певній метриці оптимально відтворює морфологічну структуру багатьох природних об'єктів. Наприклад, в роботі [1] були знайдені параметри для спіральної галактики NGC2997 (див. рис.1).

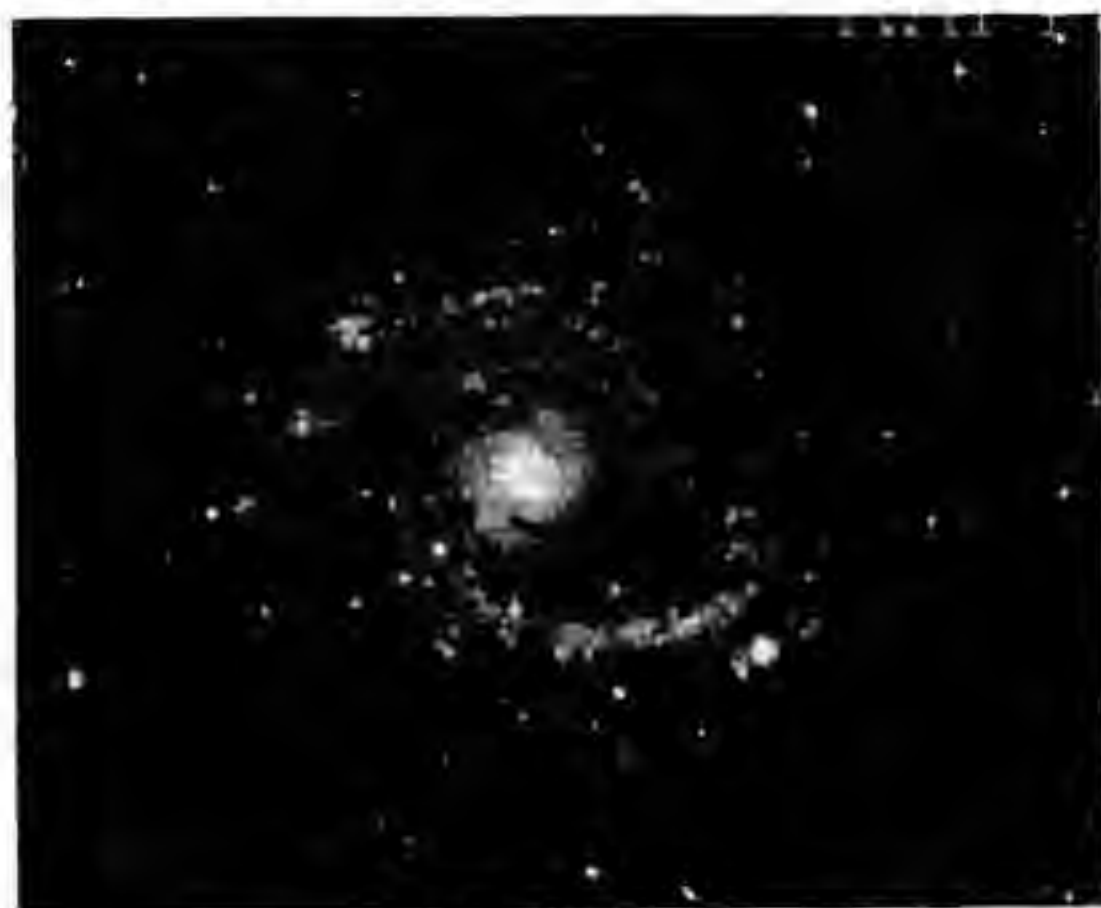


Рис. 5

математичні науки. – 2005. – № 4. – С. 171-179.

2. Турбал Ю.В. Деякі властивості позитивних напівтраєкторій Жюліа. //Волинський математичний вісник.– 2006.– №4.– С. 87-96.
3. И.Г. Дымникова Движение частиц и фотонов в гравитационном поле вращающегося тела //Успехи физических наук.–1986.– 3, т. 148.–123 с.
4. В.Б. Баранов, К.В. Краснобаев Гидродинамическая теория космической плазмы.– М: Физматгиз, 1977–367 с.
5. Е.Ю. Парийская Сравнительный анализ математических моделей и подходов к моделированию и анализу дискретно-непрерывных систем//Дифференциальные уравнения и процессы управления. –1997.– №1.– С. 89-101
6. Боровков А.А. Теория вероятностей. –М.: Едиторал УРСС, 2003–456 с.
7. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц Том 2. Теория поля.–М.:Наука, 1988–435 с.



УДК 519.6

Утебаев Д., канд. фіз.-мат. наук, доц.

## Оцінки точності схеми метода скінчених елементів за часом та простором для гіперболічних рівнянь

В роботі для рівняння гіперболічного типу другого порядку отримані оцінки точності різницевої схеми, яка побудована методом скінчених елементів за часом та просторовим змінним.

Ключеві слова: гіперболічні рівняння, метод скінчених елементів, різницева схема, оцінки точності.

\*E-mail: [ssposmrk@rol.uz](mailto:ssposmrk@rol.uz)

In this paper for wave equation solution it was applying a schemes of finite element method in accordance with temporary variable for the abstract Cauchy problem of the second order equation, constructed in the papers [1-3]. It is determined a stability of these schemes and estimated accuracy. It was applied to homothetic plotting method of hyperbolic equation temporary approximation, for example in [4-6].

The problem is considering for

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = Lu + f(x, t), (x, t) \in Q_T, \\ u = 0, x \in \Gamma = \partial\Omega, t \in [0, T], \\ u(x, 0) = u_0(x), \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = u_1(x). \end{cases} \quad (1)$$

At this time  $L$  - elliptic operator

$$Lu = \sum_{m=1}^p \frac{\partial}{\partial x_m} \left( k(x) \frac{\partial u}{\partial x_m} \right), \quad 0 < k_0 \leq k(x) \leq k_1,$$

$$Q_T = \{x \in \Omega \subset R^p, t \in (0, T]\}, \quad p = 1, 2, \dots$$

We shall call of extended solution of the problem (1) a coversine  $u(x, t)$ , which at each  $t \in [0, T]$  is due to  $\tau$   $u(x, t) \in V = W_2^2(\Omega) \cap W_2^1(\Omega)$ .

is master of derivative  $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \in L_2(Q_T)$  and nearly

everywhere on  $(0, T)$  to comply with formula

$$\begin{cases} \left( \frac{d^2 u(t)}{dt^2}, \vartheta \right) + a(u(t), \vartheta) = (f(t), \vartheta), \quad \forall \vartheta(x) \in V, \\ u(0) = u_0, \quad \frac{du}{dt}(0) = u_1. \end{cases} \quad (2)$$

At this time

UDC 519.6

Ulebaev D., cand. phys.-mat. sciences, docent

## Errors estimates scheme finite element method time-dependent and space variations of second order hyperbolic-type partial differential

In the paper of second order hyperbolic-type partial differential equations obtain errors estimates the difference scheme are constructed finite element method time-dependent and space variations.

Key words better: hyperbolic-type partial differential equations, finite element method, the difference scheme, errors estimates

$$a(u(t), \vartheta) = -(Lu, \vartheta) = \sum_{m=1}^p \int_{\Omega} k(x) \frac{\partial u}{\partial x_m} \frac{\partial \vartheta}{\partial x_m} dx;$$

$(u, \vartheta) = \int_{\Omega} u(x) \vartheta(x) dx$  - scalar product. Among other

$$\text{thing } \|u\|_0 = \sqrt{\int_{\Omega} u^2(x) dx}, \quad \|u\|_1 = \sqrt{\sum_{m=1}^p \int_{\Omega} \left( \frac{\partial u}{\partial x_m} \right)^2 dx} -$$

norm functions in  $L_2(\Omega)$  and  $W_2^1(\Omega)$ , appropriately.

We digitize a problem on extensive running with the aid of finite element method. Let us assume that  $V_h \subset V$  is a set of elements of a view

$$\vartheta_h = \sum_{i=1}^N a_i \varphi_i(x). \quad \text{At this time } \{\varphi_i = \varphi_i(x)\}_{i=1}^N - \text{a}$$

frame piecewise polynomial functions being of polynomial of degree  $k$  on every finite element (interval in one-dimensional case, triangle in two dimensional and etc.)

We assign (2) a semidiscrete problem for

$$\begin{cases} \left( \frac{d^2 u_h(t)}{dt^2}, \vartheta_h \right) + a(u_h(t), \vartheta_h) = (f(t), \vartheta_h), \\ \forall \vartheta_h \in V_h, \quad t \in (0, T], \\ u_h(0) = u_{0,h}, \quad \frac{du_h}{dt}(x, 0) = u_{1,h}. \end{cases} \quad (3)$$

At this time  $u_{0,h} = u_0(0)$  - interpolant of the decision start value  $u_0(0) = P_h u_0(x)$ , and  $P_h$  - projection operator  $P_h : V \rightarrow V_h$  (see [6]).



A problem (3) corresponds a differential Cauchy problem by times for approximate answer

$$u_h(t) = \sum_{i=1}^N a_i(t) \varphi_i \in V_h:$$

$$\begin{cases} D \frac{d^2 u_h(t)}{dt^2} + A u_h(t) = f_h(t), \\ u_h(0) = u_{0,h}, \quad \frac{du_h}{dt}(x, 0) = u_{1,h}. \end{cases} \quad (4)$$

At this time the operators  $D, A$  are in effect from  $V_h$  in  $V_h$ . To it correspond: mass matrix  $\hat{D} = ((\varphi_i, \varphi_j))_{i,j=1}^N$ , stiffness matrix  $\hat{A} = (a(\varphi_i, \varphi_j))_{i,j=1}^N$ . Besides that, to the element  $f_h(t)$  correspond the right member vector quantity  $\tilde{f}_h(t) = ((f(t), \varphi_i))_{i=1}^N$ .

We arrive at a valuation of the problem solution accuracy (3). We shall call

$$z_h = u - u_h, \quad e_h = u - u_I, \quad \xi_h = u_I - u_h,$$

where  $u_I = u_I(x, t)$  - interpolant of the decision  $u(x, t)$ . We shall detach in (2)

$g = \frac{d\xi_h}{dt} = \dot{\xi}_h \in V_h \subset V$  and we shall take from found congruence an equation (3):

$$(\ddot{z}_h, \dot{\xi}_h) + a(z_h, \dot{\xi}_h) = 0. \quad (5)$$

By virtue of the fact, that  $z_h = e_h + \xi_h$ , from (5) we arrive at energetic identical equation:

$$\frac{d}{dt} E_h(t) = -(\ddot{e}_h, \dot{\xi}_h) + \frac{d}{dt} a(e_h, \xi_h) - a(\dot{e}_h, \xi_h),$$

where  $E_h(t) = \frac{1}{2}(\dot{\xi}_h, \dot{\xi}_h) + \frac{1}{2}a(\xi_h, \xi_h)$ . On

integrating the last identical equation, we have

$$E_h(t) = -\int_0^t (\ddot{e}_h, \dot{\xi}_h) dt' - a(e_h(t), \xi_h(t)) + \int_0^t a(\dot{e}_h, \xi_h) dt'.$$

As far as.  $\xi_h(0) = 0, E_h(0) = 0$ . For summands in right member it is applicable the inequality Cauchy-Bunyakovsky:

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t (\ddot{e}_h, \dot{\xi}_h) dt' \right| &\leq \int_0^t \|\dot{\xi}_h\|_0^2 dt' + \int_0^t \|\ddot{e}_h\|_0^2 dt', \\ a(e_h(t), \xi_h(t)) &\leq \frac{1}{4} a(\xi_h(t), \xi_h(t)) + a(e_h(t), e_h(t)), \\ \left| \int_0^t a(\dot{e}_h, \xi_h) dt' \right| &\leq \frac{1}{2} \int_0^t a(\xi_h, \xi_h) dt' + \frac{1}{2} \int_0^t a(\dot{e}_h, \dot{e}_h) dt'. \end{aligned}$$

Applying later  $\varepsilon$ - inequality and Gronuol lemma, we shall arrive at a valuation

$$E_h(t) \leq M \int_0^t (\|\ddot{e}_h(t')\|_0^2 + \|\dot{e}_h(t')\|_0^2 + \|e_h(t')\|_1^2) dt'. \quad (6)$$

Here constant  $M = M(k_0, k_1, T) > 0$ .

For

$$\dot{u}(x, t) \in W_2^{k+1}(\Omega), \quad \ddot{u}(x, t) \in W_2^k(\Omega), \quad \forall t \in [0, T]$$

the valuations are involved [7, 8]:

$$\|e_h\|_1 \leq Ch^k, \quad \|\dot{e}_h\|_1 \leq Ch^k, \quad \|\ddot{e}_h\|_0 \leq Ch^k,$$

If on very finite element an interpolant  $u_I = u_I(x, t)$  is a polynomial of degree  $k$ . From these valuations, an energy estimation (6) and triangle inequality  $\|u - u_h\| = \|e_h + \xi_h\| \leq \|e_h\| + \|\xi_h\|$  we deduce a predicating

**Theorem 1.** Let us assume that

$$u(x, t) \in C^1([0, T]; W_2^{k+1}(\Omega) \cap \dot{W}_2^{\frac{1}{2}}(\Omega)) \text{ and}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) \in C([0, T]; W_2^k(\Omega) \cap \dot{W}_2^{\frac{1}{2}}(\Omega)).$$

If a space tapering  $V_h$  onto separate finite element is a polynomial of degree  $k$ , that for the decision of the problem (4) estimated accuracy is involved

$$\|u(t) - u_h(t)\|_1 \leq ch^k, \quad \|\dot{u}(t) - \dot{u}_h(t)\|_0 \leq ch^k, \quad \forall t \in [0, T].$$

In the papers [1,2] for a solution of the problem (4) because of finite element method with to respect to variable temporary  $t$  it was formed a vectorial difference scheme on the follow view

$$\begin{cases} \left( D - \frac{1}{12} \tau^2 A \right) \frac{\hat{y} - \dot{y}}{\tau} + A \frac{\hat{y} + y}{2} = \varphi_1, \\ \left( D - \alpha \tau^2 A \right) \frac{\hat{y} - y}{\tau} - \left( D - \beta \tau^2 A \right) \frac{\hat{y} + \dot{y}}{2} = \varphi_2, \\ y(0) = u_{h,0}, \quad \dot{y}(0) = u_{h,1}, \end{cases} \quad (7)$$

where

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \int_0^1 f(t_n + \tau \xi) d\xi, \\ \varphi_2 &= \int_0^1 f(t_n + \tau \xi) [s_1 g_2^{(1)}(\xi) + s_2 g_2^{(2)}(\xi)] d\xi, \\ s_1 &= 180\beta - 40\alpha, \\ s_2 &= 1680\beta - 280\alpha, \\ g_2^{(1)}(\xi) &= \tau \left( \xi - \frac{1}{2} \right), \\ g_2^{(2)}(\xi) &= \tau \left( \xi^3 - \frac{3}{2} \xi^2 + \frac{1}{2} \xi \right). \end{aligned}$$

At this time  $t_n = n\tau$ ,  $n = 0, N_0$ ,  $\tau = T / N_0$ .

With respect to assessed values



$$\begin{aligned}\dot{\hat{y}} &= \frac{dy}{dt}(t_{n+1}), \quad \dot{y} = \frac{dy}{dt}(t_n), \\ \hat{y} &= y(t_{n+1}), \quad y = y(t_n)\end{aligned}$$

It is possible to reestablish an approximating to  $u_h(t)$  at any time  $t \in [t_n, t_{n+1}]$ ,  $n=0,1,\dots$  from the formula:

$$y(t) = y \varphi_{00}^n(t) + \dot{y} \varphi_{10}^n(t) + \hat{y} \varphi_{01}^n(t) + \dot{\hat{y}} \varphi_{11}^n(t), \quad (8)$$

where  $\varphi_{00}^n(t) = 2\xi^3 - 3\xi^2 + 1$ ,  $\varphi_{01}^n(t) = 3\xi^2 - 2\xi$ ,

$$\varphi_{10}^n(t) = \tau(\xi^3 - 2\xi^2 + \xi), \quad \varphi_{11}^n(t) = \tau(\xi^3 - \xi^2),$$

$$\xi = \frac{t-t_n}{\tau}.$$

It have a place the following theorem on convergence scheme decision (7), (8) (see [1,2]).

**Theorem 2.** If network parameters (7) shall meet the conditions

$$\alpha - \beta = \frac{1}{12}, \quad \alpha, \beta \geq 0,$$

$$D - \delta \tau^2 A \geq \varepsilon E, \quad \varepsilon > 0, \quad \delta = \max\{\alpha, \beta, \frac{1}{12}\},$$

that a solution  $y(t)$  converge to a solution of the problem (4)  $u_h(t) \in C^6[0, T]$  with fourth ordering at this rate, that a valuations for its decision are correct:

$$\|y(t) - u_h(t)\|_1 \leq M\tau^4, \quad \|\dot{y}(t) - \dot{u}_h(t)\|_0 \leq M\tau^4.$$

Because of triangle inequality and theorem 1, 2 we obtain a following result.

**Theorem 3.** If all theorem hypotheses 1 and 2, are made, that for a decision of

$$y(x, t) = \sum_{i=1}^N y(t) \varphi_i(x) \in V_h,$$

approximating solution of the problem (1)

$$u(x, t) \in C^6([0, T]; W^{k+1}_\tau(\Omega) \cap \dot{W}^{1/2}_2(\Omega)),$$

estimated accuracies take place

$$\|u(x, t) - y(x, t)\|_1 \leq M(\tau^4 + h^k),$$

$$\|\dot{u}(x, t) - \dot{y}(x, t)\|_0 \leq M(\tau^4 + h^k).$$

If the use of finite element method, per exemplum, as far as space variable with the aid of the polynomial of the third degree, the order of accuracy  $k$  with respect to step  $h$  - third.

Simulated results are obtained for an equation of Focht

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} Lu = Lu + f(x, t),$$

describing a wave transmissions in a structure with damping [8].

## Bibliography

1. Москальков М.Н. Схемы метода конечных элементов повышенной точности для решения нестационарных уравнений второго порядка // Дифференциальные уравнения. – Минск. – 1980. – Т.16. – №7. – С.1283-1292.
2. Москальков М.Н., Утебаев Д. Исследование разностных схем метода конечных элементов для нестационарных уравнений второго порядка // Праці міжнародної конф. Питання оптимізації обчислень. – Київ. – 2005. – С. 156-157
3. Moskal'kov M.N., Utebaev D. Investigation of difference schemes of finite element method for second-order unsteady-state equations// J. Comput. Appl. Math. - No. 92. – 2005. – pp. 70-76.
4. Фрид И. Исследование явлений, зависящих от времени с помощью дискретных элементов // Ракетная техника и космонавтика. – 1976. – Т. 7. – №6. – 1969. – С. 210-212.
5. Оден Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред. – М.: Мир, 1976. – 464с.
6. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – Москва: Мир, 1986. – 318 с.
7. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. – Москва: Наука, 1981. – 416 с.
8. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. – Москва: Мир, 1977. – 352 с.
9. Утебаев Д. Решение краевой задачи для уравнения Фохта методом конечных элементов //Узбекский журнал проблемы информатики и энергетики. – 2006. – № 1. – С. 73-77.

Надійшла до редакції 08.02.2007



Шарапов\* М.М., к.ф.-м.н., Галковський Т.О., студент, Максимець О.М., студент.

## Про підрахунок значень функції Лапласа

В цій статті розглядається метод підрахунку значень функції Лапласа. Метод ґрунтується на функціональній формулі Тіле. Проводиться порівняльний аналіз отриманих результатів із відомими алгоритмами, в яких використовуються ланцюгові дроби.

Ключові слова: функція Лапласа, формула Тіле.

\*E-mail: sharapov@unicyb.kiev.ua

There are many methods for calculating values of Laplace function

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \varphi(t) dt \quad \left( \varphi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} \right),$$

Some of these methods are based on use of chain fractions. The following fractions are used frequently instead of Laplace function itself:  $\bar{R}(x) = \frac{\Phi(x) - 0.5}{\varphi(x)}$

(when  $x > 0$ ) or  $R(x) = \frac{1 - \Phi(x)}{\varphi(x)}$  (known as Mills equation). Thus for small positive values of argument ( $0 < x < 4$ ) following chain fraction is used

$$\bar{R}(x) = \frac{x}{1} - \frac{x^2}{3} + \frac{2x^2}{5} - \frac{3x^2}{7} + \frac{4x^2}{9} - \dots, \quad (1)$$

Then originating values of Laplace function can easily be found

$$\Phi(x) = 0.5 + \bar{R}(x)\varphi(x) \quad (1')$$

More information on chain fraction (1) can be found in [1], [2].

For comparatively big values of argument ( $x \geq 4$ ) Laplace chain fraction (1805) is used for Mills equation:

$$R(x) = \frac{1}{x} + \frac{1}{x} + \frac{2}{x} + \frac{3}{x} + \dots, \quad (2)$$

Then originating values of Laplace function can easily be found

M.M. Sharapov\*, Candidate of Physics and Mathematics, T.O. Galkovsky, student O.M. Maksymets, student.

## On Laplace function values calculation

In this paper a method for obtaining Laplace function values is considered. The method is based on Thiele functional formulae.

Detailed comparison with previously used methods based on chain fractions is provided

Key Words: Laplace function, Thiele formulae.

$$\Phi(x) = 1 - R(x)\varphi(x). \quad (3)$$

The most well-known method that doesn't make use of chain fractions is

$$\Phi(x) = 0.5 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{2^n n! (2n+1)}. \quad (4)$$

This series can be derived by integrating Taylor series at null value of  $e^{-x^2/2}$  function. Though we obtain alternating series, whose terms declines monotonically starting only at some term, for  $\varepsilon < 1/\sqrt{2\pi}$  condition  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{|x^{2n+1}|}{2^n n! (2n+1)} \leq \varepsilon$  guaranties that sum of first  $n$  terms gives precision  $\varepsilon$  for Laplace function value computation. Refer to [3] for more information on this method.

Another representation (1') instead of (4) can be used (for  $0 < x < 4$ ) when obtaining series

$$\bar{R}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!!}. \quad (5)$$

This series can be derived by integrating Taylor series at null value of  $\bar{R}(x) = \frac{\Phi(x) - 0.5}{\varphi(x)}$  function.

For remainder  $\bar{R}_n(x)$  estimation  $t_n e^{x^2/(2n+6)} \leq \bar{R}_n(x) \leq t_n e^{x^2/2}$  exists, where  $t_n = \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!!}$ .

One more method (see [4]) of function expansion into chain fractions exists – known as Thiele functional formulae



$$f(x) = f(x_0) + \frac{x-x_0}{1!f'(x_0)} + \frac{x-x_0}{2!f''(x_0)} + \frac{x-x_0}{3!f'''(x_0)} + \dots, \quad (6)$$

where left derivative is defined as

$$^{(n)}f(x) = n \cdot ^{(n-1)}f(x) + ^{(n-2)}f(x),$$

$$^{*}f(x) = 2 \cdot ^{(1)}f'(x) + f(x) = -\frac{2(f'(x))^2}{f''(x)} + f(x),$$

$$^{*}f(x) = 1/f''(x).$$

Lets use (6) to expand  $R(x) = \frac{1-\Phi(x)}{\varphi(x)} = \frac{t(x)}{\varphi(x)}$  into

chain fraction in neighborhood of 0 (i.e.  $x_0 = 0$ ). To accomplish this we'll obtain analytical coefficients  $a_n = n \cdot ^{(n-1)}f(x_0)$ . To avoid computational complications let's notice that applying known relations:  $t'(x) = -\varphi(x)$ ,  $\varphi'(x) = -x\varphi(x)$ ,  $t(0) = 0.5$ ,  $\varphi(0) = 1/\sqrt{2\pi}$ , we can obtain useful equality:

$$^{*}f(x) = \frac{1}{f'(x)} = \frac{\varphi^2(x)}{t'(x)\varphi(x) - t(x)\varphi'(x)} = \frac{\varphi^2(x)}{xt(x)\varphi(x) - \varphi^2(x)} = \frac{1}{xf(x) - 1}$$

This result is quite useful, because it fixes set of parameters left derivative is dependent on. These are  $x$  and  $f(x)$ . The next step is to represent left derivative of any degree as some function  $g_n(x, f(x))$  in general form:

$$^{(n)}f(x) = g_n(x, f(x)) = \frac{P_n(x, f(x))}{Q_n(x, f(x))},$$

where  $P_n(x, f(x))$  and  $Q_n(x, f(x))$  are linear forms.

Described set of rules is enough to obtain left derivative of arbitrary degree. What is even more important, this way is one of the most efficient among possible ones. To compute coefficients  $a_n$  of series we need to set  $x=0$   $g_n(x, f(x))$ . This will nullify all items from numerator and denominator that contain  $x$  as a multiplier. So we can omit items multiplied by  $x$  raised to "big" power (boundary

power depends on series depth) during computation. Setting initial value  $\varphi(0) = 1/\sqrt{2\pi}$ , we obtain  $a_n$  coefficients as a functions

$$a_n = z_n(\sqrt{\pi/2}) = \frac{P_n^*(\sqrt{\pi/2})}{Q_n^*(\sqrt{\pi/2})}, \text{ where } P_n^*(\sqrt{\pi/2})$$

and  $Q_n^*(\sqrt{\pi/2})$  – polynomial functions taking  $\sqrt{\pi/2}$  as an argument. Computation experiments showed that coefficients of these polynomials with growth of  $n$ , increased quite fast, hitting bounds of standard numerical types. Even while computing 7-th coefficient the result is exceeding standard computer computations capacity of 64 bits, i.e. for deeper decompositions we are forced to use long arithmetic.

Finally, by applying the described methodic the following coefficients can be obtained:

$$a_1 = 1, a_2 = -2/\sqrt{\pi/2}, a_3 = \frac{3(\pi/2)}{-4 + 3(\pi/2)}, a_4 = \frac{64 - 96(\pi/2) + 36(\pi/2)^2}{32(\sqrt{\pi/2}) - 18(\sqrt{\pi/2})^3},$$

$$a_5 = \frac{5120(\pi/2)^2 - 5760(\pi/2)^3 + 1620(\pi/2)^4}{2048(\pi/2)^2 - 2823(\pi/2)^3 + 972(\pi/2)^4},$$

$$a_6 = (402653184(\pi/2)^4 - 1717567488(\pi/2)^5 + 3049021440(\pi/2)^6 - 2883133440(\pi/2)^7 + 1531560960(\pi/2)^8 - 433340928(\pi/2)^9 + 51018336(\pi/2)^{10}) / (207618048(\sqrt{\pi/2})^9 - 872349696(\sqrt{\pi/2})^{11} + 1523847168(\sqrt{\pi/2})^{13} - 1416351744(\sqrt{\pi/2})^{15} + 738657792(\sqrt{\pi/2})^{17} - 204913152(\sqrt{\pi/2})^{19} + 23619600(\sqrt{\pi/2})^{21}),$$



Few more series members computed are too long and it doesn't seem reasonable to provide them here. Computed values allow us to represent relation

$$R(x) = \frac{1 - \Phi(x)}{\varphi(x)} = \frac{t(x)}{\varphi(x)}$$

according to (6) using following template:

$$R(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{|x|}{|a_1|} + \frac{|x|}{|a_2|} + \frac{|x|}{|a_3|} + \dots \quad (7)$$

Let us denote:

$$R_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{|x|}{|a_1|} + \frac{|x|}{|a_2|} + \frac{|x|}{|a_3|} + \dots + \frac{|x|}{|a_n|}$$

and

$$\Phi_n(x) = 1 - R_n(x) \cdot \varphi(x).$$

Let us evaluate the greatest deviation

$$|\Phi_n(x) - \Phi(x)|.$$

Observing sign-constancy of  $\Phi_n(x) - \Phi(x)$  for fixed  $n$ , our problem is equivalent to finding upper (or lower) limit of function

$$h(x) = \Phi_n(x) - \Phi(x).$$

Differentiating this function and relying upon  $\varphi(x) \neq 0$ , we obtain following equation:

$$x \cdot R_n'(x) - R_n'(x) = 1. \quad (8)$$

It's solutions are points of local-extremum.

For example, let  $n = 6$ . It's easy to show that  $R_6(x)$  is in form

$$R_6(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{ax^3 + bx^2 + cx}{x^3 + dx^2 + lx + g},$$

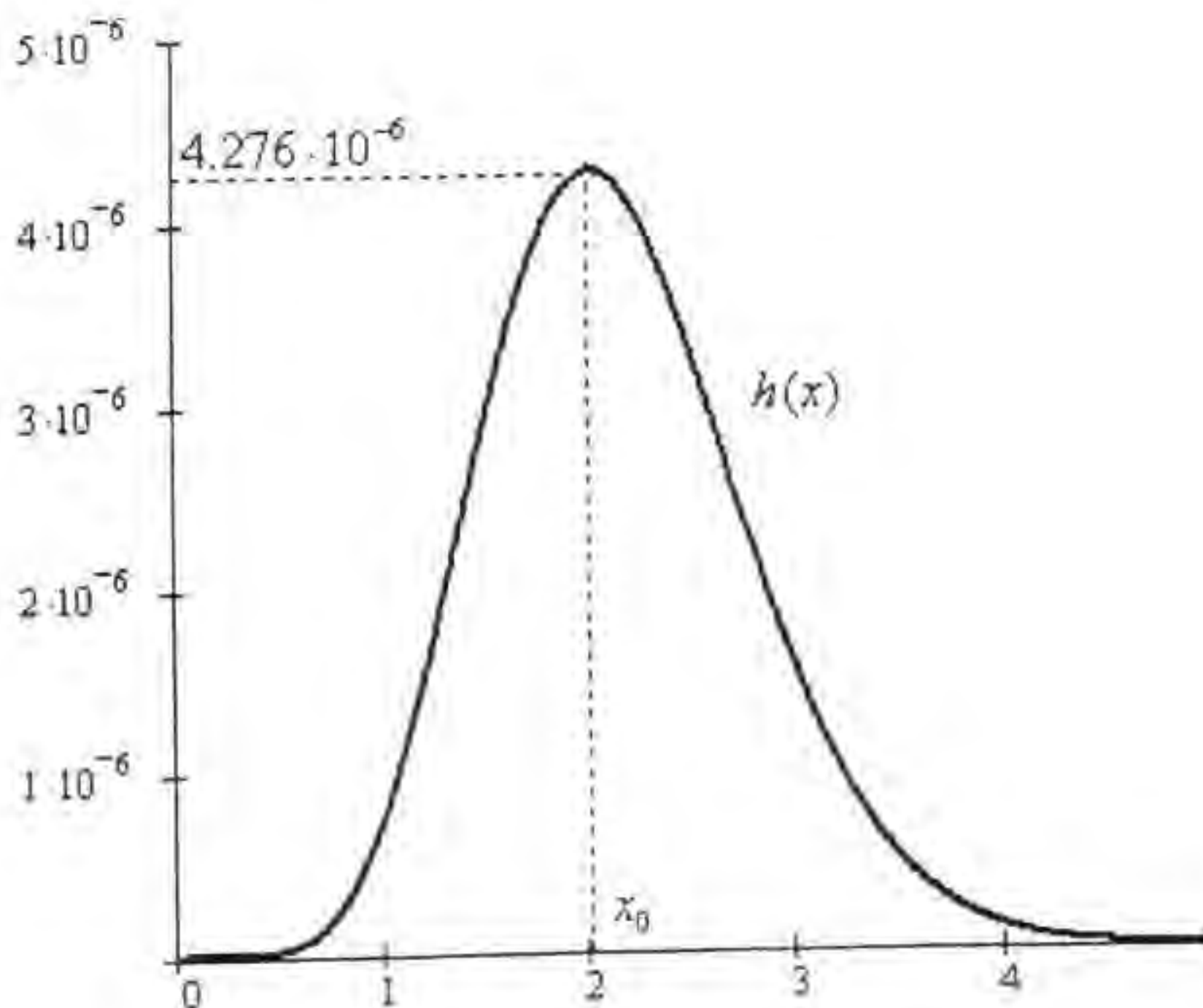
where  $a, b, c, d, l, g$  – unknown real numbers. Then (8) is reduced to equation of 7-th power, where all coefficients except first triple equal to 0. Solving quadratic equation, we obtain exact value of  $x_0$ . It is point of extremum (upper limit) of deviation  $|\Phi_n(x) - \Phi(x)|$ :

$$x_0 = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{637875\pi^3 - 5709600\pi^2 + 16982016\pi - 16777216}{151875\pi^3 - 1539000\pi^2 + 5171712\pi - 5767168} \approx 2,01262775019761.$$

Here, maximal deviation equals to

$$\Delta_{\max} = |\Phi_n(x_0) - \Phi(x_0)| \approx 4.276 \cdot 10^{-6}, \quad \text{Function}$$

$h(x) = \Phi_6(x) - \Phi(x)$  is shown on the diagram

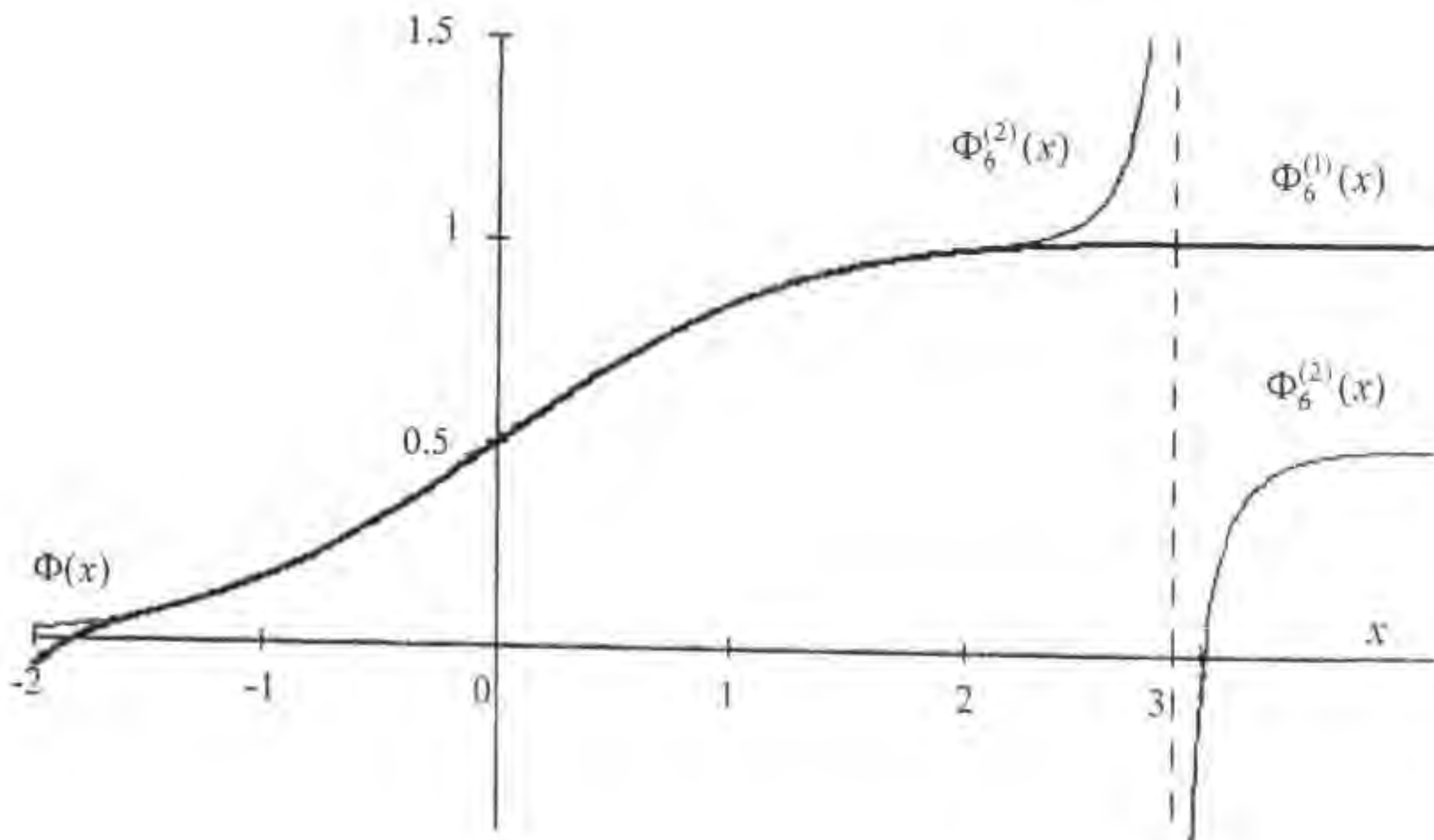




So, when using  $\Phi_n(x)$  instead of  $\Phi(x)$  we can guarantee precision to 5 digits after comma.

To visualize obtained results and sum up, let us present diagrams of Laplace function

approximations  $\Phi_6^{(1)}(x)$ ,  $\Phi_6^{(2)}(x)$  (6-th degree of chain fractions), corresponding to decompositions  $\{(3), (7)\}$  and  $\{(1'), (1)\}$ :



Reviewing diagrams and numerical data, decompositions  $\{(3), (7)\}$  and  $\{(1'), (1)\}$  differs: in neighborhood of 0 decomposition  $\{(1'), (1)\}$  is far more precise, but since,  $x = 1.75$  (for 6-th degree), decomposition  $\{(3), (7)\}$  converges to original function much better. Also, keep in mind that decomposition  $\{(3), (7)\}$  can be used as a good basic approximation for all  $x > 0$ ; for  $x < 0$  use symmetry of original distribution:

$$\Phi(-x) = 1 - \Phi(x).$$

So, obtained decomposition  $\{(3), (7)\}$  can be used as an alternative to existing methods. Its attractive feature is in guaranteeing of uniform precision for fixed-degree chain fraction (7).

#### Список використаних джерел

1. Дубнер П.Н. О вычислении гамма-распределения // Сб. "Вычислительные методы и программирование". – 1971. – № 18. – МГУ.
2. Ланс Дж.Н. Численные методы для быстродействующих вычислительных машин // ИЛ. – 1962. – М.
3. Є.О. Лебедєв, М.В. Пугачова, М.М. Шаратов. Статистичні розподіли в економетричних дослідженнях та алгоритми їх розрахунку // Статистика України. – 2004. – №2. – С. 17-21.
4. Бондарчук П.І., Скоробагатько В.Я. Гілясті ланцюгові дробі та їх застосування. – Київ. – 1974. – С. 210-221.
5. Хованский А.Н. Приложение цепных дробей и их обобщений к вопросам приближенного анализа // М.: ГИТТЛ. – 1956.

Надійшла до редколегії 14.02.2007



# РАДІОФІЗИКА







УДК 537.534

Афанас'єва\* Т.В., м.н.с., Коваль І.П., к.ф.-м.н.,  
доц., Находкін М.Г., д.ф.-м.н., проф., академік  
НАН України, Суховій Є.П., студент.

### Дифузія димерів Si-Si та Ge-Ge вздовж димерного ряду поверхні Ge(001)

Процес дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si на  
поверхні Ge (001) досліджено за допомогою  
розрахунків з перших принципів. Для В-димерів  
Ge-Ge і Si-Si знайдено два найбільш імовірні  
шляхи дифузії. Шлях I відповідає корельованому  
руху адатомів. Шлях II відповідає руху цілого  
димеру. Отримані енергії бар'єрів для шляхів I  
та II є практично однаковими. Величини  
енергетичних бар'єрів для дифузії В-димерів Ge-  
Ge і Si-Si вздовж димерного ряду на поверхні Ge  
(001) становлять близько  $\sim 0,9$  eV та  $\sim 0,95$  eV,  
відповідно.

Ключові слова: дифузія, розрахунки з перших  
принципів.

\*E-mail: afanasieva@univ.kiev.ua

#### Вступ

Дослідження процесів дифузії адатомів на  
поверхнях Ge(001) та Si(001) необхідно для  
розуміння процесів епітаксійного росту кристалів  
Ge та Si. Розуміння процесів, що відбуваються  
під час росту Ge/Si гетероструктур, потрібно для  
їх контрольованого вирощування. Особлива  
увага приділяється процесам, що відбуваються на  
початкових стадіях адсорбції атомів Si та Ge на  
поверхнях Si(001), Ge(001). Дослідження за  
допомогою скануючого тунельного мікроскопу  
(СТМ) показали, що динаміка окремих адатомів  
на поверхні є дуже складною. Ізольовані адатоми  
переважно займають неепітаксійні місця, а  
окремі адатоми, навіть при температурі 160K,  
продовжують швидко рухатися. Адатоми при  
кімнатній температурі утворюють аддимери, що  
мають досить великі бар'єри для дифузії та  
дисоціації [1] та запобігають утворенню більших  
структур. Ці аддимери діють як центри  
зародкоутворення для епітаксійного росту.

У системі Si/Si(001) при кімнатній  
температурі спостерігались ізольовані димери в  
конфігураціях А, В і С типів [1,2,3]. На  
початковій стадії адсорбції елементів IV (Si, Ge)  
групи на поверхні Si(001) утворюються аддимери  
переважно в В конфігурації [3,4]. На поверхні

T.V. Afanasieva scientist, I.P. Koval, Dr. Ph.,  
Docent, M.G. Nakhodkin, Dr. Sci., Professor,  
Academician of NAS of Ukraine, E.P. Sukhoviyy,  
student.

### Diffusion of Si-Si and Ge-Ge ad-dimers on top of the substrate dimer rows of Ge(001)

The diffusion of Ge-Ge and Si-Si ad-dimers on  
top of the substrate dimer rows of Ge(001) have  
been investigated by using *ab initio* calculations.  
Two most favorable paths for the diffusion of Ge-Ge  
and Si-Si B-dimers on-top of the substrate dimer  
rows of Ge(001) were found. Path I is the  
correlated motion of adatoms. Path II is the motion  
of the intact addimer. Obtained energies of the  
transition state for pathways I, II are practically the  
same. The energy barriers for the diffusion of Ge-  
Ge and Si-Si ad-dimers on top of the substrate  
dimer rows of Ge(001) are about  $\sim 0,9$  eV and  $0,95$   
eV, respectively.

Key words: diffusion, *ab initio* calculation.

Ge(001) спостерігались ізольовані аддимери Ge-  
Ge в конфігураціях В, С типів та інколи в  
проміжному А/В стані [3]. В системі Si/Ge(001)  
ізольовані димери були знайдені виключно в  
проміжному А/В стані [3]. Виникає питання, чи  
це нова метастабільна конфігурація, чи це  
результат швидкого обертання аддимеру із  
положення А в В [3]. Дослідження за допомогою  
СТМ не дають відповіді на це питання.

Крім обертання аддимерів Ge та Si на  
поверхнях Ge(001) і Si(001), спостерігалась  
дифузія В, С-димерів уздовж димерного ряду,  
дифузія аддимеру з В-конфігурації в С-  
конфігурацію [2]. Дифузія аддимерів на  
поверхнях Ge(001) і Si(001) має анізотропію  
[1,2,3,4]. Найбільш швидко є дифузія В-димерів  
уздовж димерних рядів. Але виникає питання,  
яким чином аддимери рухаються по поверхні, чи  
є атоми в аддимері в процесі руху зв'язаними, чи  
вони рухаються незалежно, а потім знов  
утворюють димер.

Ця стаття присвячена визначенню найбільш  
імовірних шляхів та енергій для дифузії  
аддимеру Si-Si та порівняння їх з відповідними  
параметрами дифузії аддимеру Ge-Ge вздовж  
димерного ряду поверхні Ge(001).



## Методика

Розрахунки здійснювались з перших принципів у наближенні необмеженого методу Хартрі-Фока за допомогою програми Gamess [5]. Для всіх атомів Ge та H використовувався набір базисних функцій SBK (Stevens-Basch-Krauss-Sundari) для валентних електронів та ефективний SBK потенціал для внутрішніх електронів [6].

Кластери  $\text{Ge}_{21}\text{H}_{20}$  та  $\text{Ge}_{43}\text{H}_{36}$ , що використовувались для моделювання поверхні Ge(100), показано на рис. 1а,б. Всі довжини зв'язків Ge-Ge були покладені рівними 2,44 Å, що відповідає довжині зв'язку в об'ємі Ge. Проблема вільних валентностей на граничних атомах кластерів усувалась шляхом насичення обірваних зв'язків атомами водню, що розміщувались на відстані 1,52 Å. Проводилась оптимізація координат атомів Ge двох верхніх шарів поверхні та координат адатомів Ge.

Для розгляду всіх можливих шляхів дифузії по поверхні (за винятком дифузії з обміном адатомів та атомів підкладки) були розраховані поверхні потенційної енергії (ППЕ).

Для побудови ППЕ повну енергію системи розраховано залежно від зміщень  $\Delta_1$  та  $\Delta_2$  адатомів Ge, Si від їх початкового положення (рис. 1а). Початковим положенням адатомів Ge та Si є положення адатомів Ge та Si в конфігурації В-димерів. Координата для кожного атома змінювалась зі статим кроком, що дорівнює: 0,32 Å.

Енергії адсорбції аддимерів Ge-Ge і Si-Si розраховувались для кожного вузла рівномірної сітки 12x12 з відстанню між вузлами сітки 0,32 Å. Для кожного з аддимерів Ge-Ge і Si-Si із врахуванням симетрії всього розраховано приблизно 70 незалежних конфігурацій. Для більш точного визначення енергетичних бар'єрів в областях біля перехідних станів були розраховані додаткові конфігурації. У розрахунках координати адатомів вздовж димерного ряду  $\Delta_1$  та  $\Delta_2$  і положення 3-го та 4-го шарів атомів германію фіксувались. Проводилась оптимізація положень атомів верхніх двох шарів германію та координат  $z$  адатомів, нормальних до поверхні.

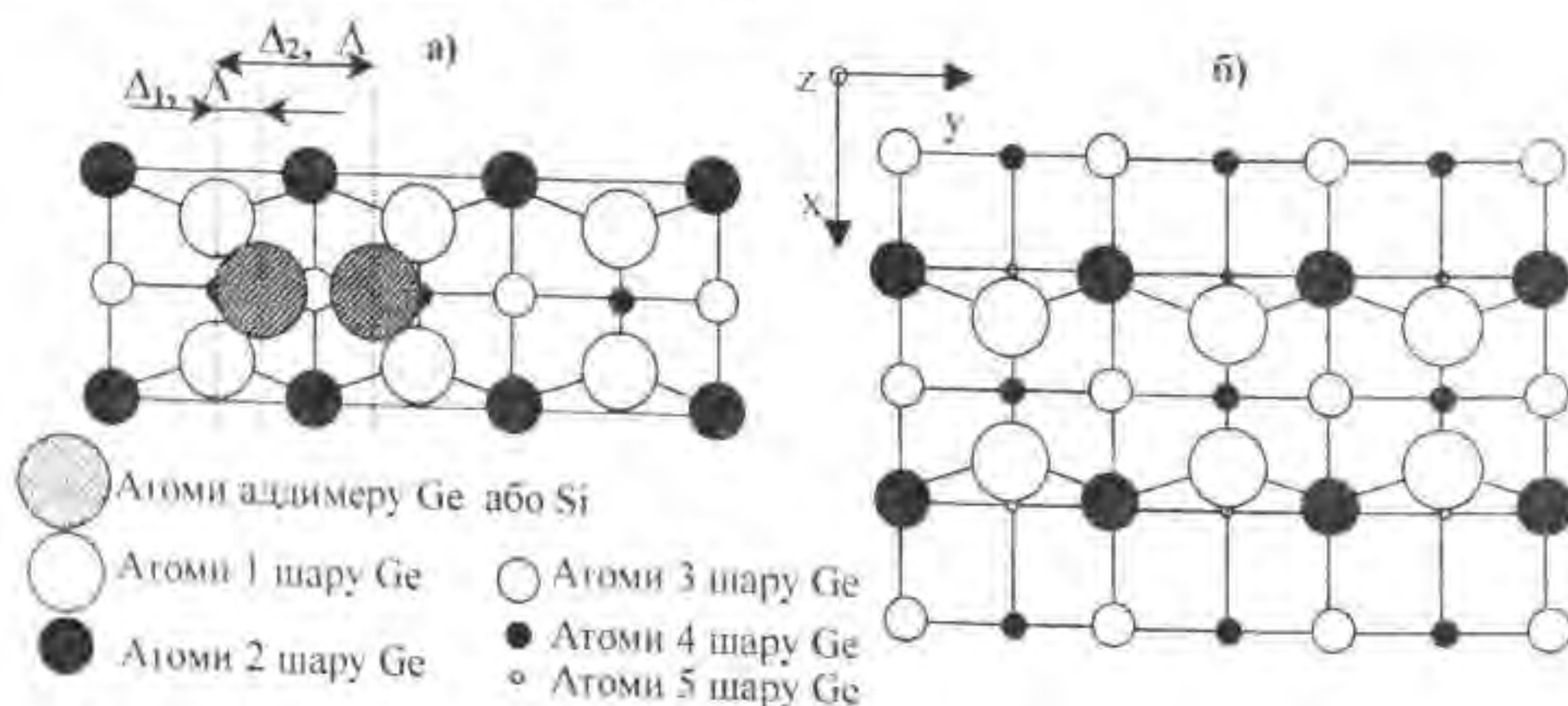


Рис. 1. Кластери, що моделюють поверхню Ge(001): (а)  $\text{Ge}_{21}\text{H}_{20}$ ; (б)  $\text{Ge}_{43}\text{H}_{36}$ . Атоми водню не показані на рисунку.

## Результати

Поверхні потенційної енергії та найбільш ймовірні шляхи для дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si вздовж димерного ряду на поверхні Ge(001) показані на рис. 2а,б, відповідно.

Поверхні потенційної енергії для дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si є схожими. Для кожного із В-димерів Ge-Ge і Si-Si виявлено по два найбільш ймовірних шляхи дифузії, позначені I

та II. Аддимери Ge-Ge і Si-Si будуть рухатися по тому шляху, який має найменший бар'єр.

На кожному із шляхів I та II існують симетричні сідлові точки S та локальний мінімум – M. Точки S, M мають індекси 1, 2 відповідно для шляхів I та II. Для більш точної локалізації цих точок S1, S2, M1 та M2 виконано більшу кількість розрахунків навколо цих точок.



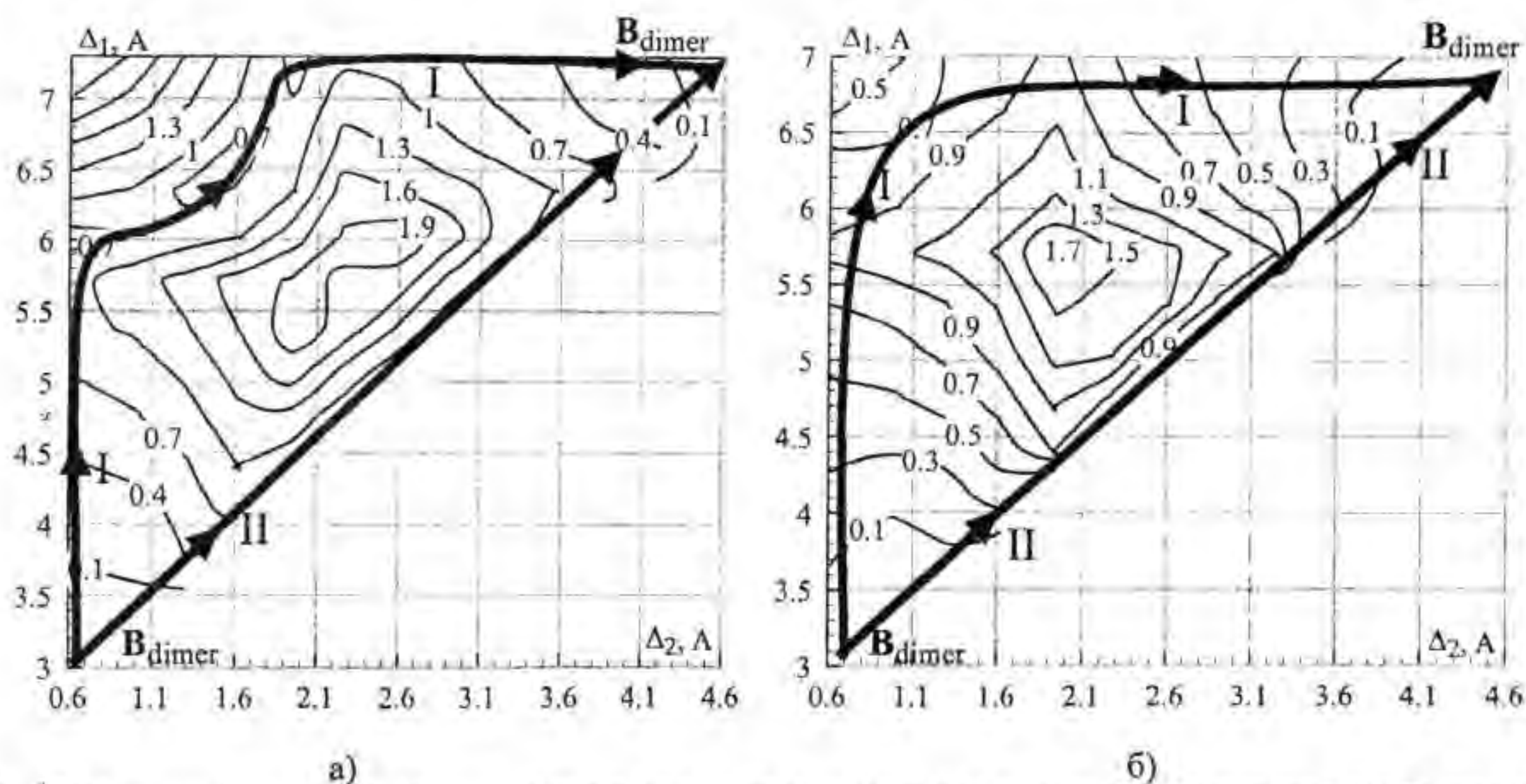


Рис.2 Поверхні потенційної енергії (ППЕ) та найбільш імовірні шляхи (I і II) для дифузії В-димерів Ge-Ge (а) і Si-Si (б) вздовж димерного ряду на поверхні Ge(001). Поверхні потенційної енергії зображені у вигляді мапи еквіпотенціальних ліній. Позначення біля еквіпотенціальних ліній є енергії адсорбції аддимерів (еВ) в даній точці, розраховані відносно положення аддимерів в конфігурації В-димеру.

Перерізи ППЕ вздовж найбільш імовірних шляхів дифузії В-димеру Ge-Ge вздовж димерного ряду поверхні Ge(001) I та II показано на рис. 3. Залежності енергії адсорбції димеру Si-Si вздовж шляхів I та II мають такий саме вигляд.

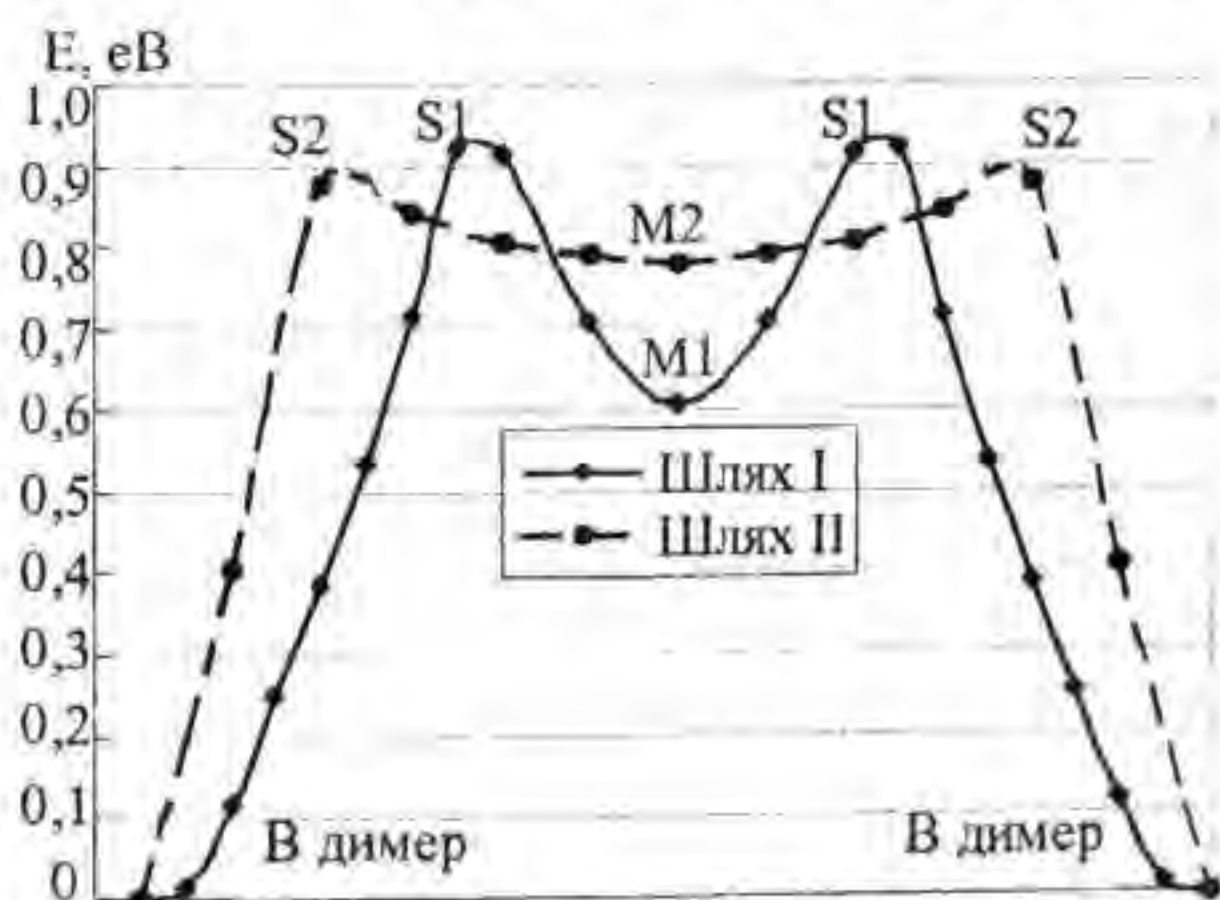


Рис.3 Залежності енергії адсорбції димеру Ge-Ge (відносно енергії В-конфігурації) вздовж шляхів I та II, зображених на рис. 2.

Розглянемо перший шлях дифузії для димеру Ge-Ge на поверхні Ge (001), який позначено I на

рис. 2 та рис. 3. Шлях I починається від рівноважної конфігурації В-димеру, проходить сідлову точку S1, локальний мінімум M1, симетричну сідлову точку S1, щоб нарешті досягти рівноважної конфігурації В-димеру у сусідній комірі. Відповідні атомні конфігурації цього шляху відображено на рис. 4. Дифузія димеру по цьому шляху має цікаві особливості. Від положення В-димеру до точки S1, рухається тільки перший атом (верхній атом). Після проходження бар'єра S1, починає рухатись другий атом. Від точки S1 до локального мінімуму (точка M1) атоми аддимеру рухаються одночасно. Від локального мінімуму M атоми продовжують одночасно рухатись до другого бар'єру S1. Починаючи з сідлової точки S1, перший атом стає нерухомим, у той час як другий атом продовжує рухатись поки не досягає конфігурації В-димеру. У новій утвореній конфігурації В-димеру перший атом (що був верхнім) стає нижнім атомом димеру, у той час як другий атом (нижній) стає верхнім атомом димеру, як показано на рис. 4.



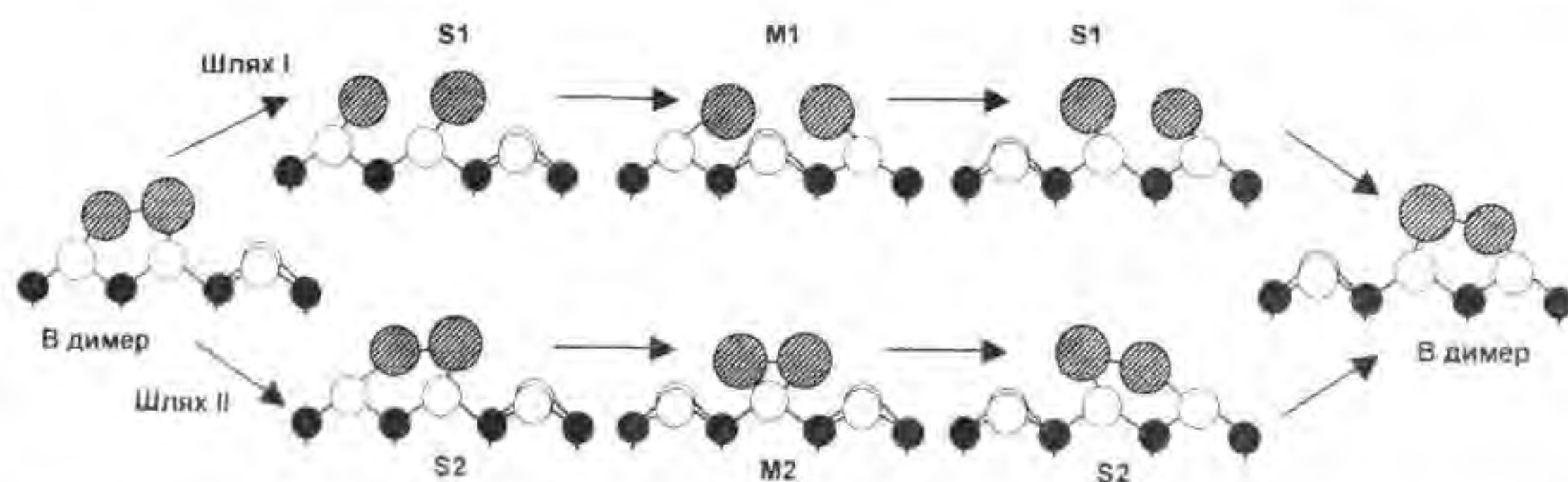


Рис.4 Основні атомні конфігурації під час руху вздовж шляхів I та II. Конфігурації S1, S2 – відповідають перехідним станам; конфігурації M1, M2 – відповідають локальним мінімумам.

Розглянемо другий шлях дифузії для димеру Ge на Ge(001), який позначено II на рис. 2 та рис. 3. Рух атомів димеру починається від рівноважної конфігурації В-димеру. На відміну від першого випадку, атоми рухаються з майже однаковою швидкістю, тобто шлях II є рухом цілого неподільного аддимеру. Для шляху II теж маємо дві симетричні сідлові точки S2 і один локальний мінімум – M2. Навколо цих точок виконано більшу кількість розрахунків, щоб точніше визначити ці сідлові точки і мінімум. Конфігурації В-димеру та конфігурації, що відповідають точкам S1, S2, M1 та M2 зображено на рис.4.

Додатково проведено обчислення навколо сідлових точок на більшому за розмірами кластері –  $\text{Ge}_{41}\text{H}_{36}$ . Це було зроблено з метою того, щоб одержати більш точні значення для дифузійних бар'єрів і запобігти небажаним впливам границь на нашу модель, та зменшити кількість степенів вільності в системі.

Енергетичні бар'єри становлять 0,94 eV і 0,92 eV, відповідно, для сідлових точок S1 (шлях I) і S2 (шлях II). Локальні мінімуми M1, M2 мають значення 0,78 eV та 0,61 eV (відносно енергії В-димеру), відповідно для шляхів I та II. Різниця між енергіями перехідних станів для шляхів I та II близька за величиною до енергії теплового руху  $kT$  ( $\sim 0,025$  eV) та є порівняною з точністю обчислень. Тому шляхи I та II мають майже однакову імовірність.

Такий саме результат отримано для дифузії для В-димеру Si-Si на поверхні Ge (001).

Енергії локальних мінімумів і бар'єрів для дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si вздовж димерного ряду поверхні Ge (100) і відповідні значення довжин зв'язку між атомами в аддимерах Ge-Ge і Si-Si наведено в таблиці 1.

Таблиця 1.

Енергії бар'єрів і локальних мінімумів (відносно енергії В-димеру) і відповідні значення довжин зв'язку між атомами Ge, Si в аддимерах для шляхів дифузії I та II.

|               | Шлях I |      | Шлях II |      |
|---------------|--------|------|---------|------|
|               | E, eV  | D, Å | E, eV   | D, Å |
| Ge-Ge/Ge(001) |        |      |         |      |
| В-димер       | 0      | 2,80 | 0       | 2,80 |
| S1,2          | 0,94   | 4,75 | 0,92    | 2,53 |
| M1,2          | 0,61   | 5,32 | 0,78    | 2,46 |
| Si-Si/Ge(001) |        |      |         |      |
| В-димер       | 0      | 2,73 | 0       | 2,73 |
| S1,2          | 0,95   | 4,72 | 0,96    | 2,49 |
| M1,2          | 0,5    | 5,29 | 0,82    | 2,43 |

Відстані між адатомами Si і Ge в точках S1, M1 є майже однаковими для та ймовірно визначаються властивостями поверхні Ge(001).

Дифузія В-димерів Ge-Ge та Si-Si на поверхні Ge(001) відрізняється від дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si на поверхні Si(001). Шляхи дифузії I та II не є рівноімовірними у випадку дифузії вздовж димерного ряду на поверхні Si(001).

Два розглянутих шляхи дифузії відрізняються відстанню між атомами в аддимері під час дифузії. На шляху II в точках S і M відстань  $D_{\text{Ge-Ge}}$  і  $D_{\text{Si-Si}}$  майже вдвічі більше, ніж на шляху I (таблиця 1). Це означає, що на шляху II аддимер більш легко може дисоціювати на атоми. Тому на цьому шляху більш імовірним стає процес дисоціативного обертання димерів [7], що призведе до більш складного механізму дифузії, ніж розглянутого в даній роботі лише прямолінійного руху адатомів Ge і Si.

Крім того, в точках S і M під час дифузії аддимерів В типу більш імовірна їхня взаємодія з домішками на поверхні Ge(001). Не виключено,



що в цих точках можуть відбуватися зміни в процесі епітаксialного нарощування Ge та Si. Ці твердження потребують додаткових спеціальних досліджень.

Таблиця 2.

Енергії бар'єрів для дифузії В-димерів Ge, Si вздовж димерного ряду на поверхнях Ge(100), Si(100)

|                | Наш<br>розрахунок<br>E, eV | Літературні<br>дані<br>E, eV       |
|----------------|----------------------------|------------------------------------|
| Si-Si /Ge(100) | 0,9                        | 0,83 [3]                           |
| Ge-Ge/Ge(100)  | 0,95                       | 0,82 [2]                           |
| Si-Si/Si (100) |                            | 0,94 [1],<br>1,09 [2],<br>1,02 [4] |
| Ge-Ge/Si(100)  |                            | 0,77 [4]                           |

Активаційні бар'єри для дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si вздовж димерного ряду на поверхні Ge(001) становлять ~0,9 eV і ~0,95 eV, відповідно. Ці величини добре узгоджуються з величинами 0,82 eV і 0,83 eV, отриманими за допомогою СТМ експерименту [3]. (див. таблицю 2).

### Висновки

Побудовано поверхні потенційної енергії для дифузії В-димерів Ge-Ge і Si-Si вздовж димерного ряду на поверхні Ge(001). На поверхнях потенційної енергії знайдено по два шляхи дифузії. Один з них відповідає корельованому руху адатомів, коли спочатку один з адатомів (верхній) стрибає у сусідню комірку, а другий лишається на місці, далі другий адатом слідує за першим і утворює аддимер у сусідній комірці. Інший шлях відповідає руху цілого аддимера вздовж димерного ряду.

Значення бар'єрів дифузії В-димерів германію та кремнію вздовж димерного ряду поверхні Ge(001) становить ~0,9 eV і ~0,95 eV, відповідно, і добре узгоджуються з величинами 0,82 eV та 0,83 eV, що були отримані за допомогою СТМ.

Автори вдячні за можливість використовувати обчислювальний кластер Інформаційно-Обчислювального центру Київського Національного університету імені Тараса Шевченка.

### Список використаних джерел

1. B.S.Swartzentruber. Direct Measurement of Surface Diffusion Using Atom-Tracking Scanning Tunneling Microscopy. // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – vol. 76. – p.459-462.
2. B.Borovsky, M.Krueger and E.Gans. Diffusion of the Silicon Dimer on Si(001): New Possibilities at 450 K. // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – vol. 78. – p.4229-4232.
3. H.J.W. Zandvliet, O. Gurlu, A.V. Afanasieva, S. Yu. Bulavenko and I.F. Koval. Diffusion of dimers on Si(001) and Ge(001) surfaces. // in "Recent Developments in Vacuum Science and Technology" (ed. J. Dabrowski), Research Signpost, 2003. – 316p.
4. Zhong – Yu Lu, Cai – Zhuang Wang and Kai – Ming Ho. Correlated piecewise diffusion of a Ge ad – dimer on the Si (001) surface. // *Phys. Rev. B* – 2000. – vol. 62. – № 12 – p. 8104-8107.
5. M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, T.L. Windus, M. Dupuis and J.A. Montgomery, Jr., GAMESS, The General Atomic and Molecular Electronic Structure System. // *J.Comput. Chem.* – 1993. – vol. 14. – p.1347.
6. W.J. Stevens, H. Basch, M. Krauss. Compact effective potentials and efficient shared-exponent basis sets for the first- and second-row atoms. // *J.Chem. Phys.* – 1984. – vol. 81. – p. 6026-6033.
7. T.V. Afanasieva, I.F. Koval, N.G. Nakhodkin, M. Yu. Pyatnitsky and H.J.W. Zandvliet. Rotation of Ge ad-dimers on Ge(001). // *Surf. Sci.* – 2001. – vol. 482-485, p. 702-707.

Надійшла до редколегії 03.04.2007



УДК 537.8.74

Ольга В. Багацька<sup>1</sup>, Олександр Ю. Бутрим<sup>2</sup>,  
Юлія В. Дурнева<sup>3</sup>, Сергій М. Шульга<sup>4</sup>

### Новий метод локалізації джерела магнітного поля в задачах магнітокардіографії

Розглянуто зворотню задачу по відновленню параметрів магнітного диполя у вільному просторі, виходячи з обмірюваної  $z$ -компоненти магнітного поля за допомогою розташованої вище площини з дискретними сенсорами. Головною метою дослідження була розробка нового надійного алгоритму розв'язання зворотної задачі та аналіз його ефективності для різних видів шумів, отриманих за допомогою моделювання Монте-Карло. В результаті одержано гістограми розподілення похибок, локалізовано і ретельно досліджено області нестабільності алгоритму.

Ключові слова: нелінійна оптимізація, магнітний диполь, магнітокардіографія.

Olga V. Bagatskaya<sup>1</sup>, Aleksandr Yu. Butrym<sup>2</sup>,  
Yuliya V. Durnyeva<sup>3</sup>, Sergey M. Shulga<sup>4</sup>

### New method of magnetic field source localization in magnetocardiography

The inverse problem of reconstructing parameters of the magnetic dipole in free space from measurements of  $z$ -component of magnetic field over finite discrete sensors plane is considered. The main purpose of the study was to develop a new robust algorithm for solving the inverse problem and to investigate its performance in different noise conditions using Monte-Carlo simulation. As a result histograms of error distributions were determined and the regions of algorithm's instability were located and examined thoroughly.

Key Words: nonlinear optimization, magnetic dipole, magnetocardiography.

<sup>1</sup> E-mail: Olga.V.Bagatska@univer.kharkov.ua

<sup>2</sup> E-mail: Butrym@univer.kharkov.ua

<sup>3</sup> E-mail: Yuliya.V.Durnyeva@univer.kharkov.ua

<sup>4</sup> E-mail: Sergey.N.Shulga@univer.kharkov.ua

### Вступ

Створення магнітометричних приладів на основі SQUID (надпровідних квантових інтерферометричних датчиків), що мають унікальну чутливість і точність, стало стимулом до дослідження проблем просторового аналізу слабких магнітних полів [6].

Сутність магнітометричних досліджень полягає в одержанні певної інформації про джерело обмірюваного магнітного поля (а саме, про його просторову локалізацію та магнітний момент) при обробці обмірюваних даних.

На сучасний момент дослідження магнітних полів, що збуджуються біологічними джерелами (так званий біомагнетизм), знайшли широке застосування в медицині. Сучасні сквід-градіометри та магнітометри дозволяють реєструвати слабкі магнітні поля, породжувані серцем людини, її мозком, м'язами [3]. Інтерпретація обмірюваних даних вимагає

розробки методів та алгоритмів, що дозволяють надати отриманій інформації форми, придатної для подальшого фізичного аналізу.

У даній роботі наведено новий метод розв'язання задачі локалізації джерела біоелектричної активності серця у вигляді магнітного диполя за методами нелінійної оптимізації.

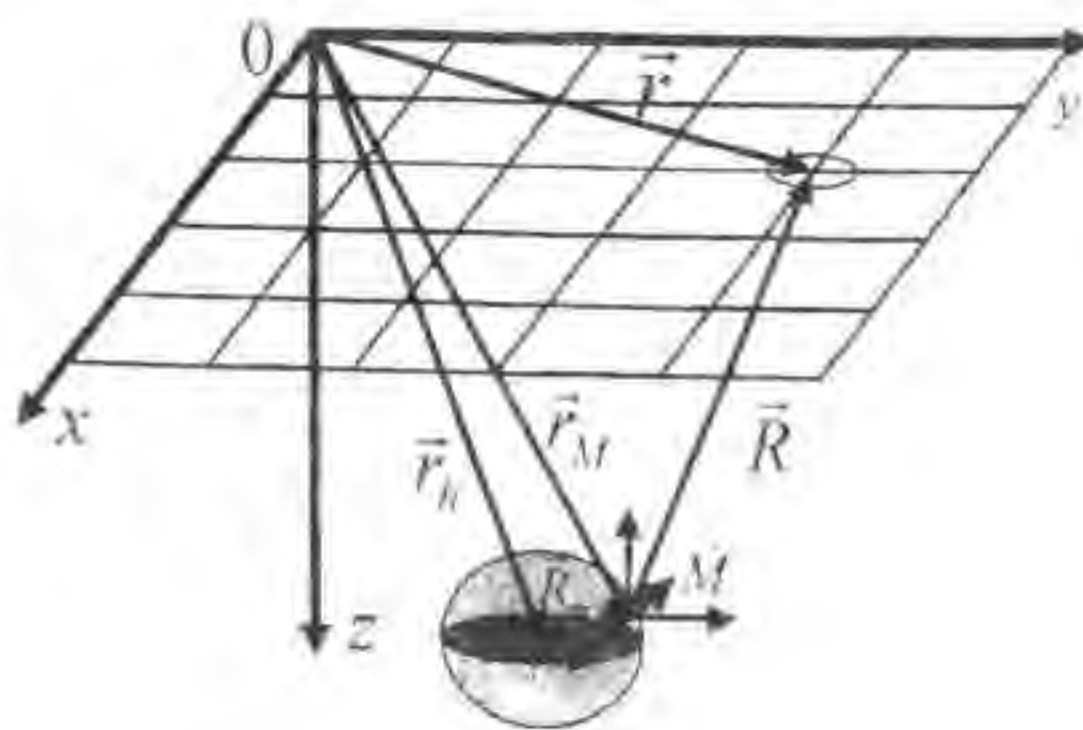


Рис. 1 Геометрія задачі



### Постановка задачі

Магнітні поля серця людини обумовлені електричною активністю міокарда. Поширення в серці хвилі деполяризації досить ефективно може бути представлено моделлю джерела, що рухається, у вигляді магнітного або електричного диполя. Магнітний диполь є більш простою моделлю, тому що на індуковане ним поле не впливає присутність неоднорідних провідних тіл (торса, серця), і його можна розглядати як поле у вільному просторі.

Поле у довільній точці простору, яке породжується дипольним магнітним джерелом з магнітним моментом  $\vec{M}$ , задається формулою:

$$\vec{B}(\vec{R}) = \frac{\mu_0}{4\pi} (\vec{M} \cdot \nabla) \nabla \frac{1}{R} \quad (1)$$

де  $R$  – відстань від точки спостереження до джерела поля,  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$  Н/м – магнітна проникність вакууму.

Зворотна задача полягає у визначенні параметрів джерела поля (положення диполя і вектора його магнітного моменту) по обмірюваному розподілу магнітного поля в просторі. Розглянемо магнітометричну систему, що складається з вимірювальної решітки  $6 \times 6$  сенсорів (відстань між магнітометрами 4 см) та вимірює тільки  $B_z$  – компоненту магнітного поля (див. рис. 1). Зважаючи на те, що вектор магнітної індукції лінійно пов'язаний з вектором магнітного моменту  $\vec{M}$ ,  $B_z$  – компоненту па  $i$ -ому магнітометрі можна представити таким чином

$$B_{zi} = \int \vec{L}_i(\vec{r}) \cdot \vec{M}(\vec{r}) dV \quad (2)$$

де  $\vec{L}_i(\vec{r})$  – так зване провідне поле (Lead Field), що залежить тільки від положення магнітного диполя відносно магнітометра.

Формула для провідного поля (2) може бути отримана, виходячи з принципу суперпозиції для магнітного поля

породжуваного диполем  $\vec{M}$  у положенні  $\vec{r}_M$ .

Нехай магнітне джерело  $\vec{M}$  у точці  $\vec{r}_M$  представляється у вигляді

$\vec{m}(\vec{r}) = \vec{M} \delta(\vec{r} - \vec{r}_M)$ . Підставляючи цей розподіл дипольних моментів до (2), одержуємо

$$B_{zi}(\vec{M}, \vec{r}_M) = \vec{L}_i(\vec{r}_M) \cdot \vec{M} \quad (3)$$

Це співвідношення дозволяє знайти всі три компоненти  $\vec{L}_i(\vec{r}_M)$  для кожного  $\vec{r}_M$ . Провідне поле має вигляд:

$$\vec{L}_i(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3z\vec{r}_{Mi} - \vec{z}_0 R_{Mi}^2}{R_{Mi}^5} \quad (4)$$

Як видно з формул (3, 4), задача є нелінійною за координатами і лінійною за компонентами магнітного моменту. Пошук шістьох параметрів  $(x, y, z; M_x, M_y, M_z)$  дуже трудомісткий, тому в літературі було запропоновано кілька теоретичних та чисельно-аналітичних методів [1, 2, 7].

### Методи розв'язання

Як відомо, розв'язання зворотної задачі передбачає знаходження параметрів джерела, що збуджує на заданій вимірювальній сітці поле, найбільш близьке до обмірюваного розподілу. Розв'язання задачі будемо проводити за допомогою методу найменших квадратів, що полягає в мінімізації суми квадратичних відхилень між обмірюваним і розрахованим (3) полем. Будемо мінімізувати квадратичну похибку виду:

$$\chi^2(\vec{r}_M, \vec{M}) = \sum_{i=1}^N (B_{zi}^{measured} - B_{zi}^{model}(\vec{r}_M, \vec{M}))^2 \quad (5)$$

Існує багато методів розв'язання цієї задачі [1], серед яких можна відзначити як найбільш часто застосовуваний градієнтний метод Левенберга-Марквардта, який не завжди призводить до найкращого результату при розв'язанні через можливу наявність кількох локальних мінімумів поблизу глобального мінімуму функції  $\chi^2$ .

Тому в даній роботі нами використовується метод, призначений для глобальної оптимізації – Particle Swarm Optimization (PSO), оптимізації за допомогою «частинок, що рухаються» – з подальшим уточненням рішення за симплексним методом (Simplex Downhill) [1, 4, 5]. PSO вимагає наявності декількох початкових наближень (зазвичай використовується декілька десятків частинок – точок у багатопараметричному



просторі області визначення функції). Як початкове наближення можна було б обрати випадково взяті точки, але, використовуючи евристичні підходи до їхнього вибору, можна досягти більшої стабільності методу й більш швидкої збіжності. У зв'язку із цим, для одержання хороших початкових наближень, ми на першому етапі використовуємо метод Minimum Norm Estimate (MNE) [3], основна ідея якого описана нижче.

Введемо функціональний підпростір  $F$ , що містить квадратично-інтегровні розподіли магнітного моменту в області  $G$  тестових точок (надалі обраної у вигляді кулі, порівняної за розмірами з серцем людини), причому тестові точки оберемо у вузлах кубічної решітки із кроком 0.8 см. Скалярний добуток  $\vec{m}_1 \in F$  і  $\vec{m}_2 \in F$  задамо в цьому підпросторі формулою

$$\langle \vec{m}_1, \vec{m}_2 \rangle = \sum_G \vec{m}_1(\vec{r}_G) \cdot \vec{m}_2(\vec{r}_G) \quad (6)$$

а норму

$$\|\vec{m}\|^2 = \langle \vec{m}, \vec{m} \rangle = \sum_G |\vec{m}(\vec{r}_G)|^2 \quad (7)$$

Ідея MNE полягає в тому, що заданий розподіл поля на датчиках може бути створено розподілом джерел, розгашованих в області  $G$  (в обраному дискретному наборі тестових точок). При цьому можуть бути такі розподіли струмів, які не створюють ніякого сигналу на датчиках. Таким чином, розв'язок зворотної задачі (знаходження розподілу диполів) визначено з точністю до довільної лінійної комбінації джерел, які не створюють сигналів. Тому при розв'язанні ми обмежуємо область пошуку підпростором розподілів диполів, який є ортогональним до описаного вище підпростору розподілів, що не створюють сигналів. Математично це виражається в тому, що розв'язок для розподілу диполів  $\vec{m}^*$  шукається у вигляді лінійної комбінації провідних полів датчиків:

$$\vec{m}^* = \sum_{j=1}^n w_j \vec{L}_j, \quad (8)$$

де  $w_j$  – невідомі скалярні вагові функції. З того факту, що  $\vec{m}^*$  є наближеним розподілом джерел,

що генерують задане поле  $B_z$  на магнітометрах, маємо:

$$\langle \vec{L}_i, \vec{m}^* \rangle = B_{zi} \quad (9)$$

З формули (9) отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь, що у матричній формі має вигляд

$$B = \Pi w. \quad (10)$$

Тут  $B = (B_{z1}, \dots, B_{zn})^T$ ,  $w = (w_1, \dots, w_n)^T$ , а  $\Pi$  – матриця  $n \times n$ , елементи якої є скалярними добутками провідних полів,  $\Pi_{ij} = \langle \vec{L}_i, \vec{L}_j \rangle$ . З огляду на це, формула (8) може бути компактно записана як  $\vec{m}^* = w^T \vec{L}$ , де  $\vec{L} = (\vec{L}_1, \dots, \vec{L}_n)^T$ .

При проведенні чисельного експерименту обрано тестові точки в межах серця, змодельованого кулею радіусом  $R_h = 5.7$  см. З метою прискорення обробки даних провідні поля в цих точках обчислюємо один раз і зберігаємо впродовж обчислень. Для забезпечення однакової чутливості у всіх тестових точках нормуємо провідні поля в кожній точці на суму квадратів сигналів, які створюються у кожному магнітометрі. Використовуючи метод SVD [1], знаходимо псевдозворотну матрицю  $\Pi^{-1}$  для (10), за допомогою якої за обмірюваними сигналами датчиків визначаємо коефіцієнти розкладання по нормованих провідних полях. Амплітуди струмів для всіх тестових точок одержуємо з (8). Далі, знайшовши розподіл магнітних диполів на обраному наборі тестових точок, ми можемо визначити всі локальні максимуми амплітуд диполів, які використовуємо надалі як початкові точки для алгоритму оптимізації (PSO).

Метод глобальної оптимізації PSO, запропонований у роботі J. Eberhart і R. Kennedy [4], виявився ефективним для розв'язання різноманітних задач оптимізації. Першим кроком алгоритму (рис. 2) є випадкова ініціалізація положення й швидкості кожної частинки рою, рівномірно розподіленого по області пошуку (у нашому випадку ми використовуємо більш обґрунтований вибір початкових точок, як описано вище). Частинки рухаються у параметричному просторі в напрямку, що визначається, виходячи з інформації про величину попереднього кроку («інерція»), напрямку на локальний мінімум, знайдений цією



частинкою («ностальгія») і напрямку на глобальний мінімум, знайдений всім роєм («кооперація»).

$$\begin{cases} v_{t+1} = c_1 v_t + c_2 (p_{i,t} - x_t) + c_3 (p_{g,t} - x_t), \\ x_{t+1} = x_t + v_{t+1}, \end{cases}$$

де  $x_t$  – поточна позиція,  $p_{i,t}$  – краща позиція в минулому,  $p_{g,t}$  – краща «глобальна» позиція,  $v_t$  – поточна швидкість,  $c_1$  – інерція,  $c_2$  – ностальгія,  $c_3$  – кооперація.



Рис. 2. Загальний алгоритм методу PSO.

Підкреслимо, що оптимізація за допомогою PSO ведеться тільки за нелінійними параметрами  $\vec{F}$ , тому що задача за лінійними параметрами  $\vec{M}$  може бути однозначно розв'язана за допомогою SVD, тобто для заданого  $\vec{F}$  величина відхилю  $\chi^2$  може бути однозначно визначена, тому насправді  $\chi^2$  є функцією тільки  $\vec{F}$ .

Ітерації PSO припиняються, як тільки всі частинки злетілися в окіл глобального мінімуму. Далі можна продовжити оптимізацію від найкращої з них за допомогою методів локальної оптимізації, наприклад, за допомогою градієнтних методів, що забезпечують набагато більш швидку збіжність, або ж за допомогою симплексного методу (Simplex Downhill), що не потребує обчислення похідних.

## Чисельні результати

Для тестування нашого методу розв'язання задачі локалізації джерела магнітного поля згенеруємо магнітне поле на сенсорах вимірювальної системи магнітним диполем одиничної амплітуди  $|\vec{M}| = 1$  для різних значень

радіус-вектора  $\vec{R}_m = (x; y; z)^T$ , виміряного від центра  $\vec{r}_0 = (7; 12; 15)^T$  кулі, що моделює серце (див. рис. 1). Чисельні експерименти будемо проводити при кількох рівнях шумів на сенсорах. Для дослідження впливу шумів до сигналу кожного сенсора додавалася випадкова величина у вигляді гаусівського шуму з сумарною енергією в усіх каналах, що визначалась як заданий відсоток від енергії сигналу у датчиках.

На рисунках 3–6 представлені графіки залежностей похибки у визначенні положення та моменту диполів  $\vec{M} = (0; 0; -1)^T$  (рис. 3, 4) і  $\vec{M} = (-1/\sqrt{3}; 1/\sqrt{3}; 1/\sqrt{3})^T$  (рис. 5, 6) від рівня шумів на датчиках вимірювальної системи. Залежності представлені для шумів у діапазоні від 0 до 10 %, у чотирьох заданих теоретичних положеннях  $\vec{R}_m$ .

Рисунки 7–8 відображають щільність розподілу ймовірності для відхилення положення диполя і для відхилення моменту диполя за наявності 1 % та 10 % гаусівських шумів у каналах датчиків вимірювальної системи для теоретичного диполя

$\vec{M} = (-1/\sqrt{3}; 1/\sqrt{3}; 1/\sqrt{3})^T$  в положенні  $\vec{R}_m = (1; 1; -3)^T$ . Як видно з чисельних експериментів, даний метод локалізації джерела магнітного поля серця дозволяє одержувати достовірне розв'язання зворотної задачі магнітостатики при достатньо великих зовнішніх шумах на датчиках вимірювальної сітки.

Особливо треба відзначити, що навіть для випадку вертикально розташованого магнітного диполя (рис. 3, 4) ми отримуємо адекватні результати, тоді як метод, описаний в роботах [2, 7], в даній ситуації не працює взагалі.

## Висновки

Запропоновані в роботі алгоритми обробки магнітометричної інформації є досить швидкими та точними методами розв'язання зворотних задач магнітостатики. Як показали чисельні експерименти, більше точним і достовірним



методом локалізації точкового джерела магнітного поля у формі магнітного диполя є метод найменших квадратів (у порівнянні з теоретичним

методом [2, 7]), що полягає в мінімізації суми квадратичних відхилень між обмірюваним і розрахованим полями.

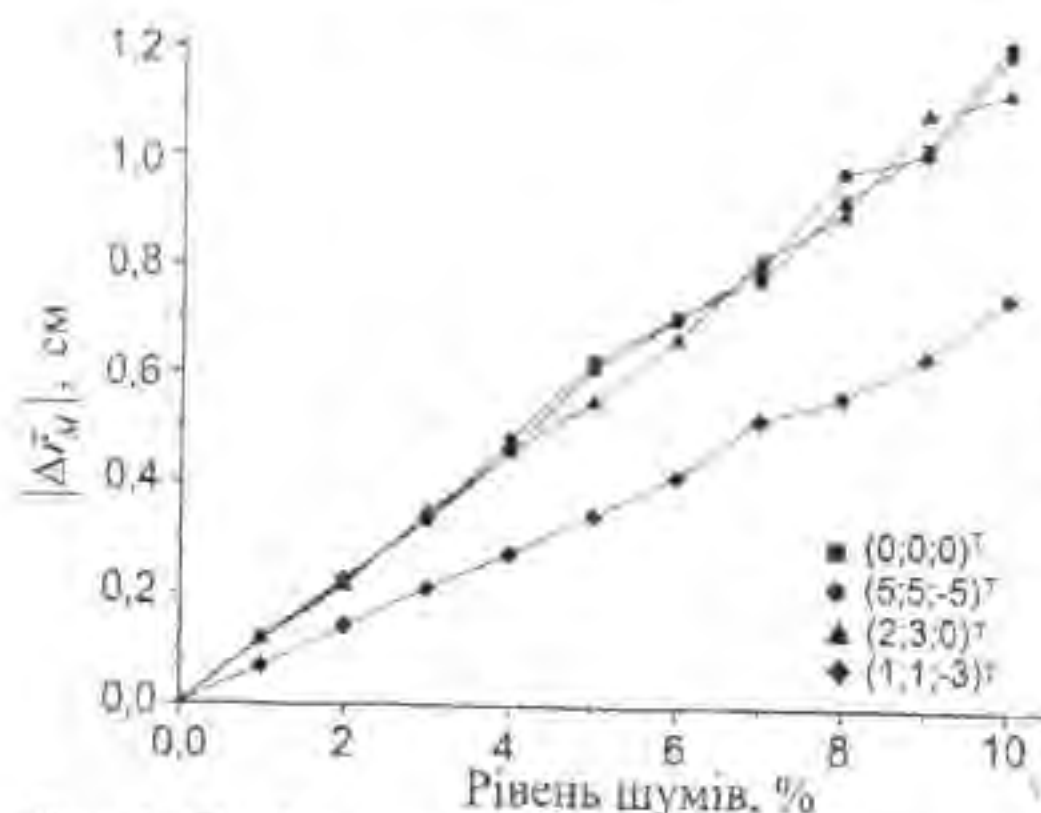


Рис. 3. Графік залежності погрішності розрахунку *положення* теоретичного диполя.

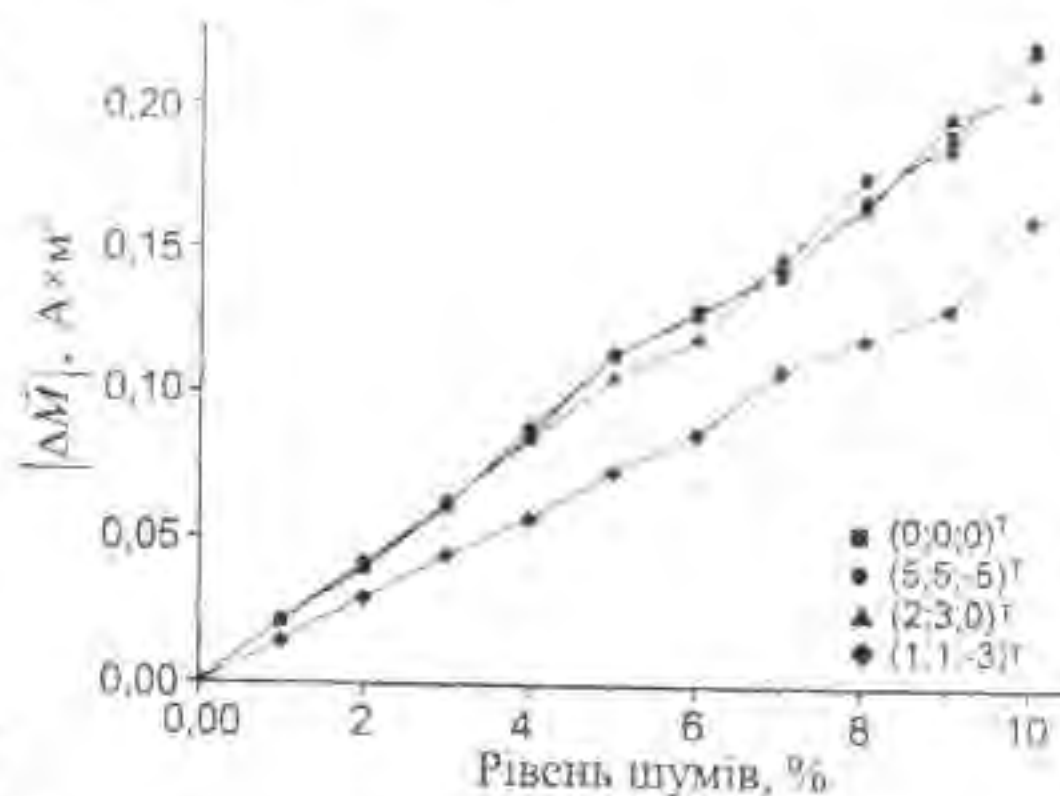


Рис. 4. Графік залежності погрішності розрахунку *моменту* теоретичного диполя.

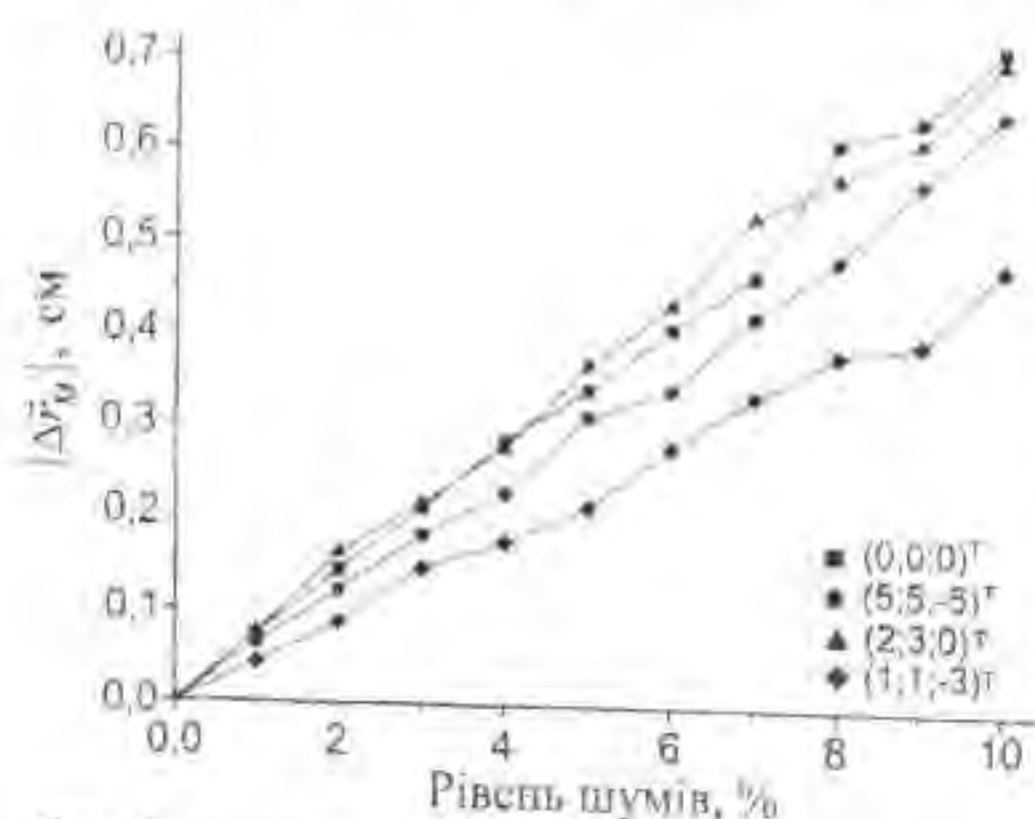


Рис. 5. Графік залежності погрішності розрахунку *положення* теоретичного диполя.

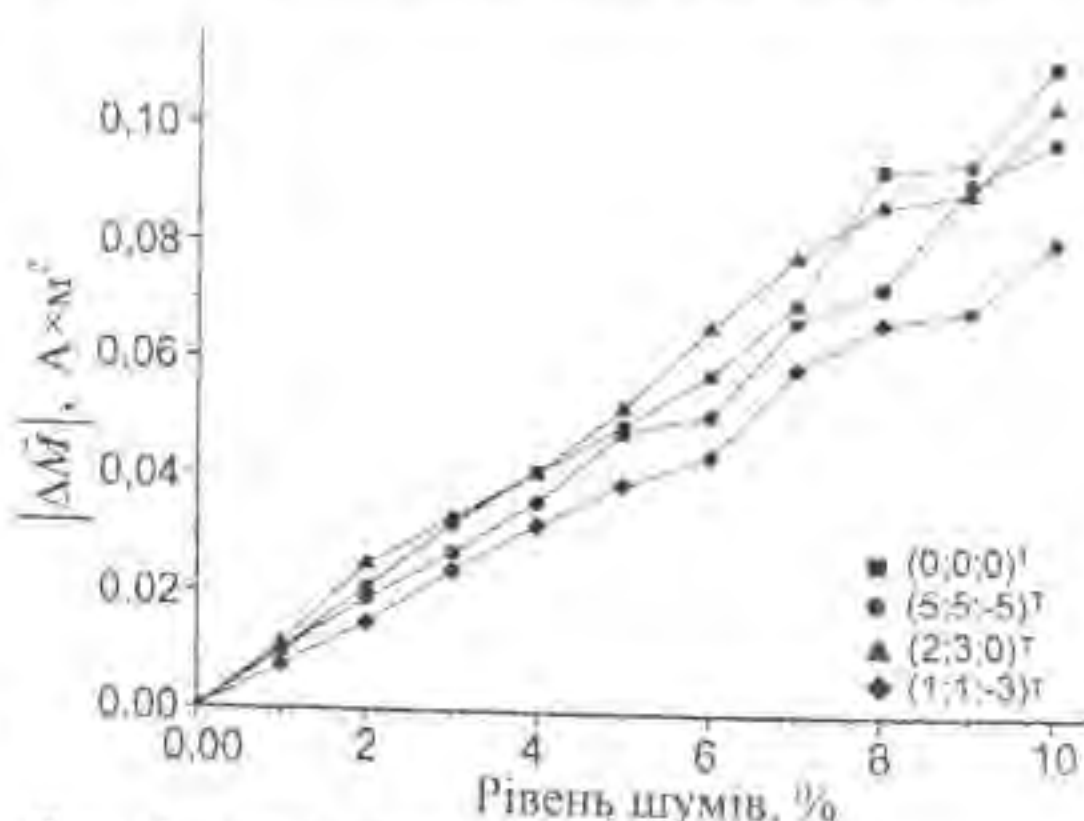


Рис. 6. Графік залежності погрішності розрахунку *моменту* теоретичного диполя.

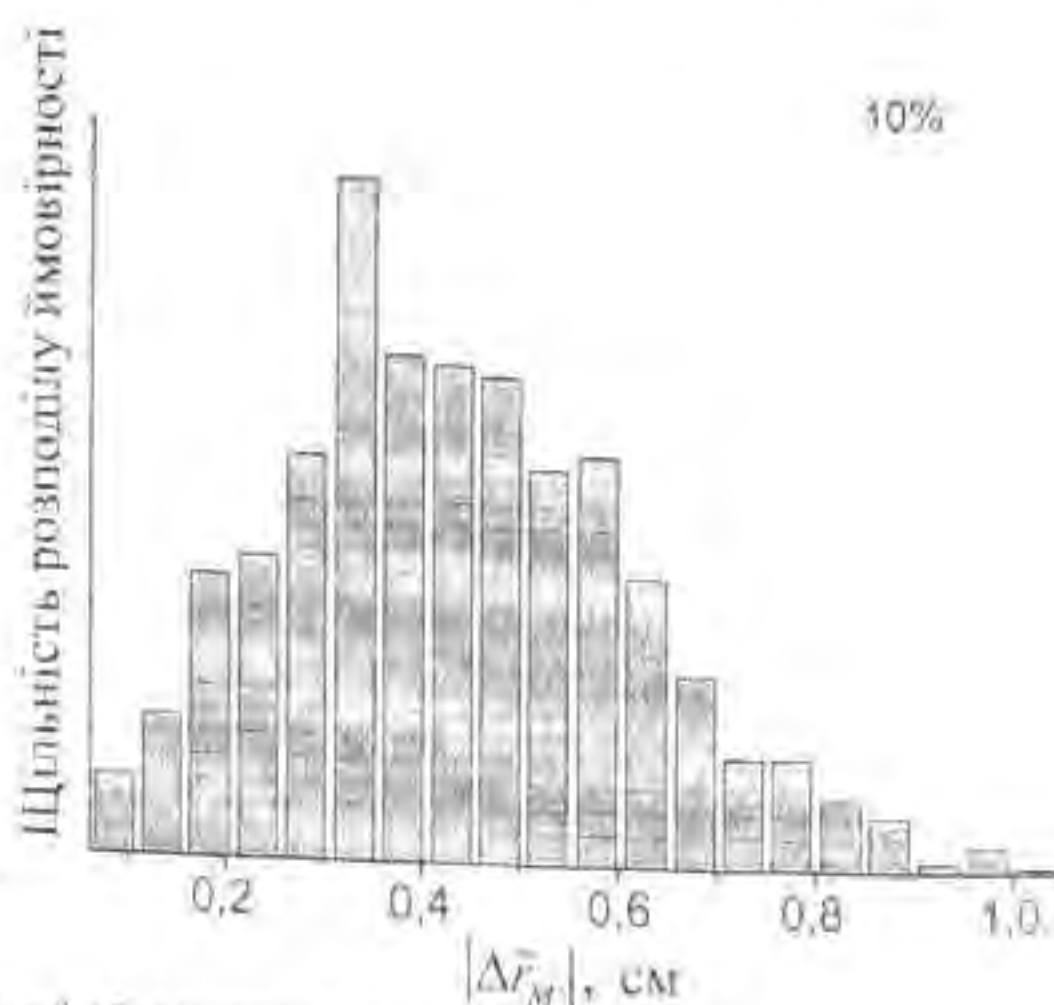
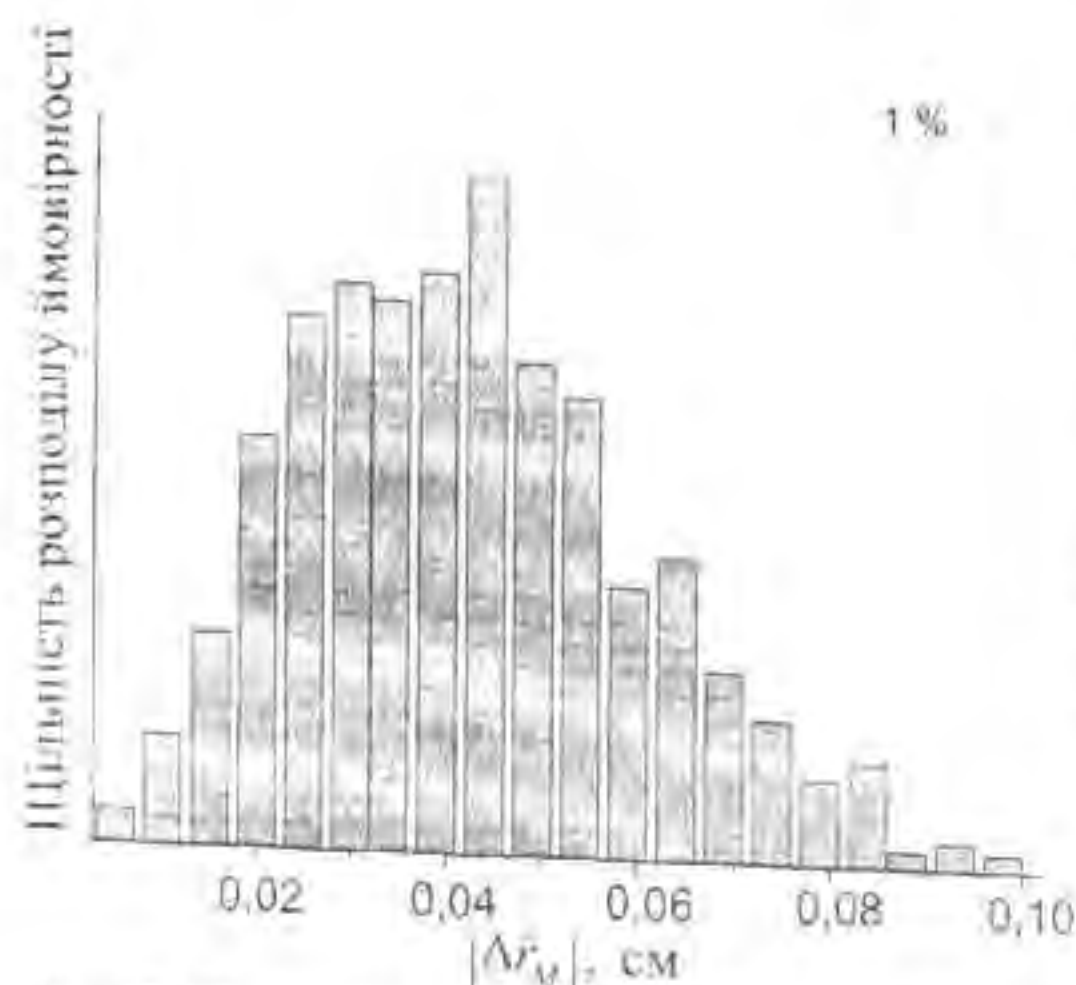


Рис. 7 Гістограма щільності розподілу ймовірності відхилення *положення* диполя.



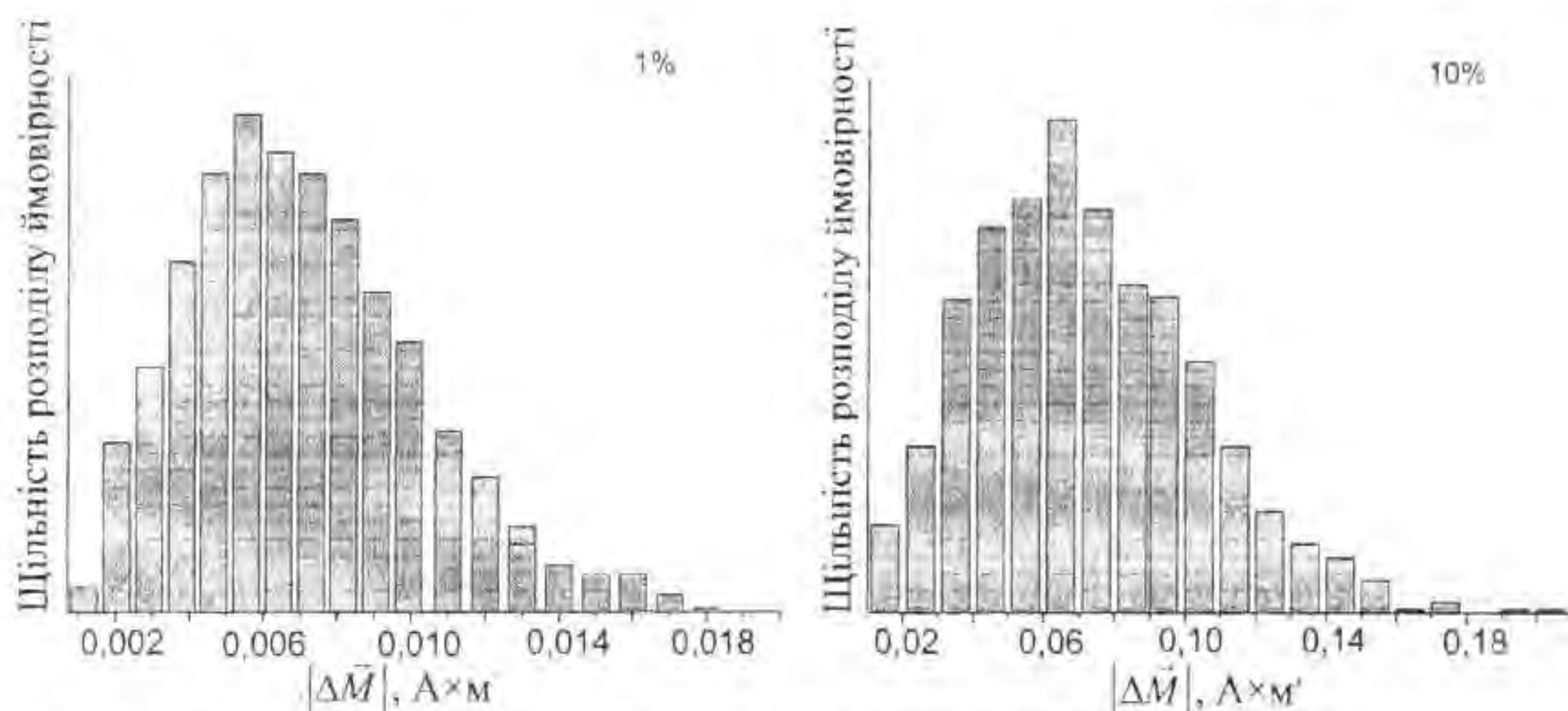


Рис. 8. Гістограма щільності розподілу ймовірності відхилення *моменту* диполя.

Необхідно також відзначити, що при наявності досить сильних шумів у датчиках вимірювальної решітки метод найменших квадратів з використанням алгоритму глобальної оптимізації PSO завжди дозволяє знаходити джерело магнітного поля правильно. У наведених у статті чисельних експериментах ми використовували найбільш часто застосовувану в клініках США вимірювальну сітку (6×6 сенсорів, відстань між якими 4 см). Однак запропонований метод нелінійної оптимізації стабільно працює навіть на решітці 3×3 сенсорів, що, в свою чергу, є суттєвим при розробці та виробництві коштовного магнітокардіографічного обладнання.

Підкреслимо, що розроблений алгоритм PSO є відправним кроком для розв'язання зворотних задач магнітокардіології, що дозволяє знаходити одночасно кілька джерел магнітного поля у вигляді як магнітного, так й електричного диполів. Вплив шумів при розгляді джерел у вигляді сукупності кількох магнітних або електричних диполів, природно, зростає. Але навіть для випадку локалізації двох електричних диполів, коли доводиться враховувати провідності торса й серця, тобто розв'язувати граничні задачі, запропонований нами метод дозволяє знаходити розв'язок задачі оптимізації по 6 нелінійним (координати двох диполів) та 6 лінійним параметрам (моменти диполів) з достатньою точністю для шумів на сенсорах на рівні 5%. Відповідний матеріал готується до опублікування.

#### Список використаних джерел

1. Wikswa J. P. SQUID Magnetometers for

Biomagnetism and Nondestructive Testing: Important Questions and Initial Answers// IEEE Trans. Applied Superconductivity. – 1995. – Vol. 5, No. 2. – p. 74-120.

2. Hamalainen M., Hari R., Ilmoniemi P. J., Uutila J. K., Lounasmaa O. V. Magnetoencephalography - theory, instrumentation, and applications to noninvasive studies of the working human brain// Reviews of Modern Physics. – Apr 1995. – Vol. 65, No. 2. – p. 413-497.

3. Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Second Edition. – Cambridge University Press. – 1992. – 996 p.

4. Семенов В. Г. Решение обратной задачи для источника физического поля дипольной или квадрупольной модели// Методы и средства точных магнитных измерений: Тр. Всесоюзн. н.-и. ин-та метрологии. – Ленинград, 1980. – с. 3-19.

5. Bagatskaya O. V., Butrym Yu. V., Durnyeva Yu. V., Shulga S. N. An analytical method for localization of the dipole magnetic field source an reconstruction of the current flow in the human heart// Bulletin of V.N. Karasin Kharkov National University. – Kharkov, 2004. – No. 646. – p. 160-165.

6. Rahmat-Samii Y., Geis D. and Robinson J. Particle Swarm Optimization (PSO)// Radio Science Bulletin. – Sept. 2003. – No. 305. – p. 14-22.

7. Kennedy J., Eberhart R. C. Particle Swarm Optimization// Proc. the 1995 IEEE Int. Conf. Neural Networks (Perth, Australia). 1995. – Vol. IV. – p. 1942-1948.

Надійшла до редколегії 05.02.07



УДК 538.915

Бар'яхтар<sup>1</sup> В.Г., доктор фіз.-мат наук, академік  
НАН України, Білоколог<sup>2</sup> Є.Д., доктор фіз.-мат.  
наук, професор, Дмитрієв<sup>3</sup> О.В., молодший  
науковий співробітник, Самар<sup>4</sup> Г.В., аспірант

### Сингулярності Ліфшиця електронних термодинамічних величин однозонного металу

В рамках однозонного наближення  
розглянуто електронний перехід Ліфшиця 2.5  
роду і отримано ряд точних виразів. Також  
досліджені сингулярності парамагнетика Паулі  
в зовнішніх магнітних полях. Параметр  
сингулярності залежить від відповідної  
ефективної маси.

Ключові слова: скінчено-зонні потенціали,  
електронний перехід Ліфшиця 2.5 роду.

<sup>1</sup>E-mail: bar@imag.kiev.ua, <sup>2</sup>E-mail: bel@imag.kiev.ua, <sup>3</sup>E-mail: dmitr@univ.kiev.ua, <sup>4</sup>E-mail:  
anna\_samar@ukr.net

#### 1 Вступ

Існує достатня кількість чисельних  
самоузгоджених методів, які дозволяють з  
високою точністю розрахувати одночастинковий  
спектр твердого тіла. Однак, окрім цього бажано  
мати точні розв'язки рівняння Шредінгера. Такі  
розв'язки для одномірних періодичних  
потенціалів корисні як у плані їх використання в  
нульовому наближенні теорії збурень, так і для  
загального розвитку теорії. Це дозволяє глибше  
зрозуміти структуру спектра і відповідних  
хвильових функцій, а також їх геометричні та  
аналітичні властивості.

Серед одновимірних потенціалів  
найцікавішими і найбагатшими з точки зору  
фізичних результатів є скінченно-зонні  
потенціали [1, 9, 13, 14]. Рівняння Шредінгера з  
скінченно-зонним потенціалом має точні  
розв'язки, спектр і хвильові функції задаються  
аналітичними функціями.

Відомо, що в загальному випадку довільний  
періодичний потенціал має в спектрі нескінченну  
кількість заборонених зон, ширина яких з ростом  
енергії швидко спадає. Якщо потенціал  
аналітичний, то швидкість спадання є  
експоненційною. Відповідно, не враховуючи  
щільності в спектрі, що виникають при енергіях  
більше деякого фіксованого значення, можна

V.G. Baryakhtar<sup>1</sup>, Dr. of phys. and math.,  
Academician of NAS of Ukraine, E.D. Belokolos<sup>2</sup>,  
Dr. of phys. and math., Prof., O.V. Dmytriiev<sup>3</sup>,  
junior researcher, G.V. Samar<sup>4</sup>, postgraduate  
student

### The Lifshits singularities of the electron thermodynamic quantities of an one gap metal

The Lifshits electron phase transition of 2.5 kind  
is described within the framework of one gap  
approximation and some exact expressions are  
derived. The singularities of the second derivative  
of magnetic momentum in an external magnetic  
field are also examined. The parameter of the  
singularities depends on corresponding effective  
mass.

Key Words: finite-gap potentials, the Lifshits  
electron phase transition of 2.5 kind.

апроксимувати довільний аналітичний потенціал  
з будь-якою точністю скінченно-зонним [11].

В.Г. Бар'яхтар, Є.Д. Білоколог, А.М.  
Коростиль для застосування до фізичних задач  
запропонували розглядати рівняння Шредінгера з  
тривимірним сепарабельним потенціалом у  
вигляді суми трьох одновимірних скінченно-  
зонних потенціалів вздовж ортогональних  
напрямків. Очевидно, що такі потенціали  
відповідають орторомбічному кристалу. Рівняння  
Шредінгера з такими потенціалами має точні  
розв'язки, хвильові функції і спектр задаються  
аналітичними функціями. Параметри, які має  
модель, мають просте фізичне значення, вони  
зв'язані з шириною щілин у спектрі. Як приклад,  
розглянемо сепарабельні скінченно-зонні  
потенціали Ламе. Еліптична функція  
Вейерштрасса має два незалежні параметри,  
фіксуючи період потенціалу  $2|\omega'|$ , у нас  
залишається один параметр  $\omega$ , змінюючи його,  
можемо міняти ширину щілин вздовж  
відповідного напрямку оберненої ґратки. Для  
характеристики ширини щілин природно  
розглядати параметр  $\tau = |\omega'/\omega|$ . При збільшенні  
 $\tau$ , ширина відповідних щілин у спектрі зростає.  
В одному з граничних випадків ширина всіх  
щілин прямує до нуля, що відповідає  
наближенню слабкого зв'язку, в другому



граничному випадку ширина всіх зон прямує до нуля, що відповідає наближенню сильного зв'язку. Також, у даній моделі можна легко отримати одно- та двовимірні системи. Для цього необхідно щільно вздовж заданих напрямків вибрати якомога ширшими.

Скінченно-зонні потенціали раніше успішно застосовувалися для розв'язку багатьох задач в області твердого тіла [1, 2, 3, 4, 6, 7].

В даній роботі застосовується однозонний сепарабельний потенціал Ламе для того, щоб описати електронний перехід Ліфшица  $2\frac{1}{2}$  роду,

що дозволяє отримати ряд точних виразів. В кінці розглядаються сингулярності другої похідної від магнітного моменту парамагнетика Паулі у зовнішньому магнітному полі.

Структура роботи наступна. У другому розділі наводяться дані про одновимірні скінченно-зонні потенціали Ламе, двозонний

потенціал розглянуто детально. У третьому розділі розглядаються сепарабельні потенціали Ламе. У четвертому розділі розглядається перехід Ліфшица  $2\frac{1}{2}$  роду, використовуючи сепарабельний однозонний потенціал. У п'ятому розділі розглядаються сингулярності другої похідної від магнітного моменту парамагнетика Паулі в зовнішньому полі.

## 2 Одновимірні скінченно-зонні потенціали Ламе

Рівняння Шредінгера

$$[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)]\Psi(x, E) = E\Psi(x, E), \quad (1)$$

з скінченно-зонним потенціалом Ламе [16]

$$U(x) = -n(n+1)\wp(ix + \omega | \omega, \omega'),$$

має дві лінійно незалежні власні функції [12]

$$\Psi_1(x, a_1, \dots, a_n) = \prod_{r=1}^n \left\{ \frac{\sigma(ix + \omega - a_r)}{\sigma(a_r)\sigma(ix + \omega)} \right\} \exp \left\{ ix \sum_{r=1}^n \zeta'(a_r) \right\} + \quad (2)$$

$$\Psi_2(x, a_1, \dots, a_n) = \prod_{r=1}^n \left\{ \frac{\sigma(ix + \omega + a_r)}{\sigma(a_r)\sigma(ix + \omega)} \right\} \exp \left\{ -ix \sum_{r=1}^n \zeta'(a_r) \right\} - \quad (3)$$

Розглянемо першу з них. Представивши її у блохівському вигляді, отримаємо вираз для хвильового вектора

$$k(a_1, \dots, a_n) = \sum_{r=1}^n \left( \zeta(a_r) - \frac{\eta'}{\omega'} a_r \right). \quad (4)$$

Спектральні параметри  $a_r$ ,  $r = \overline{1, n}$  можна знайти з того факту, що функція

$$S(x, a_1, \dots, a_n) = \Psi_1(x) \Psi_2(x) = C \prod_{j=1}^n (E - \mu_j(x)) = \prod_{r=1}^n [\wp(ix + \omega) - \wp(a_r)] \quad (5)$$

задовольняє рівнянню третьої степені

$$\partial_x^3 S + 4(n(n+1)\wp(ix + \omega) + E)\partial_x S + 2n(n+1)[\partial_x \wp(ix + \omega)]S = 0. \quad (6)$$

Підставляючи (5) у (6), можемо знайти систему алгебраїчних рівнянь на  $\wp(a_r)$  [13].

Вираз для енергії має вигляд

$$E = (2n-1) \sum_{r=1}^n \wp(a_r). \quad (7)$$

Вираз для хвильового вектора можна подати в іншому вигляді. Два лінійно незалежні розв'язки рівняння Шредінгера (1) з скінченно-зонним потенціалом  $U(x)$  можна записати в наступному вигляді [1, 9, 16]

$$\Psi_1(x, E) = \sqrt{S(x, E)} \exp \left( i \int \frac{R_{2n+1}(E)}{S(x, E)} dx \right), \quad (8)$$

$$\Psi_2(x, E) = \sqrt{S(x, E)} \exp \left( -i \int \frac{R_{2n+1}(E)}{S(x, E)} dx \right), \quad (9)$$

$$R_{2n+1}(E) = \prod_{j=1}^{2n+1} (E - \varepsilon_j), \quad (10)$$

де  $\varepsilon_j$ ,  $j = \overline{1, 2n+1}$  – границі спектра,  $C$  – константа. Для повного визначення хвильової функції необхідно знайти границі спектра  $\varepsilon_j$ ,  $j = \overline{1, 2n+1}$ . Це можна зробити, використовуючи те, що поліном  $2R_{2n+1}(E)$  є вронскіаном двох лінійно незалежних розв'язків (8) і (9). Отримуємо [12]

$$2R_{2n+1}(E) = -4(e + n(n+1)\wp(ix + \omega))S_n^2(x, E) - 2S_n(x, E)[\partial_x^2 S_n(x, E)] + [\partial_x S_n(x, E)]^2. \quad (11)$$

Після знаходження виразів для  $\varepsilon_j$ ,  $S(x, E)$ , хвильова функція  $\Psi(x, E)$  стає повністю визначеною.

З умови

$$\Psi(x + T, E) = \exp(ikT)\Psi(x, E) = \exp \left( \left\langle \frac{R_{2n+1}(E)}{S_n(x, E)} \right\rangle \right) \Psi(x, E),$$

де  $\langle \langle \dots \rangle \rangle = (1/T) \int_0^T dx (\dots)$  і враховуючи відому



рівність  $\frac{d}{dE} \left\langle \frac{R_{2n+1}(E)}{S_n(x, E)} \right\rangle = \frac{\langle S_n(x, E) \rangle}{2R_{2n+1}(E)}$ , отримуємо

вираз для хвильового вектора

$$k = k_0 + \frac{1}{2} \int_{E_0}^E \frac{\langle S_n(x, E') \rangle}{R_{2n+1}(E')} dE', \quad (12)$$

який визначає неявним чином залежність енергії електрона в одновимірному потенціалі  $U(x)$  від хвильового вектора  $k$ , тобто зонний спектр  $E = E(k)$ . Ця залежність монотонна (відповідає схемі розширених зон). У зв'язку з трансляційною інваріантністю кристалічної ґратки, дисперсія енергії в кожній з дозволених зон має періодичне продовження на весь простір оберненої ґратки, тобто в кожній з дозволених зон енергія є періодичною функцією електрона

$E_j(k+b) = E_j(k)$ ,  $j = \overline{1, n+1}$ , де  $b = \frac{2\pi}{T}$  – вектор

оберненої ґратки. З виразу (4.9) випливає обертання в нуль на границі зони Бріллюена групової швидкості частинки

$$u_j(E) = \frac{dE_j(k)}{dk} = \frac{2 \sqrt{\prod_{j=1}^{2n+1} (E - \varepsilon_j)}}{\langle S_n(x, E) \rangle}.$$

Розглянемо докладно двозонний випадок ( $n = 2$ ).

Для двозонного потенціалу Ламе краї зон є

$$\varepsilon_1 = -\sqrt{3g_2}, \quad \varepsilon_2 = -3\varepsilon_1, \quad \varepsilon_3 = -3\varepsilon_2, \\ \varepsilon_4 = -3\varepsilon_3, \quad \varepsilon_5 = \sqrt{3g_2}.$$

Вираз  $S(x, E)$  має наступний вигляд

$$S(x, E) = 18 [\wp(ix + \omega) - \wp(t_1)] \cdot [\wp(ix + \omega) - \wp(t_2)] = \\ = 2 \left[ \frac{3}{2} \left( \wp(ix + \omega) - \sqrt{g_2 - 3\wp^2(ix + \omega)} \right) - E \right] \times \\ \times \left[ \frac{3}{2} \left( \wp(ix + \omega) - \sqrt{g_2 - 3\wp^2(ix + \omega)} \right) - E \right].$$

Спектр рівняння Шредінгера (1) з двозонним потенціалом Ламе в параметричному вигляді має наступний вигляд

$$\begin{cases} k = \left( \zeta(t_1) - \frac{\eta'}{\omega'} t_1 \right) \left( \zeta(t_2) - \frac{\eta'}{\omega'} t_2 \right), \\ \wp(t_1) = \frac{E}{6} + \frac{1}{2\sqrt{3}} \sqrt{3g_2 - E^2}, \\ \wp(t_2) = \frac{E}{6} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \sqrt{3g_2 - E^2}. \end{cases}$$

Вираз, який задає залежність  $k$  від  $E$  може бути поданий у вигляді гіпереліптичного інтеграла

$$k = k_0 + \int_{E_0}^E \frac{\frac{3\sqrt{2}\eta'}{\omega'} z + \frac{1}{\sqrt{2}} (2z^2 - 3g_2)}{2\sqrt{(z^2 - 3g_2)(8z^3 - 18g_2z + 54g_3)}} dz, \quad (13)$$

Використовуючи (13), отримуємо вирази для ефективних мас у першій зоні Бріллюена

$$E = \varepsilon_1 + \frac{k^2}{m_1^*} + O(k^3),$$

$$\frac{1}{m_1^*} = \frac{2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_3 - \varepsilon_1)(\varepsilon_4 - \varepsilon_1)(\varepsilon_5 - \varepsilon_1)}{\left( \varepsilon_1^2 + 3\frac{\eta'}{\omega'} \varepsilon_1 - \frac{3}{2} g_2 \right)},$$

$$E = \varepsilon_2 + \frac{k^2}{m_2^*} + O(k^3),$$

$$\frac{1}{m_2^*} = -\frac{2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)(\varepsilon_4 - \varepsilon_2)(\varepsilon_5 - \varepsilon_2)}{\left( \varepsilon_2^2 + 3\frac{\eta'}{\omega'} \varepsilon_2 - \frac{3}{2} g_2 \right)},$$

де  $m_1^*$ ,  $m_2^*$  – ефективні маси біля дна і біля верхньої границі першої зони відповідно. Видно, що ефективні маси залежать від усіх країв спектра. В таблиці 1 наводяться обернені ефективні маси для різних значень параметра

$|r| = \left| \frac{\omega'}{\omega} \right|$ , при розрахунках ми поклали період потенціалу  $T = |2\omega| = 2$ .

Таблиця 1  
Обернені ефективні маси для першої зони для двозонного потенціалу Ламе

| $ r $ | $1/m_1^*$ | $1/m_2^*$ |
|-------|-----------|-----------|
| 0.55  | 1.99      | -47.34    |
| 0.74  | 1.89      | -10.03    |
| 1     | 1.25      | -2.13     |
| 1.23  | 0.57      | -0.67     |
| 1.52  | 0.15      | -0.16     |
| 2.18  | 0.005     | -0.005    |

З таблиці 1 видно, що при збільшенні значення  $|r|$ , значення  $1/|m_1^*|$  і  $1/|m_2^*|$  зменшуються. Коли зона вироджується в енергетичний рівень, що відповідає граничному випадку сильно зв'язаних електронів, то  $m_1^* \rightarrow \infty$ ,  $m_2^* \rightarrow -\infty$ . В цьому випадку отримуємо так звані “важкі” електрони. В іншому граничному випадку вільних електронів  $m_1^*$  наближається до маси вільного електрона, тобто  $m_1^* \rightarrow 1/2$  (маса вільного електрона дорівнює  $1/2$  тому, що ми розглядаємо обізрозмірене рівняння Шредінгера). І згідно з тим, що ширина



забороненої зони наближається до нуля, в цьому випадку  $m_2^* \rightarrow -0$ .

На рисунку 1 представлені графіки залежності  $E = E(k)$  і  $U(x)$  для двозонного потенціалу Ламе.

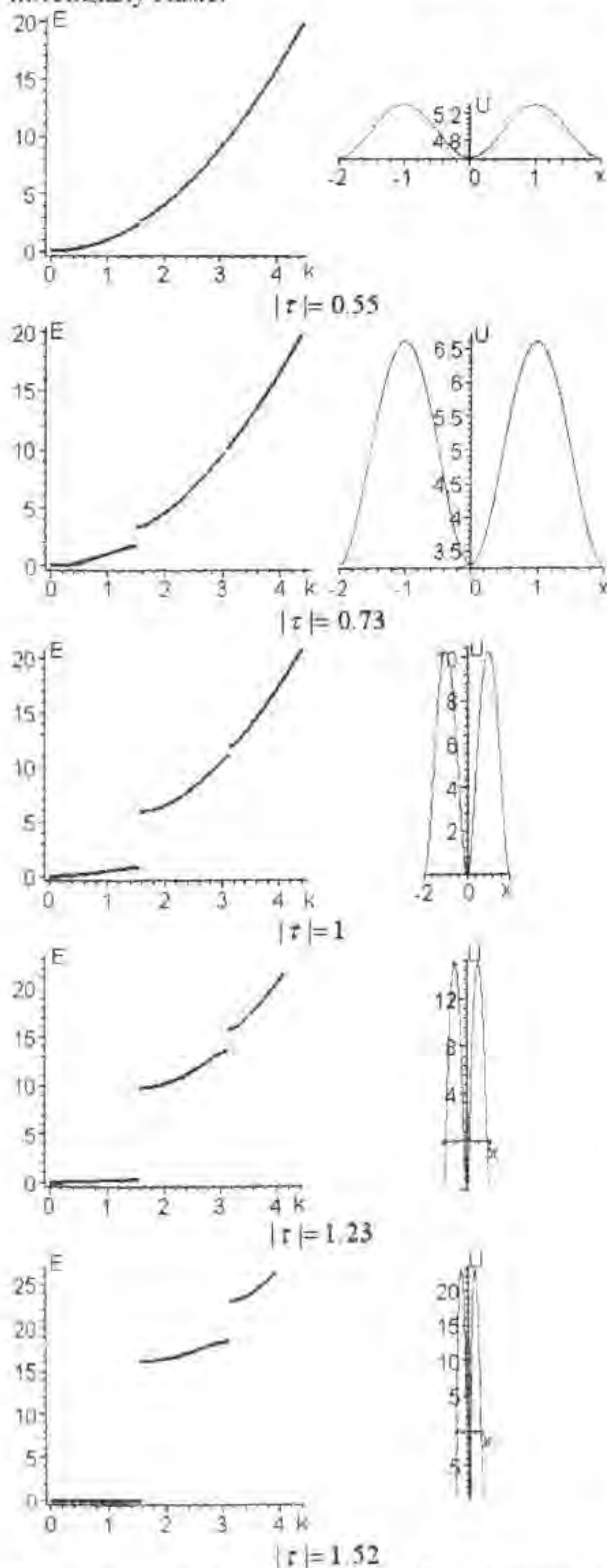


Рис. 1. Дисперсійна залежність  $E(k)$  і потенціал  $U(x)$  для двозонного потенціалу Ламе.

Видно, що при збільшенні значення параметру  $|\tau|$ , ширина заборонених зон збільшується. На рисунках видно випадки дуже вузьких і дуже широких заборонених зон. При збільшенні значення  $|\tau|$  друга зона також вироджується в енергетичний рівень.

### 3 Тривимірні сепарабельні скінченно-зонні потенціали Ламе

Обезрозмірений одноелектронний гамільтоніан з тривимірним сепарабельним скінченно-зонним потенціалом має вигляд [1]

$$H(x, y, z) = -\partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 - n_1(n_1 + 1)\wp(ix + \omega_1) - n_2(n_2 + 1)\wp(iy + \omega_2) - n_3(n_3 + 1)\wp(iz + \omega_3), \quad (14)$$

Власні функції є добутком одновимірних власних функцій вздовж кожної з координат,

$$\Psi_{I,k}(\mathbf{r}) = \prod_{j=1}^3 \Psi_{I_j, k_j}(x_j),$$

де  $\mathbf{I} = (I_1, I_2, I_3)$ ,  $I_j \in \{1, \dots, \ell_j\}$  є цілочисельний вектор, який нумерує зони енергетичного спектра. Вираз для енергії складається з трьох доданків

$$E(\mathbf{k}) = E(k_1) + E(k_2) + E(k_3).$$

У схемі приведеної зони, хвильовий вектор подається у вигляді приведенного вектора  $\mathbf{k}$ , який змінюється в першій зоні Бріллюена, і вектора оберненої ґратки  $\mathbf{b} = \mathbf{I} \cdot \hat{\mathbf{B}}$ , де  $\hat{\mathbf{B}}$  - матриця базисних векторів оберненої ґратки. Відповідні гілки енергетичного спектра електронів описуються виразами виду

$E(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \sum_{\sigma=1}^3 E_{\sigma}((\mathbf{k} + \mathbf{I} \cdot \hat{\mathbf{B}})_{\sigma})$ . Позначимо  $\varepsilon_F$  як значення енергії Фермі. Поверхня Фермі описується рівняннями виду  $\varepsilon_k = E(\mathbf{k} + \mathbf{b})$ , де  $\varepsilon_F$  - енергія Фермі. Кожне з рівнянь для заданого вектора  $\mathbf{b}$  визначає один з листів поверхні Фермі. Множина векторів оберненої ґратки відповідає їх множині в розкладі сепарабельного потенціалу в ряд Фур'є. Якщо реальний потенціал електрона в ґратці мало відрізняється від сепарабельного, то відповідні поправки можна врахувати за теорією збурень.

На рисунках 2, 3 та 4 зображені поверхні Фермі для кристала з кубічною симетрією, побудовані, використовуючи сепарабельний одно-зонний потенціал ( $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ ) для різних значень параметру  $|\tau|$ . На рисунку 2 зображені поверхні Фермі в першій зоні при  $\varepsilon_F = 2.43$ . При даному значенні  $\varepsilon_F$  друга зона порожня. На рисунку 3 зображені відкриті



поверхні Фермі в першій зоні при  $E_F = 3.8$ , на рисунку 4 зображені замкнуті поверхні Фермі в другій зоні для того ж значення  $E_F$ .

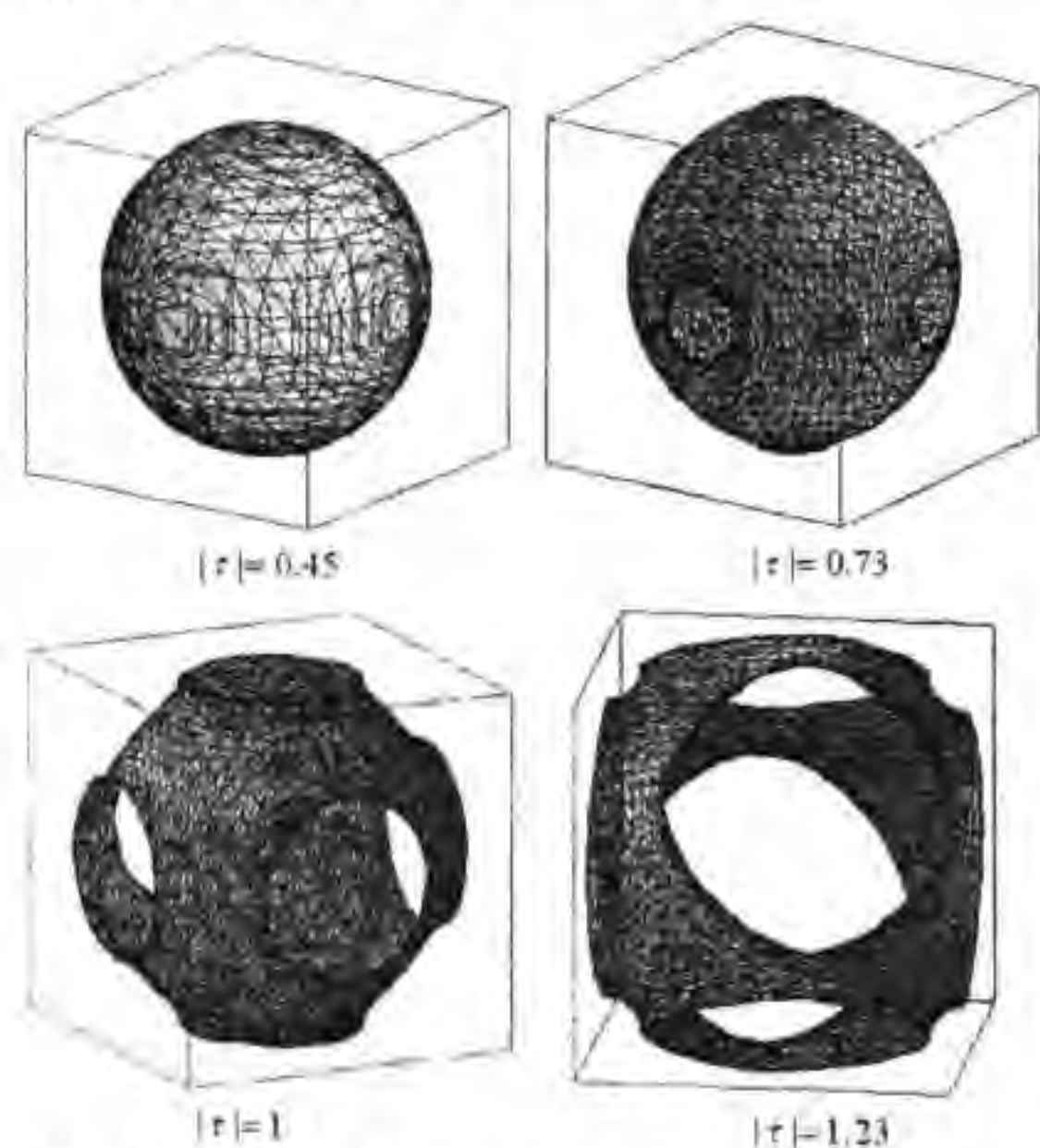


Рис. 2. Поверхня Фермі в першій зоні при різних значеннях параметру  $|\tau| = |\omega'/\omega|$ ,  $E_F = 2.43$

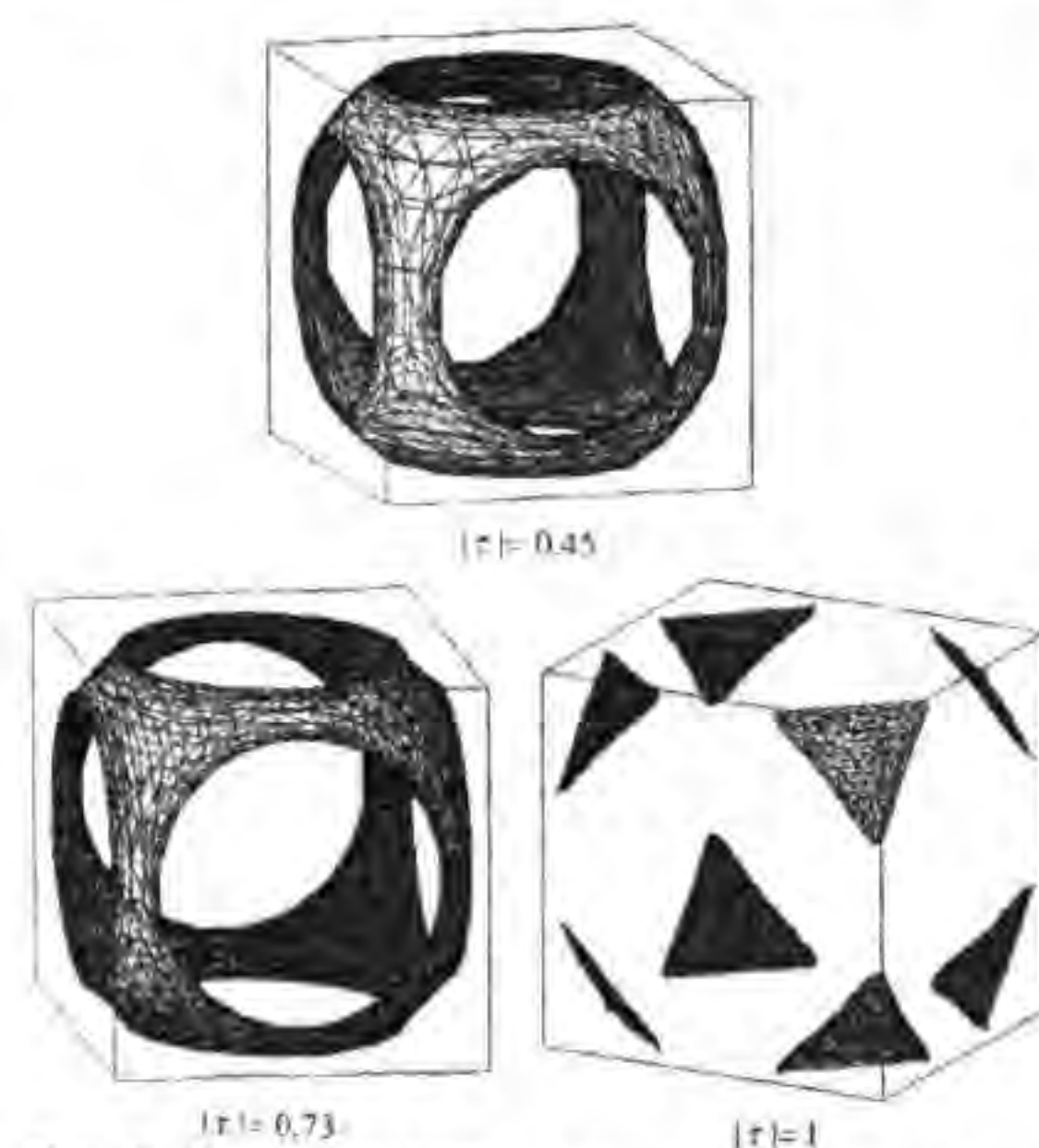


Рис. 3. Поверхня Фермі в першій зоні при різних значеннях параметру  $|\tau| = |\omega'/\omega|$ ,  $E_F = 3.8$

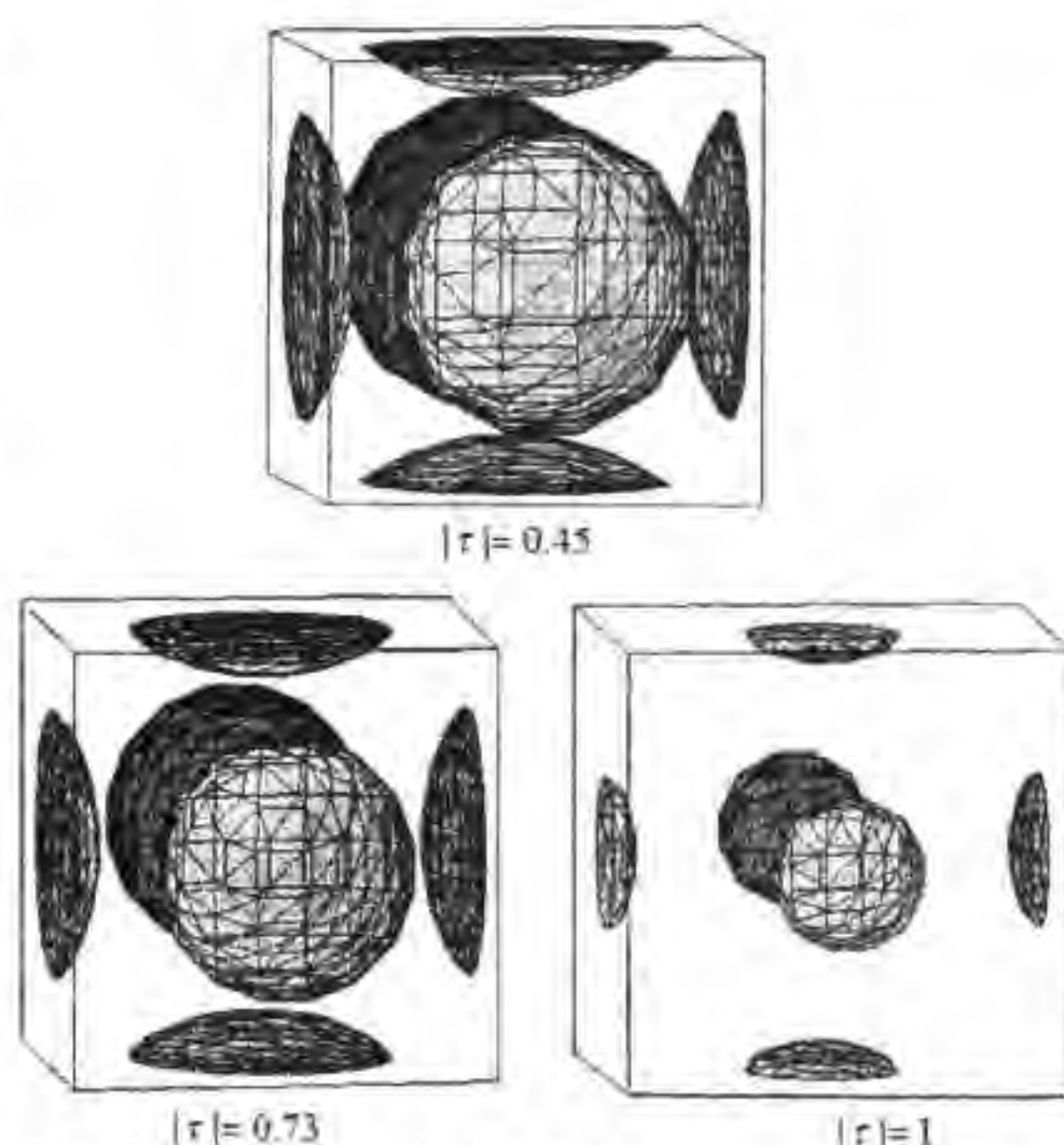


Рис. 4. Поверхня Фермі в другій зоні при різних значеннях параметру  $|\tau| = |\omega'/\omega|$ ,  $E_F = 3.8$

З рисунків видно, як змінюється топологія поверхні Фермі при переході від граничного випадку вільних електронів до іншого граничного випадку сильно зв'язаних електронів.

#### 4. Сингулярності термодинамічного потенціалу в однозонному металі

В металах можуть мати місце аномалії термодинамічних та кінетичних величин при низьких температурах та при високому тиску. Це пов'язано з особливостями енергетичного спектра електронів провідності. Густина електронних станів у кристалі

$$\nu(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{dS}{|\nabla E(\mathbf{k})|}, \text{ як функція}$$

$E$ , має сингулярності, які мають назву сингулярності Ван Хова [17]. Вони виникають, коли групова швидкість електронів наближається до нуля. Для тривимірного кристалу в критичній точці функція  $\nu(E)$  неперервна, однак її похідна має розрив і з однієї із сторін прямує до  $\infty$ . Ліфшиц показав, що в критичній точці при  $T = 0$ , має місце електронний перехід, який пізніше був названий переходом Ліфшиця  $2\frac{1}{2}$

роду [10]. Нижче розглядаються сингулярності Ліфшиця термодинамічного потенціалу в моделі однозонного потенціалу Ламе, це дозволяє нам отримати ряд точних формул. Слід зауважити, що в даний час існує багато робіт, в яких розглядається сценарій Ван Хова переходу в



надпровідну фазу для високотемпературних надпровідників [15].

Рівняння Шредінгера з однозонним сепарабельним потенціалом Ламе має вигляд

$$-\Delta\Psi + W(x, y, z)\Psi = E\Psi, \quad (15)$$

$$W(x, y, z) = -2\wp(ix + \tilde{\omega} | \tilde{\omega}, \tilde{\omega}') - 2\wp(iy + \tilde{\omega} | \tilde{\omega}, \tilde{\omega}') - 2\wp(iz + \tilde{\omega} | \tilde{\omega}, \tilde{\omega}') + e_3 + 2\tilde{e}_1. \quad (16)$$

Виберемо напівперіоди та енергію Фермі таким чином, щоб у першій зоні поверхня Фермі мала вигляд гофрованого циліндра витягнутого вздовж осі  $k_z$ , так як це зображено на рисунку 5.

Для цього необхідно покласти  $\tilde{\omega} > \omega$ ,  $|\tilde{\omega}'| > |\omega'|$  (при розрахунках ми використовували наступні значення:  $\omega = 1$ ,  $\omega' = 0.65i$ ;  $\tilde{\omega} = 0.3$ ,  $\tilde{\omega}' = 0.5i$ ). Тоді потенціал можна розкласти в ряд Тейлора по змінним  $x, y$  і обмежитись нульовим наближенням.

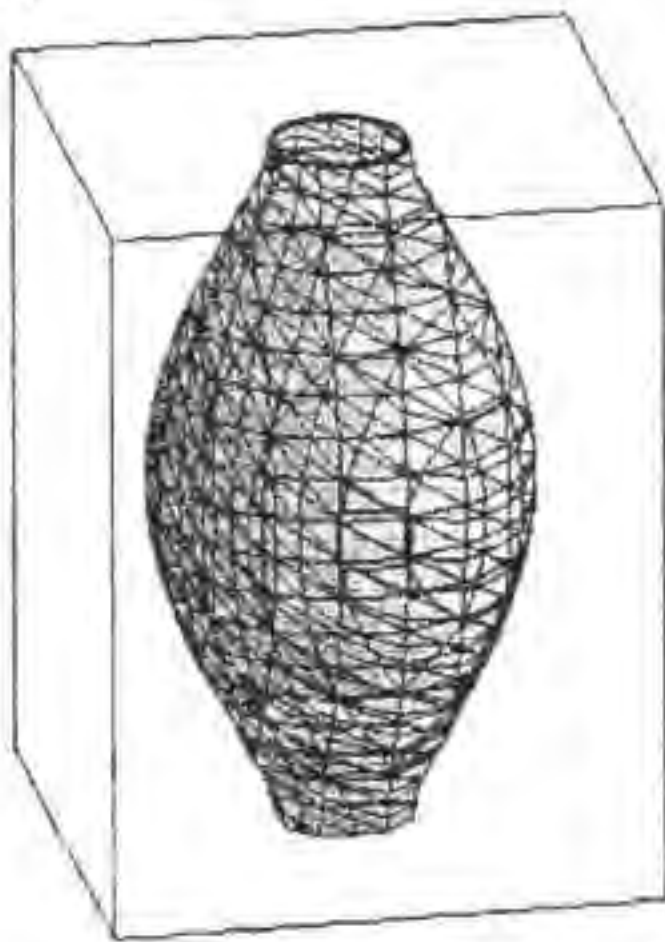


Рис. 5. Поверхня Фермі в першій зоні у вигляді гофрованого циліндру,  $\omega = 1$ ,  $\omega' = 0.65i$ ;  $\tilde{\omega} = 0.3$ ,  $\tilde{\omega}' = 0.5i$ .

Спектр рівняння Шредінгера

$$-\Delta\Psi + U(x, y, z)\Psi = E\Psi,$$

$$U(x, y, z) = -e_3 - \wp(iz + \omega | \omega, \omega')$$

має наступний вигляд

$$\begin{cases} E(k_x, k_y, k_z) = k_x^2 + k_y^2 - e_3 + \wp(h_z), \\ k_z = \zeta(h_z) - \frac{\eta'}{\omega'} h_z, \end{cases} \quad (17)$$

Функція  $E(k_x, k_y, k_z)$  в першій зоні має дві критичні точки: мінімум і сідлову точку, в другій зоні вона має одну критичну точку - мінімум. Нижче будемо розглядати тільки першу зону.

Позначимо  $E_c = -e_3 + e_2$  значення енергії, при якому поверхня Фермі відкривається на

границі зони Бріллюена, ортогональній осі  $k_z$ . Введемо параметр  $t_0$ .

1. При  $0 \leq E < E_c$  покладемо

$$E + e_3 = \wp(t_0 + \omega'), \text{ тоді } \frac{dt_0}{dE} = \frac{1}{\wp'(t_0 + \omega')}$$

2. При  $E > E_c$  покладемо  $t_0 = \omega$ .

Використовуючи параметр  $t_0$ , знайдемо вираз для числа станів

$$N(E) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int dk_x dk_y dk_z = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int (k_x^2 + k_y^2) dk_z = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^{t_0} [E + e_3 - \wp(t + \omega')] \left( -\wp'(t + \omega') - \frac{\eta'}{\omega'} \right) dt.$$

Після нескладних розрахунків отримаємо вираз

$$N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \left[ \left( \frac{g_2}{12} - \frac{\eta'}{\omega'} (E + e_3) \right) t_0 + (\zeta(t_0 + \omega') - \eta') \left( E + e_3 - \frac{\eta'}{\omega'} \right) + \frac{1}{6} \wp'(t_0 + \omega') \right] \quad (18)$$

$$\nu(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \zeta(t_0 + \omega') - \frac{\eta'}{\omega'} (t_0 + \omega') \right). \quad (19)$$

Безпосередньо з означення параметру  $t_0$  випливає

$$\nu(E) = \begin{cases} \frac{V}{2\pi^2} |\mathbf{k}(E)|, & E < E_c, \\ \frac{V}{2\pi} \cdot \frac{1}{2|\omega'|}, & E > E_c. \end{cases} \quad (20)$$

Цей вираз залишається справедливим і у випадку  $\lambda$ -зонного потенціалу Ламе.

Знайдемо похідну від густини станів.

1. При  $0 \leq E < E_c$  отримуємо

$$\frac{d\nu(E)}{dE} = -\frac{V}{4\pi^2} \cdot \frac{(\eta'/\omega') + e_3 + E}{E^{1/2}(e_1 - e_3 - E)^{1/2}} \cdot \frac{1}{(E_c - E)^{1/2}}.$$

2. При  $E > E_c$  отримуємо  $\frac{d\nu(E)}{dE} = 0$ .

Сингулярність в точці  $E = e_1 - e_3$  відповідає виникненню поверхні Фермі в другій зоні. Сингулярність в точці  $E = 0$  відповідає мінімуму  $E$  (зародження поверхні Фермі в центрі зони Бріллюена). Сингулярність в точці  $E = E_c$  відповідає сідловій точці (відкриття поверхні Фермі на границі зони Бріллюена).

Вираз для термодинамічного потенціалу в нормальному металі має вигляд

$$\Omega(T, V, \mu) = - \int_0^\infty \frac{N(\varepsilon) d\varepsilon}{1 + \exp((\varepsilon - \mu)/T)},$$



$$\Omega(0, V, \mu) = \Omega_0 = - \int_0^\infty N(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Введемо позначення

$$\frac{\alpha}{2} = \frac{V}{4\pi^2} \cdot \frac{|\eta'/\omega' + e_2|}{(e_2 - e_3)^{1/2} (e_1 - e_2)^{1/2}},$$

$$A = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left( \frac{g_2}{12} \omega + \frac{\pi}{2|\omega'|} e_3 - \frac{\eta\eta'}{\omega'} \right),$$

$$B = \frac{V}{2\pi} \cdot \frac{1}{2|\omega'|},$$

$$C = -\frac{V}{2\pi^2} \cdot \left[ \frac{e_2^2}{2} \cdot \frac{\pi}{2|\omega'|} + e_2 \left( \frac{g_2}{12} \omega - \frac{\eta'}{\omega'} \eta \right) + \right. \\ \left. + \frac{3}{40} g_2 \eta - \omega \left( \frac{\eta'}{\omega'} \cdot \frac{g_2}{12} + \frac{1}{20} g_3 \right) \right].$$

Розкладемо  $\frac{d\nu(E)}{dE}$ ,  $\nu(E)$ ,  $N(E)$  в ряд за степенями  $(E_c - E)^{1/2}$ , отримаємо

$$\frac{d\nu(E)}{dE} = \begin{cases} \frac{\alpha}{2} \cdot \frac{1}{(E_c - E)^{1/2}} + O((E_c - E)^{1/2}), & E < E_c, \\ 0, & E > E_c, \end{cases}$$

$$\nu(E) = \begin{cases} B - \alpha(E_c - E)^{1/2} + O((E_c - E)^{3/2}), & E < E_c, \\ B, & E > E_c, \end{cases}$$

$$N(E) = \begin{cases} A + BE + \frac{2}{3} \alpha(E_c - E)^{3/2} + \\ + O((E_c - E)^{5/2}), & E < E_c, \\ A + BE, & E > E_c. \end{cases}$$

Використовуючи вираз для  $N(E)$ , отримаємо для термодинамічного потенціалу  $\Omega_0$  розклад в ряд біля критичної точки

$$\Omega_0 = \begin{cases} C + AE_c + \frac{1}{2} BE_c - A\mu - \frac{1}{2} B\mu^2 + \frac{4}{15} \alpha(E_c - \mu)^{5/2} + O((E_c - \mu)^{7/2}), & \mu < E_c, \\ C + AE_c + \frac{1}{2} BE_c - A\mu - \frac{1}{2} B\mu^2, & \mu > E_c. \end{cases}$$

## 5 Сингулярності намагніченості парамагнетиків Паулі

В зовнішньому магнітному полі магнітні моменти електронів поляризуються, і виникає повний магнітний момент

$$M(T, \mu, H) = \frac{\beta}{2} \int_0^\infty \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu - \beta H}{T}\right)} - \\ - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu + \beta H}{T}\right)} \nu(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (21)$$

де  $\beta = e\hbar/2mc$  – магнетон Бора,  $H$  – зовнішнє магнітне поле. При  $T = 0$  можна легко провести інтегрування і отримати вираз

$$M(0, \mu, H) = \frac{\beta}{2} (N(\mu + \beta H) - N(\mu - \beta H)). \quad (22)$$

Введемо позначення  $M(0, \mu, H) = M_0$ . Оскільки  $\partial_\mu \nu(\mu \pm \beta H)$  при  $\mu \pm \beta H = E_c$  має розрив, на одному з країв якого  $\partial_\mu \nu \rightarrow \infty$ , то друга похідна від магнітного моменту при  $\mu \pm \beta H = E_c$  має сингулярність, отримуємо

$$\partial_\mu^2 M_0 = \begin{cases} \frac{\alpha\beta}{4(E_c - \mu - \beta H)^{1/2}} - \frac{\alpha\beta}{4(E_c - \mu + \beta H)^{1/2}} + O((E_c - \mu \pm \beta H)^{1/2}), & \mu < E_c - \beta H, \\ -\frac{\alpha\beta}{4(E_c - \mu + \beta H)^{1/2}} + O((E_c - \mu \pm \beta H)^{1/2}), & E_c + \beta H > \mu > E_c - \beta H, \\ 0, & \mu > E_c - \beta H. \end{cases}$$



## 6 Висновки

В даній роботі докладно розглянуто одновимірні та тривимірні сепарабельні потенціали Ламе. В одновимірному випадку побудовано графіки залежності  $E(k)$  для двозонного потенціалу Ламе, в тривимірному випадку побудовано поверхні Фермі в першій і другій зонах. Рисунки ілюструють перехід від граничного випадку вільних електронів до граничного випадку сильно зв'язаних електронів.

Отримані результати використані для того, щоб дослідити сингулярності електронної складової термодинамічних величин у металах. В рамках даного підходу, отримані явні аналітичні вирази для густини електронних станів і її першої похідної. Також розглянуто термодинамічний потенціал і магнітний момент металу в зовнішньому магнітному полі і виділено сингулярну частину. В усі отримані вирази входять тільки параметри потенціалу. Фіксуючи потенціал, можна розрахувати всі коефіцієнти в явному вигляді.

На завершення треба сказати декілька слів з приводу узагальнення скінченно-зонних потенціалів на інші кристалічні симетрії. В роботі [5] автори зробили це для ГЦУ ґратки, використовуючи теорію збурень. Отримані результати були проілюстровані на прикладі розрахунку поверхні Фермі Ве. Також суттєвий інтерес з точки зору використання у фізиці твердого тіла мають еліптичні потенціали Калоджеро-Мозера. Ці потенціали багатовимірні.

Також треба зауважити, що замість електронів у даному підході можна розглядати довільні квазічастинки.

## Список використаних джерел

1. Бар'яхтар В.Г., Белоколов Е. Д., Коростиль А. М. Метод сепарабельного конечно-зонного потенциала – новый метод расчета электронной энергетической структуры твердых тел // *Металлофизика*. – 1992. – 14, № 8. – С. 3-11.
2. Бар'яхтар В.Г., Белоколов Е. Д., Коростиль А. М. Аналитический метод расчета поверхностей Ферми ВТСР // *Металлофизика*. – 1993. – 15, № 1. – С. 3-11.
3. Бар'яхтар В.Г., Белоколов Е. Д., Сигар Г. В., Дмитриев О. В. До теорії руху електрона в кристалі // *Наук. Вісті НТУУ КПІ*. – 2006. – № 4. – С. 7-13

4. Белоколов Е. Д. Задача Пайерлса-Фрелиха и конечнозонные потенциалы. I // *ТМФ*. – 1980. – 45, № 2. – С. 268-275
5. Белоколов Е. Д., Дмитриев О. В. Применение метода конечнозонных потенциалов для расчетов электронного спектра металлов с ГПУ решеткой // *Доклады академии наук Украины*. – 2004. – № 2. – С. 72-77.
6. Белоколов Е. Д., Першко И. М. Дифракция рентгеновских лучей на однозонном проводнике // *Укр. физ. журн.* – 1987. – 32, № 9. – С. 1373-1376
7. Белоколов Е. Д., Першко И. М. Константа электрон-фононного взаимодействия в однозонном проводнике // *ТМФ* – 1987. – 71, № 2. – С. 313-317
8. Бейтмен Г., Эрдёши А. Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции, функции Ламе и Матье. – М.: Наука, 1967. – 230 с.
9. Захаров В. Е., Митяков С. В., Новиков С. П., Питаевский А. П. Теория солитонов. Метод обратной задачи. – М.: Наука, 1980. – 320 с.
10. Лифшиц И. М. Об аномалиях электронных характеристик металла в области больших давлений // *ЖЭТФ*. – 1960. – 38, № 5. – С. 1569-1576
11. Марченко В.А., В.И. Островский. Характеризация спектра оператора Хилла. // *Матем. Сборник*. 1975. – 97, №4, С. 540-606.
12. Уиттекер Э.Т. Ватсон Д. Н. Курс современного анализа, ч.2. – М.: Физматгиз, 1967. – 516 с.
13. Belokolos E. D., Eilbeck J. C., Enolskii V. Z., Salerno M. Exact energy bands and Fermi surfaces of separable Abelian potentials // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 2001. – 34. – P. 943-959.
14. Belokolos, E. D., Bobenko A. I., Enolskii V. Z., Its A. R., Matveev V. B. *Algebro Geometrical Approach to Nonlinear Integrable Equations*. Berlin: Springer, 1994. 337 p.
15. Markiewicz R. S. A survey of the Van Hove scenario for high-T superconductivity with special emphasis on pseudogaps and striped phases // *arXiv: cond-mat/9611238*. – 1996
16. Takemura K. On eigenvalues of the Lamé operator // *arXiv: math.CA/0409247*. – 2004
17. Van Hove L. The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal // *Phys. Rev.* – 1952. – 89, № 6. – P. 1189-1193

Надійшла до редколегії 26.03.07



УДК 533.9

Вакуленко А.В., аспірант, Кравченко О.Ю.,  
кандидат фіз.-мат. наук, доцент, Левада Г.І.,  
інженер, Лиситченко Т.Є., завідувач лабораторії,  
Яструб Ю.А., студент

### Просторово-періодичні дисипативні структури в радіочастотних розрядах з пиловими частинками

За допомогою комп'ютерного моделювання методом PIC/MCC досліджується вплив пилових частинок на просторові розподіли параметрів плазми в радіочастотному розряді. Результати моделювання показали, що при наявності великих пилових частинок в міжелектродному проміжку збуджуються осциляції електронної та іонної концентрацій. Причиною їх утворення є велике електричне поле в об'ємі плазми, яке прискорює електрони. В результаті цього в деяких точках простору зростає швидкість іонізації і формуються просторово-періодичні структури. Це явище досліджувалось при різних тисках газу та відстанях між електродами.

Ключові слова: запорошена плазма,  
радіочастотний розряд, комп'ютерне  
моделювання.

\*E-mail: kay@univ.kiev.ua

Інтенсивне дослідження радіочастотних (РЧ) розрядів пов'язане з їх широким використанням в плазових технологіях, зокрема, в напівпровідниковій індустрії, де РЧ розряди використовуються як джерело хімічно активних частинок для плазового травлення чи напорошення. В ряді експериментів [1,2] у розрядній камері спостерігалось утворення пилових частинок, розміри яких змінювались від кількох нанометрів до десятків мікрон, а концентрація сягала значення  $10^{14} \text{ м}^{-3}$ . Було показано, що пилові частинки можуть суттєво впливати на функцію розподілу електронів та інтенсивність іонізації в розряді [3], на структуру приелектродних шарів та потоки іонів на електроди. Залежно від умов експерименту пилові частинки можуть займати майже весь об'єм розрядної камери, або захвачуватись у певних її областях, утворюючи згустки з різкими границями. Цікавими також є явища самозбудження коливань пилових частинок та виникнення неоднорідних розподілів пилових частинок в об'ємі пилового згустку, які спостерігались в умовах мікрогравітації [5].

A. V. Vakulenko, post-graduate, O. Yu.  
Kravchenko, candidate of science, G.I. Levada,  
engineer, T.E. Lisitchenko, head of laboratory,  
Yu.A. Yastrub, student

### Spatially periodic dissipative structures in radiofrequency discharges with dust particles

The influence of dust particles on the spatial distributions of plasma parameters in radiofrequency discharge is investigated using PIC/MCC computer simulation method. The simulation results show that electron and ion density oscillations are excited in the presence of large particles in the interelectrode space. The cause of their appearance is the existence of large electric field in the plasma bulk which accelerates electrons. It results that the ionization rate is increased at some space locations and spatially periodic structures in plasma are formed. This effect is investigated at different gas pressure and interelectrode distances.

Key Words: dusty plasma, radiofrequency  
discharge, computer simulation.

Комп'ютерне моделювання радіочастотних розрядів низького тиску ( $p \leq 0,1 \text{ тор}$ ) з пиловими частинками при відстані між електродами  $d = 0.027 \text{ м}$  проводилось раніше в [5,6]. Одним з результатів цих робіт є висновок про неоднорідність заряду пилових частинок у міжелектродному проміжку. Просторові розподіли концентрацій електронів та іонів якісно не відрізнялись від відповідних розподілів у розряді без пилових частинок – їх значення зменшувались від центру до електродів. Метою даної роботи є вивчення впливу величини міжелектродного проміжку та тиску газу на характеристики радіочастотного розряду з пиловими частинками.

### Модель

В роботі проводиться комп'ютерне моделювання РЧ розряду в аргоні між двома плоскими електродами, які знаходяться на відстані  $d$  один від одного. Радіочастотний розряд підтримується зовнішньою напругою



$V = V_0 \sin(\omega t)$ , де амплітуда  $V_0 = 150 \text{ В}$ , а частота  $\omega = 10 \text{ МГц}$ . Електрод при  $x = d$  заземлений. Нерухомі сферичні пилові частинки з радіусом  $r_d$  були розподілені однорідно в міжелектродному проміжку з концентрацією  $n_d$ .

Моделювання виконувалось за допомогою PIC/MCC методу, описаного в [7]. Зазначимо, що в рамках цього методу описуються елементарні процеси взаємодії електронів та іонів з нейтральними атомами та пиловими частинками. Це пружні зіткнення електронів та іонів із атомами, іонізація та збудження атомів електронами, обмін зарядом між електронами та атомами, кулонівські зіткнення електронів та іонів з зарядженими пиловими частинками, а також осідання електронів та іонів на пилинках. Розрахунки проводились для різних значень тиску газу, відстані між електродами, радіусу та концентрації пилових частинок.

## Результати

Просторові розподіли середньої за період

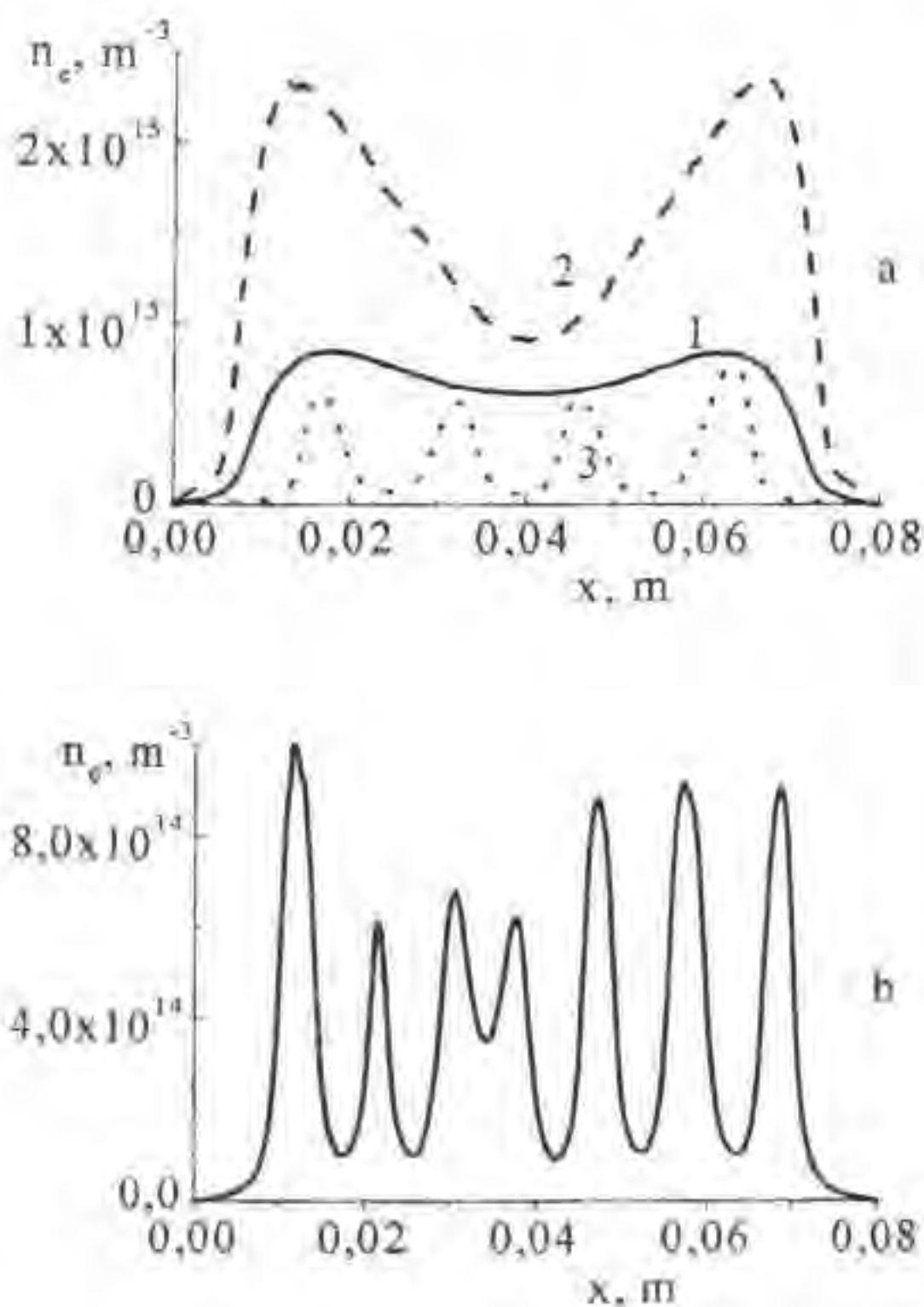


Рис. 1. Просторові розподіли середньої за період концентрації електронів (а -  $p = 0.1 \text{ тор}$ , 1 -  $n_d = 0$ ; 2 -  $n_d = 10^{15} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 50 \text{ нм}$ ; 3 -  $n_d = 10^{10} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 10 \text{ мкм}$ ; б -  $p = 0.3 \text{ тор}$ ,  $n_d = 10^{10} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 10 \text{ мкм}$ ).

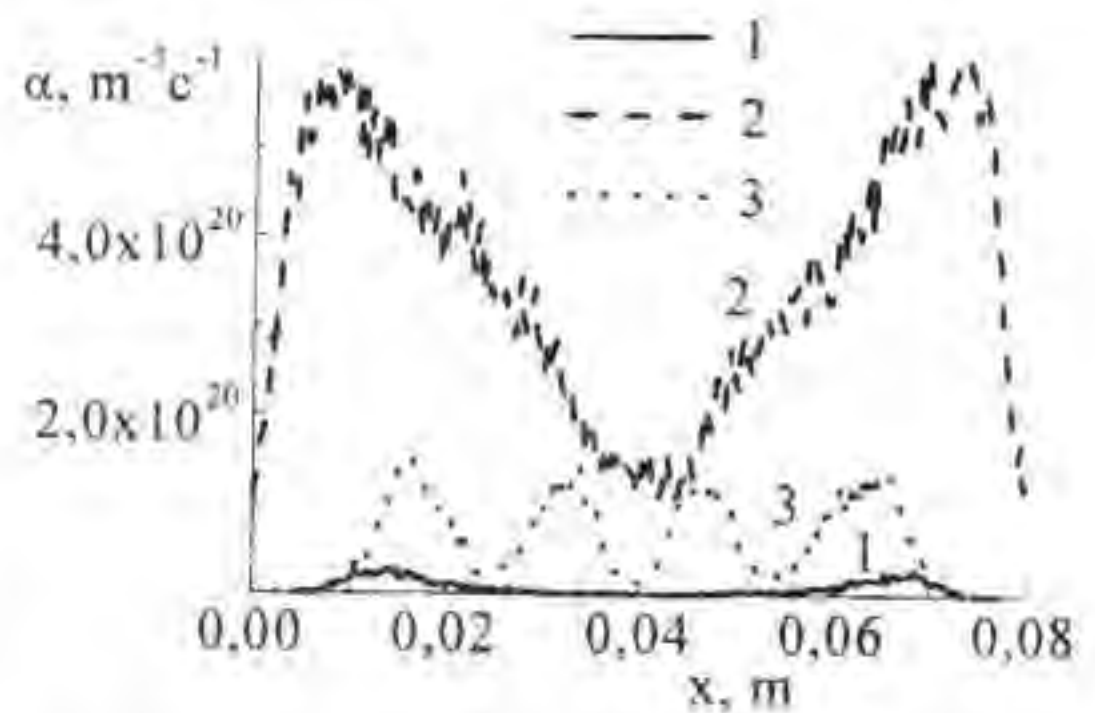
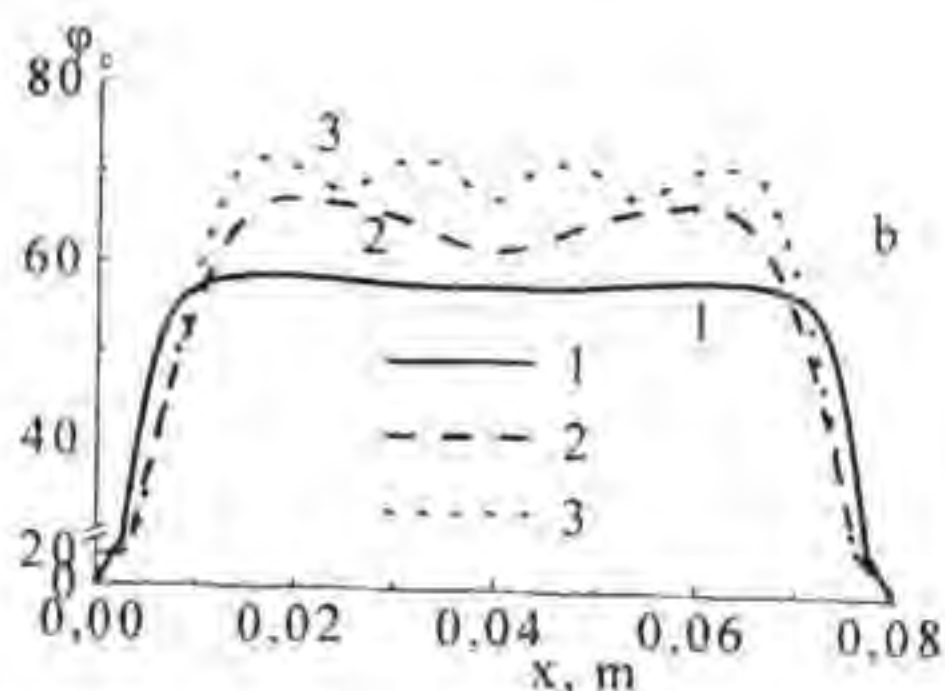
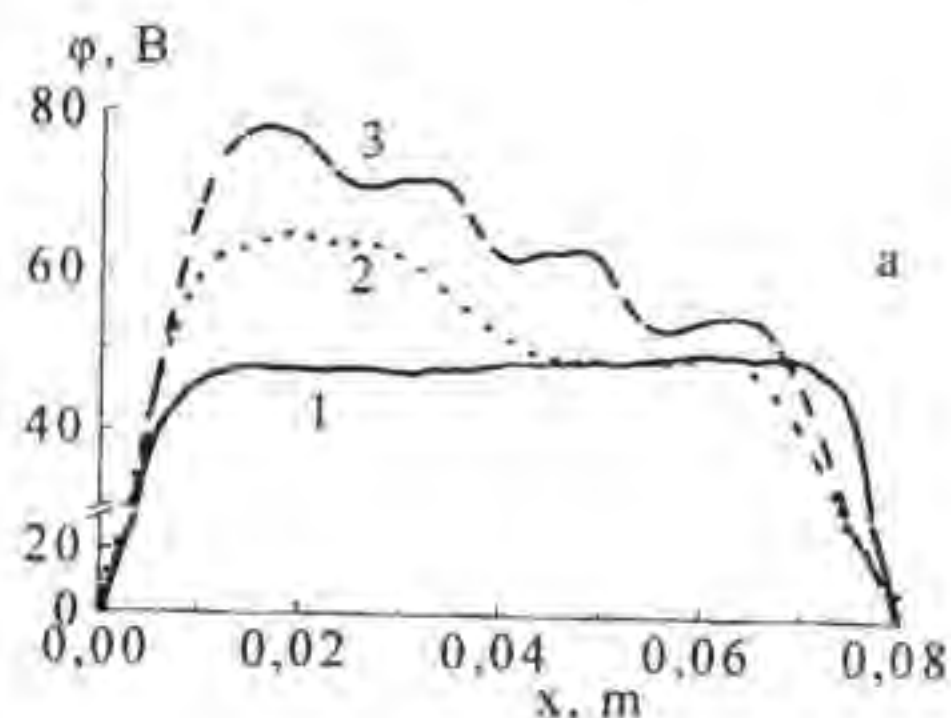


Рис. 2. Просторові розподіли швидкості іонізації (крива 1 -  $n_d = 0$ ; 2 -  $n_d = 10^{13} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 50 \text{ нм}$ , 3 -  $n_d = 4 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 6 \text{ мкм}$ ;  $p = 0.1 \text{ тор}$ ).

розряду концентрації електронів для випадків, коли відстань між електродами  $d = 0.08 \text{ м}$ , тиск газу  $p = 0.1 \text{ тор}$  та  $p = 0.3 \text{ тор}$  представлені на рис.1. Криві 1-3 відповідають режимам розрахунку, що відрізняються значеннями концентрації пилових частинок  $n_d$  і радіусу  $r_d$ . Відповідні цим режимам профілі інтенсивності іонізації зображені на рис.2. Видно, що присутність у розряді пилинок малого розміру, але великої концентрації (крива 2 на рис.1а), призводить до значного збільшення концентрації електронів. Причому, як і у випадку без пилу, утворюються максимуми концентрації електронів на границях приелектродних шарів. У випадку великих порошинок (крива 3) спостерігається утворення шаруватої структури розряду - в розподілі концентрації електронів з'являються осциляції. При збільшенні тиску (рис.1б) кількість максимумів електронної концентрації в міжелектродному проміжку збільшується. Зазначимо, що величина концентрації електронів визначається балансом процесів народження та втрат електронів. В нашому розряді електрони з'являються внаслідок іонізації нейтральних атомів електронним ударом, а зникають внаслідок осідання на стінки, та, при наявності пилу, на пилові частинки. Очевидно, що зростання концентрації електронів при появі в розряді пилових частинок зумовлене значним підвищенням іонізації. Як видно з рис.2, пилові частинки призводять до збільшення іонізації у всіх наведених варіантах розрахунків. Проте, пилові частинки великого розміру призводять до якісно іншого розподілу за простором інтенсивності іонізації, а саме, спостерігається утворення ряду максимумів іонізації в проміжку між електродами. Для





екрануванні. Однак, на відміну від електронів, вони є нерухомими і призводять до збільшення ширини області приелектродного шару. Слід відзначити також, що при збільшенні розміру пилових частинок перепад потенціалу між границями приелектродних шарів збільшується. Крім того, в розподілі миттєвого потенціалу (крива 3 на рис.3а) спостерігається утворення подвійних шарів, які обумовлюють неоднорідність просторового розподілу енергії електронів. Це пояснює утворення максимумів іонізації, просторові положення яких відповідають положенням границь подвійних шарів. Відзначимо також, що подвійні шари в міжелектродному проміжку є нестационарними потенціальними структурами, які змінюються

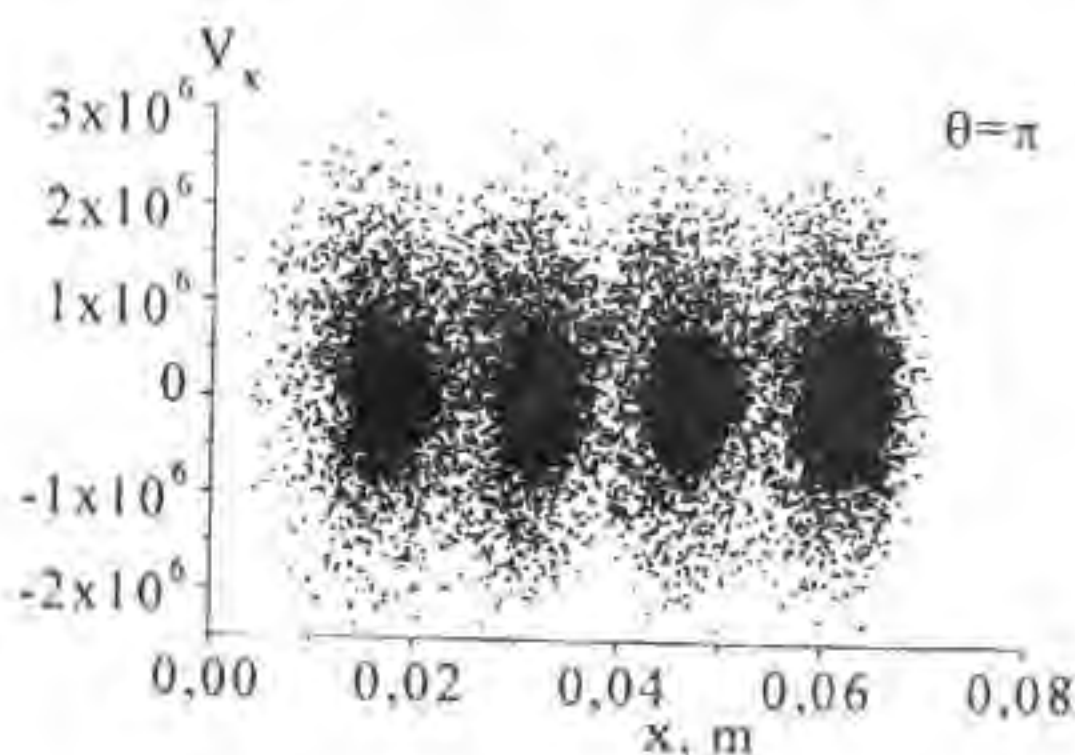


Рис. 4 Фазовий портрет електронів при значенні фази  $\theta = \pi$  ( $n_d = 4 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 6 \text{ мкм}$ ).

протягом періоду розряду. Найбільші перепади потенціалу на них виникають в ті моменти часу, коли ширина приелектродного шару біля одного з електродів максимальна.

Аналіз усереднених за період РЧ розряду розподілів потенціалу (рис.3 б) показує, що пилові частинки призводять до утворення потенціальних ям для електронів, положення яких відповідає максимумам концентрації електронів (рис.1). Електрони з малою енергією виявляються захопленими в ці ями. Електрони, у яких достатньо енергії, щоб подолати потенціальні бар'єри, вільно переміщуються між електродами. Сказане підтверджує рис.4, де зображений фазовий портрет електронної компоненти в момент часу, що відповідає фазі розрядного періоду  $\theta = \pi$ . З рисунку також видно, що внаслідок взаємодії електронів з подвійними шарами, на границях цих згустків утворюються високоенергетичні потоки електронів.

Рис. 3 Просторові розподіли потенціалу самоузгодженого електричного поля:  
а - при  $\theta = 0$ ;  
б - усереднені за період розряду.  
Крива 1 відповідає варіанту без пилових частинок; 2 -  $n_d = 10^{13} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 50 \text{ нм}$ ,  
3 -  $n_d = 4 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 6 \text{ мкм}$ .

пояснення таких розподілів параметрів плазми розглянемо просторові розподіли потенціалу самоузгодженого електричного поля (рис.3). На рис.3а зображені миттєві розподіли потенціалу, що відповідають фазі напруги на розряді  $\theta = 0$ , а на рис.3б - розподіли, усереднені за періодом розряду. Видно, що за відсутності пилових частинок електричне поле в центральній області розряду близьке до нуля, внаслідок чого енергія електронів тут практично незмінна. За наявності пилових частинок протягом певної частини періоду розряду виникає значний перепад потенціалу в центральній області розрядної камери. Електричне поле прискорює електрони, внаслідок чого збільшується інтенсивність іонізації. Цей ефект є наслідком неповного екранування електродів приелектродним шаром. Пилові частинки заряджаються в розряді негативно і також беруть участь у цьому



На рис.5 наведені середні за період розряду кінетичні енергії електронів для тиску  $p=0.1 \text{ тор}$ ,  $d=0.08 \text{ м}$ . Видно, що пилові частинки в розряді призводять до значного зростання кінетичної енергії електронів, що

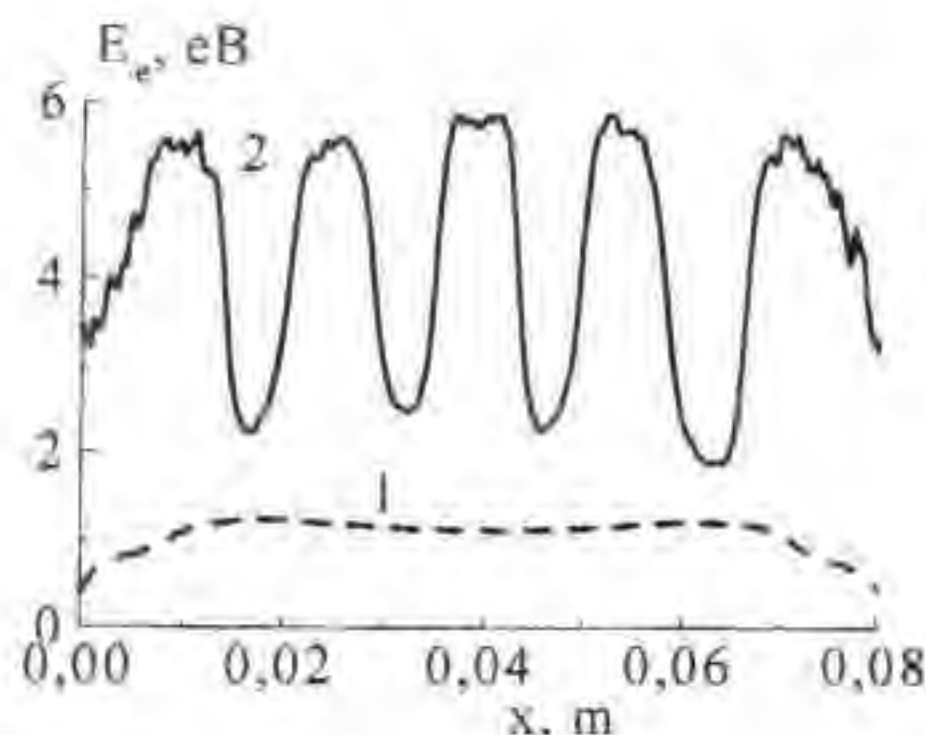


Рис. 5 Просторові розподіли середньої за період розряду енергії електронів для випадку без пилових частинок (крива 1) та випадку з пиловими частинками при  $n_d = 10^{10} \text{ м}^{-3}$ ,  $r_d = 10 \text{ мкм}$  (крива 2).

підтверджує зроблені раніше висновки. Характерним є те, що енергія електронів у розряді з великими пиловими частинками є сильно неоднорідною в просторі. Мінімуми цієї енергії відповідають максимумам інтенсивності іонізації (рис.2). Пояснити цей факт можна тим, що іонізація є сильно неоднорідною протягом періоду розряду. Електронні потоки з достатньою для іонізації енергією виникають лише протягом невеликого проміжку часу. Іонізуючи газ, вони втрачають свою енергію, внаслідок чого середня енергія електронів у цій області мінімальна.

## Висновки

Встановлено, що пилові частинки в радіочастотному розряді призводять до збільшення інтенсивності іонізації, а в деяких випадках і до збільшення концентрації електронів та іонів у розряді. Це явище є наслідком появи електричного поля в квазінейтральній плазмі, яке призводить до значного підвищення енергії електронів.

Показано, що пилові частинки великого розміру ( $r_d > 5 \text{ мкм}$ ) можуть призводити до утворення просторово-періодичних структур в розряді, а саме, виникнення згустків електронів та подвійних шарів у розрядному проміжку. Кількість таких згустків зростає при збільшенні тиску газу та відстані між електродами.

## Список використаних джерел

1. Fukuzawa T., Kushima S., Matsuoka Y., Shiratani M., Watanabe Y. Growth of particles in cluster-size range in low pressure and low power  $\text{SiH}_4$  rf discharges // Journal of applied physics. – 1999. – 86, № 7. – P.3543 - 3549.
2. Boufendi L., Bouchoule A. Particle nucleation and growth in a low-pressure argon-silane discharge // Plasma Sources Sci. Technol. – 1994. – 3 – P.262-267.
3. Tachibana K., Hayashi Y., Okuno T., Tatsuta T. Spectroscopic and probe measurements of structures in a parallel-plates RF discharges with particles // Plasma Sources Sci. Technol. – 1994. – 3 – P.314-319.
4. Mikikian M., Boufendi L., Bouchoule A., H.M.Thomas, G.E.Morfill et. al. Formation and behaviour of dust particle clouds in a radiofrequency discharge: results in laboratory and under microgravity conditions //New Journal of Physics. -2003. – 5 –P.19.1-19.12.
5. Chutov Yu.I., Goedheer W.J. Dusty Radio Frequency Discharges in Argon // IEEE Trans. Plasma Phys.-2003. – 31, № 4. – P.606-613
6. Chutov Yu.I., Kravchenko O.Yu., Goedheer W., Smirnov R.D., Takamura S. Dusty sheaths in plasmas //J. Nucl. Materials. -2003. – P.313-316.
7. Чутов Ю.І., Кравченко О.Ю., Лиситченко Т.Є., Левада Г.І., Романенко Р.О., Юрчук М.М. Методика моделювання запылених радіочастотних розрядів в аргоні //Вісник Київського університету. Сер.:фіз.-мат. Науки. - 2005. – № 1. –С.299-310.

Надійшла до редколегії 19.03.07



## УДК 534.2

Гнатишин\* М.А., магістр, Смирнов\*\* Є.М.,  
канд. фіз.-мат. наук, Юрченко\*\*\* О.В., пров.  
інж.

Дослідження багатократного відбиття  
повільної зсувної хвилі від вільних  
поверхонь в парателуриті.

Шляхом чисельного експерименту  
проаналізовано розповсюдження повільної  
зсувної хвилі в площині  $(1\bar{1}0)$  монокристалу  
 $\text{TeO}_2$  та її відбиття від довільно орієнтованих  
поверхонь. Для перевірки проведених  
розрахунків здійснено фізичний експеримент,  
який підтвердив можливість застосування  
моделі плоских хвиль для аналізу  
розповсюдження ультразвукових пучків.

Ключові слова: парателурит, пружні  
хвилі, відбиття, акустооптика

\*E-mail: gnat@univ.kiev.ua

\*\*E-mail: esmirnov@univ.kiev.ua

\*\*\*E-mail: alyur@univ.kiev.ua

Особливості розповсюдження та відбиття  
пружних плоских хвиль у сильно анізотропному  
середовищі привертала увагу багатьох  
дослідників, починаючи з середини минулого  
століття. Основні результати цих досліджень  
стосовно кристалів були систематизовані в  
монографії [1], а прикладні задачі детально  
розглянуті в [2]. Незважаючи на це, інтерес до  
цих задач у випадку парателуриту ( $\text{TeO}_2$ ) виникає  
знову і знову в зв'язку з широким застосуванням  
цього кристалу в акустооптичних приладах та  
дуже незвичною поведінкою пружних хвиль у  
ньому [1, 2, 3]. Зокрема, автори [5, 6]  
розглядають випадок майже зворотного відбиття  
в площині  $(001)$  зсувної хвилі при її ковзному  
падінні на вільну поверхню кристалу.

Метою даної роботи є дослідження  
багаторазового відбиття повільної зсувної хвилі в  
площині  $(1\bar{1}0)$  парателуриту у випадку  
обмеженого кристала з геометрією, характерною  
для акусто-оптичних дефлекторів.

Розповсюдження плоскої акустичної хвилі в  
анізотропному середовищі описується рівнянням  
Крістоффеля [2]

$$\Gamma_{ij}u_j = \rho V^2 u_i, \quad (1)$$

M.A. Gnatyshyn\*, M.S. student, E.M. Smirnov\*\*,  
PhD, A.V. Yurchenko\*\*\*, SE.

Investigation of shear slow wave multiple  
reflection off free surfaces in paratellurite.

Shear slow wave propagation in the  
 $(1\bar{1}0)$  plane of  $\text{TeO}_2$  single crystal and its  
reflection off arbitrary oriented surfaces is  
simulated. Experimental verification is performed,  
which confirms validity of the plane wave model  
being applied to ultrasonic beam propagation  
analysis.

Key words: paratellurite, elastic waves,  
reflection, acoustooptics.

де  $\Gamma_{ij}$  - компоненти тензора Крістоффеля, які  
визначаються як  $\Gamma_{ij} = c_{ijkl}n_jn_k$ ;  $c_{ijkl}$  - компоненти  
тензора пружності,  $u_i$  - компоненти вектора  
зміщення (поляризації) пружної хвилі  $\vec{u}$ ,  $\rho$  -  
густина середовища,  $V$  - фазова швидкість хвилі,  
 $n_j$ ,  $n_k$  - компоненти вектора  $\vec{n}$  одиничної  
нормалі хвильового фронту; індекси  $i, j, k, l$   
набувають значень від 1 до 3.

В загальному випадку у даному напрямку  $\vec{n}$   
можливе розповсюдження трьох плоских хвиль з  
ортогональними поляризаціями та різними  
швидкостями  $V$ , які визначаються з рішення  
рівняння [2]

$$|\Gamma_{ij} - \rho V^2 \delta_{ij}| = 0, \quad (2)$$

де  $\delta_{ij}$  - символ Кронекера. Секкулярне рівняння  
(2) виражає умову сумісності трьох рівнянь (1).  
Підставивши значення фазової швидкості  $V$  в (1),  
можна отримати напрямки зміщення, що  
відповідає цій швидкості, тобто визначити тип  
хвилі. Пророблені вищезгадані операції для  
площини  $(1\bar{1}0)$   $\text{TeO}_2$  показують, що в цьому  
випадку може розповсюджуватись три типи  
хвиль, вектори зміщень двох з них  
(квазіпоздовжної та квазіпоперечної) лежать в



площині  $(1\bar{1}0)$ , а третьої – повільної зсувної (поперечної) – перпендикулярний до цієї площини (тобто спрямований вздовж  $[1\bar{1}0]$ ). Як правило, останній тип хвилі використовується в акустооптичних дефлекторах, і саме він розглядається в цій роботі. Рішення рівняння (2) дає для цієї хвилі наступну залежність фазової швидкості залежно від орієнтації хвильового вектора

$$V(\theta) = \frac{1}{\rho} \left[ c_{44} + \left( \frac{c_{11} - c_{12}}{2} - c_{44} \right) \sin^2 \theta \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3)$$

де  $\theta$  – полярний кут хвильового вектора, що лежить у площині  $(1\bar{1}0)$ . В цьому виразі здійснений стандартний перехід до матричних позначень компонент тензора пружності  $c_{ijkl} \Leftrightarrow c_{\lambda\mu}$ , при якому індекси  $\lambda, \mu$  пробігають значення від 1 до 6.

При падінні плоскої пружної хвилі на вільну плоску однорідну межу середовища граничні умови зводяться до рівності нулю механічних напруженостей  $T_i$  в кожній точці межі [2]:

$$T_i^I + \sum_R T_i^R = 0, \quad (4)$$

де індекси  $I, R$  відповідають падаючій та відбитим хвилям. Якщо задати площину розділу рівнянням  $(\vec{I}\vec{r}) = 0$ , де  $\vec{I}$  – нормаль до межі, та підставити в (4)  $\vec{I} = \vec{n} \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ , то отримаємо, що частоти всіх хвиль, що беруть участь у процесі, однакові, їх хвильові вектори лежать у площині падіння і мають однакові проєкції на межу розділу:

$$k^I \sin \theta^I = k^R \sin \theta^R, \quad (5)$$

де  $\theta^I, \theta^R$  – кути падіння та відбиття.

При цьому також з'являється умова, що пов'язує амплітуди падаючої та відбитих хвиль

$$c_{gkl} l_j \left[ u_k^I k_l^I + \sum_R u_k^R k_l^R \right] = 0, \quad (6)$$

де  $k_i$  – компоненти хвильового вектора  $\vec{k} = \frac{\omega \vec{r}}{V}$ .

Аналіз (6) показує, що при падінні повільної зсувної хвилі на вільну поверхню  $\text{TeO}_2$ , ортогональну площині падіння  $(1\bar{1}0)$ , інші типи хвиль не породжуються, тобто серед відбитих буде тільки повільна зсувна.

На рис. 1 пунктиром зображено поверхню хвильових векторів повільної зсувної хвилі при її розповсюдженні в площині  $(1\bar{1}0)$  та проілюстровано умову (5).

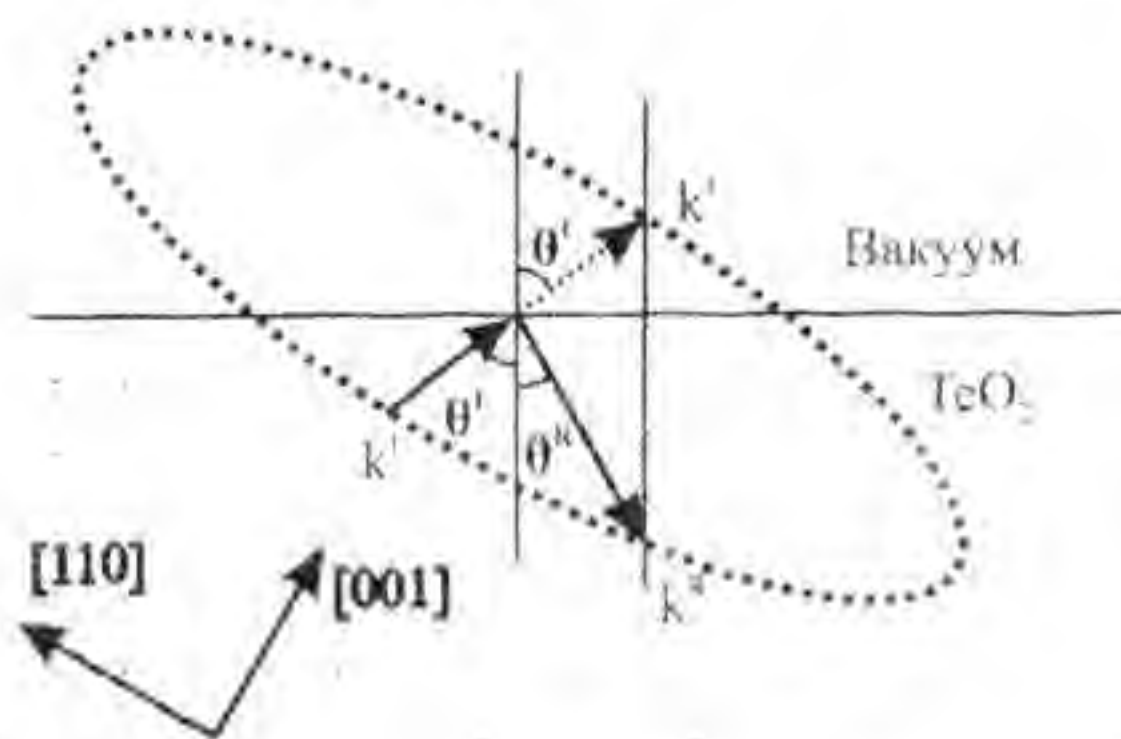


Рис. 1 Ілюстрація умови (5). Пунктиром зображена поверхня хвильових векторів повільної зсувної хвилі в площині  $(1\bar{1}0)$   $\text{TeO}_2$

Внаслідок сильної анізотропії групова швидкість, компоненти вектора якої визначається за формулою [2]

$$W_i = \frac{c_{gim} u_j u_m n_j}{\rho V}, \quad (7)$$

не співпадає за напрямком з фазовою (проте також лежить в площині  $(1\bar{1}0)$ ), і це відхилення може досягати значення  $57^\circ$ . Сильна анізотропія є причиною значного відхилення закону відбиття від звичайного дзеркального закону, що має місце в оптиці.

Використовуючи умову (5) та залежності (3), (7) і задаючи форму кристала, за допомогою середовища Microsoft Visual Studio 2005 розраховувалось розповсюдження повільної зсувної хвилі в моделі кристалу АОД на парателуриті. Розглядалися конфігурації близькі до тих, що використовуються в реальних приладах. Використані значення компонент тензора пружності ( $c_{11}=5.57$ ,  $c_{33}=10.58$ ,  $c_{44}=2.65$ ,  $c_{66}=6.59$ ,  $c_{12}=5.12$ ,  $c_{13}=2.18$ )  $\cdot 10^{10}$  н/м<sup>2</sup>, взяті з [4].

Розрахунок показав, що якщо зорієнтувати ділянку грані, від якої зазнає першого відбиття акустичний пучок, під кутом  $\sim 13^\circ$ , то можна спрямувати пружну енергію в такому напрямку, що вона протягом  $\sim 250$  нс відбиватиметься між вхідним та вихідним вікнами кристалу дефлектора. Тобто, кристал буде поводити себе як акустична пастка.



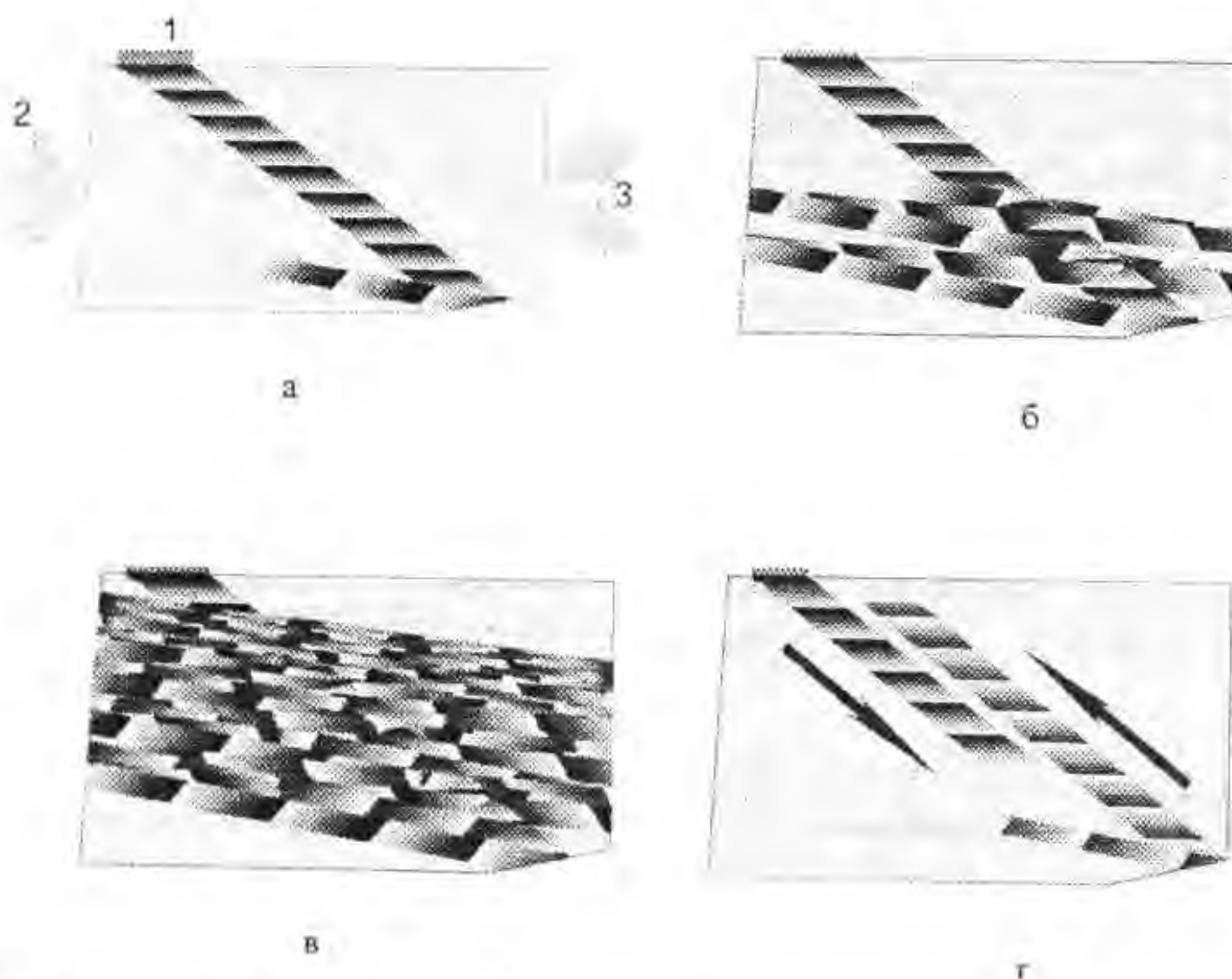


Рис. 2 Розрахунковий хід акустичного променя в кристалі  $\text{TeO}_2$  за різні проміжки часу. Градієнт зміни кольору вказує напрямок хвильової нормалі звукового пучка. а – 0-20 мкс, б – 0-55 мкс, в – 0-235 мкс, г – на проміжках 0-10 мкс та 232-249 мкс. Цифрами на рисунку а позначено: 1 – п'єзоперетворювач, 2 – падаюче світло, 3 – нульовий та перший дифракційні максимуми

На рис. 2 зображено розрахунковий хід променя для кристалу саме з такою орієнтацією скошу в різні моменти часу (градієнт зміни кольору вказує напрямок хвильового фронту). Згідно з розрахунком, акустичний пучок повертається (опиняється) в тому ж напрямку через 250 мкс після збудження. За рахунок поглинання амплітуда звукової хвилі за цей час зменшиться, і, відповідно, зменшиться небажаний вплив відбитої хвилі на роботу приладу.

На підставі розрахунку був виготовлений зразок акустооптичного дефлектора із зміненою орієнтацією відбиваючої грані, що був використаний в експерименті. Схема експериментальної установки показана на рис. 3.

На входне вікно дефлектора падає лазерний промінь, діаметр якого значно менший за розміри входного вікна. Дифраговане світло потрапляє на фотопомножувач. Геометрія дефлектора передбачає анізотропну взаємодію, при якій падаюча та дифрагована хвилі мають ортогональні поляризації. Щоб зменшити вклад

світла, дифузійно розсіяного від основного лазерного променя в вимірювану інтенсивність, на шляху дифрагованого світла ставиться поляризатор, орієнтований для максимального пропускання саме дифрагованого світла. Так як діаметр лазерного пучка малий порівняно з розмірами вікна дефлектора, то його можна

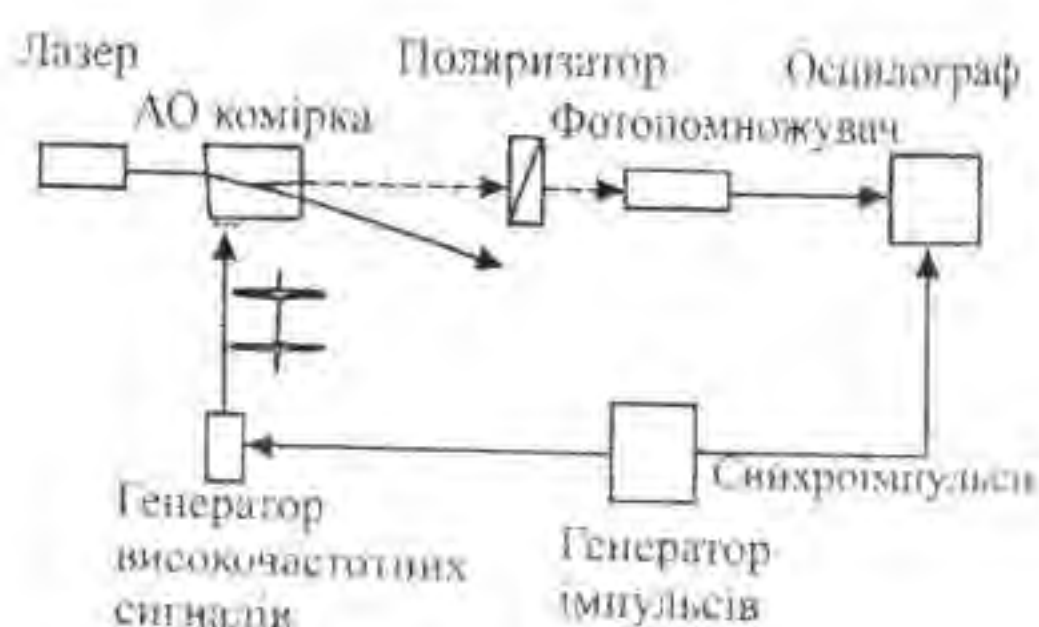


Рис. 3. Схема установки для дослідження розповсюдження акустичних імпульсів в кристалі АОД на  $\text{TeO}_2$



використовувати як зонд, спостерігаючи дифракцію при падінні світла в різних точках вхідного вікна.

На вхід акустооптичного дефектора (АОД) подається короткий радіоімпульс ( $\tau=2$  мкс) з частотою заповнення 60 МГц. Період повторення модулюючих відеоімпульсів ( $T=1$  мсек) такий, що одночасно в кристалі існує лише один імпульс пружних хвиль (за період акустичний імпульс встигає затухнути до незначних амплітуд). Тривалість імпульсу підібрана таким чином, щоб довжина відповідного акустичного імпульсу була значно менша за характерні розміри кристалу. Таким чином, у такому експерименті дифраговане світло служить індикатором проходження акустичної хвилі певного типу в певній області кристала. А так як акустичний імпульс досить короткий, то крім цього можна отримати інформацію про часи проходження хвилею певних областей кристалу. Випромінювання гелій-неонового лазера ( $\lambda=0.63$  мкм) потрапляє на АОД, який орієнтовано для виконання умов Брега. Дифракційний максимум спрямовується на фотопомножувач. Сигнал з фотопомножувача подається на вхід осцилографа Tektronix TDS-2022, який дозволяє достатньо точно вимірювати часи появи імпульсів.

На рис. 4 наведено зображення осцилограми, що отримане за допомогою описаної установки. Перший пік (зліва) відповідає акустооптичній взаємодії основного робочого акустичного пучка з випромінюванням лазера. Наступний імпульс з приблизно такою ж орієнтацією хвильової нормалі, як в основного імпульсу, перетинає лазерний пучок через 259 мкс. Потім акустичний промінь відбивається від стінки кристала, на який встановлено п'єзоперетворювач, майже з такою

ж орієнтацією хвильового вектора, і знову взаємодіє з лазерним випромінюванням – третій пік на осцилограмі (265 мкс після першого). При чому другий і третій піки на 18-20 дБ менші за перший.

Виміряні часи затримки є досить близькими до теоретично розрахованих, що вказує на правильність розрахункової моделі. Отримані розбіжності можна пояснити неточністю вимірювання параметрів монокристала та похибкою розрахунку.

Таким чином, у результаті дослідження розповсюдження та відбиття ультразвукового пучка в обмеженому кристалі  $\text{TeO}_2$  на основі моделі плоских хвиль, вдалось знайти конфігурацію кристала, що забезпечує послаблення впливу відбитої хвилі на роботу АОД без застосування поглинача. Експериментальні дослідження підтвердили правильність теоретичного наближення. Цей факт робить запропонований підхід застосовним для подальшого пошуку нових конфігурацій кристалів для АОД.

#### Список використаних джерел

1. Феооров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах – М.: Наука, 1965. – 388 с.
2. Дьелесан Э., Рушье Д. Упругие волны в твердых телах – М.: Наука, 1982.
3. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П., Основы кристаллофизики. – М.: Наука, 1975. – 680 с.
4. Акустические кристаллы. Справочник. Под ред. М.П. Шаскольской. М.: Наука, 1982. – С. 632.
5. V. B. Voloshinov, O. Yu. Makarov, and N. V. Polikarpova. //Pis'ma Zh. Tekh. Fiz. **31** (8), 79 (2005) [Tech. Phys. Lett. **31**, 352 (2005)].
6. V.B. Voloshinov, N.V. Polikarpova and V.G. Mozhaev. Nearly Backward Reflection of Bulk Acoustic Waves at Grazing Incidence in a  $\text{TeO}_2$  Crystal //Acoustical Physics, 2006, Vol.52, No.3, pp 245-251

Надійшла до редколегії 28.02.2007

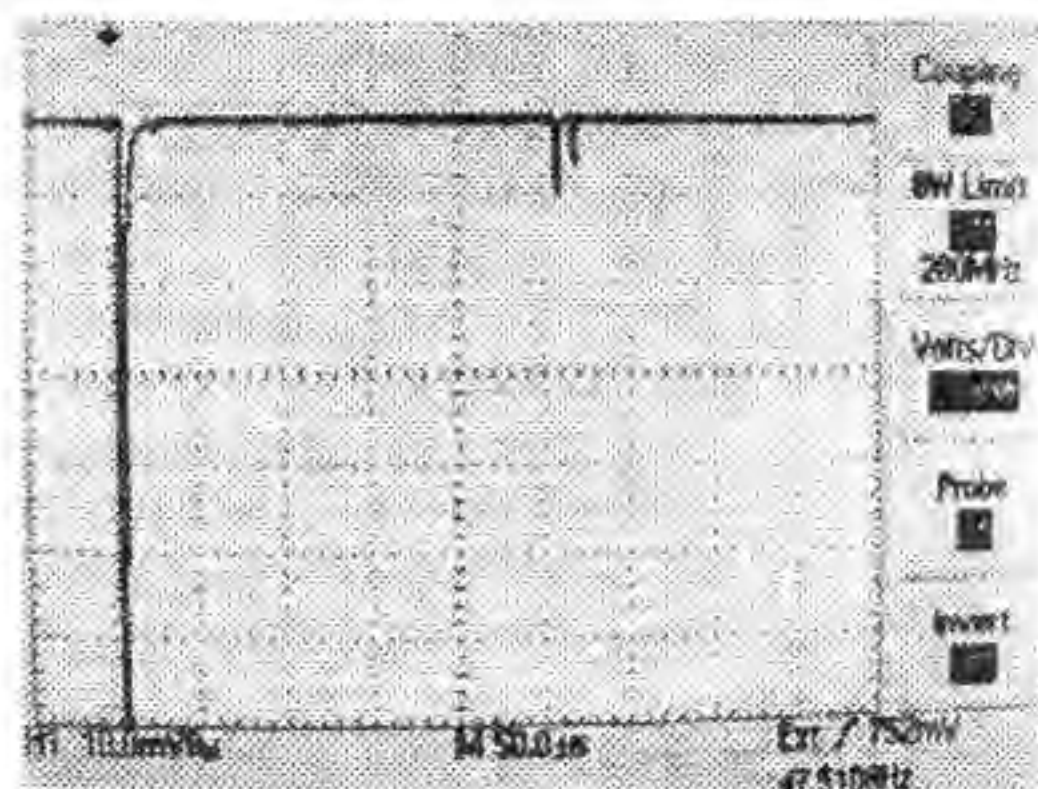


Рис. 4 Осцилограма вимірювання часів поширення звукового імпульсу в кристалі АОД



УДК 535.5:621.029.7

Гожик І.А., студ., Григорук В.І., др. ф.-м. н.,  
проф., Огенко В.М., чл.-кор. НАНУ, др. хім. н.,  
проф., Онисько Ю.Т., пр. інж., Слінченко\* Ю.А.,  
ас.

### Про застосування температурної залежності показника заломлення кремнійорганічного полімеру

В даній роботі показана можливість  
застосування ефекту залежності показника  
заломлення кремнійорганічного полімеру від  
температури для створення чутливого  
елемента волоконно-оптичного датчика  
температури.

Ключові слова: оптичне волокно, датчик  
температури, показник заломлення.

\*E-mail: yas@univ.kiev.ua

### Вступ

На основі класичних кварц-кварцових  
волоконних світловодів (ВС) розроблені датчики  
фізичних полів [2], які мають кращі  
експлуатаційно-технічні характеристики,  
порівняно з традиційними сенсорами. Разом з  
тим, створення нових типів світловодів –  
дірчастих [3], волоконних лазерів [4],  
спеціальних волокон (СВ) стимулювало  
подальший розвиток досліджень волоконно-  
оптичних датчиків.

Метою роботи є демонстрація можливості  
застосування кремнійорганічних полімерів [1]  
для створення чутливого елемента датчика  
температури.

### Теорія

Відомо [5], що у ВС існують напрямні (моди  
серцевини) та витічні моди (моди втрат).  
Утворені після збудження хвильоводні моди в  
процесі поширення (в результаті розсіювання на  
неоднорідностях серцевини) частину своєї енергії  
передають витічним модам.

Повна кількість мод серцевини  $M_c$   
двошарового ВС визначається як [5]:

$$M_c = \frac{V^2}{2} \quad (1)$$

Gozhyk I.A., stud., Grygoruk V.I., Doct. sci., Prof.,  
Ogenko V.M. Cor. Memb., Doct. sci., Prof.,  
Onys'ko Y.T., pr. eng., Slinchenko Y.A., as.

### An application of temperature dependence of the refractive index of a silicone polymer

In this work it is shown the possibility using of  
temperature dependence of the refractive index of a  
silicone polymer for design an sensitive element of  
a temperature fiber optic sensor

Key Words: optical fiber, temperature sensor,  
refractive index.

$V$ - параметр волокна:

$$V = \frac{2\pi a}{\lambda} (n_1^2 - n_2^2)^{1/2}, \quad (2)$$

де:  $\lambda$  - довжина хвилі випромінювання,  $a$  - радіус  
серцевини,  $n_1$  та  $n_2$  - показники заломлення  
серцевини і оболонки волокна відповідно. Повна  
кількість витічних мод  $M_v$  ВС визначається як:

$$M_v = \frac{V}{2} \left[ 1 - \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \left( \frac{n_1 - n_2}{n_1} \right)^2 \right] \quad (3)$$

Моди оболонки та просторові моди (витічні  
моди, моди втрат) відбирають частину  
потужності у мод серцевини (напрямних мод),  
що призводить до зменшення вихідної  
потужності. Очевидно, збільшення різниці  
показників заломлення оболонки і серцевини ВС  
змінює кількість мод: кількість напрямних мод  
збільшується, а витічних – зменшується.  
Відповідно перерозподіляється потужність  
випромінювання, що поширюється у ВС.  
Збільшення числа напрямних мод призводить до  
зростання потужності випромінювання на виході  
з ВС. Особливо значуще це буде відбуватися у  
неусталеному режимі.

Для створення волоконно-оптичних датчиків  
використовують, як правило, короткі відрізки  
звичайних або спеціальних ВС. При роботі з  
короткими відрізками багатомодових ВС (БВС)



ВС пов'язують їх, і моди стають взаємодіючими. Внаслідок цього відбувається перекачка потужності між ними [6]. Це призводить до встановлення усталеного потоку потужності (усталений режим) [5]: починаючи з певної довжини волокна виявляється домінуюча статистична мода мінімальних втрат, і розподіл середньої потужності у перерізі волокна набуває усталеного характеру. Тому при створенні волоконно-оптичних елементів необхідно враховувати особливості неусталеного режиму або вживати спеціальних заходів [7] для отримання усталеного режиму у коротких відрізках світловодів.

### Експериментальні результати та їх обговорення

Можливість виготовлення спеціальних кварц-полімерних волокон із заданим показником заломлення оптичної оболонки та його залежність від температури [1] можна використати для створення чутливого елемента волоконного датчика температури. На рис. 1 наведена температурна залежність показника заломлення кремнійорганічного полімеру, що був використаний для виготовлення оптичної оболонки чутливого елемента волоконного датчика температури.

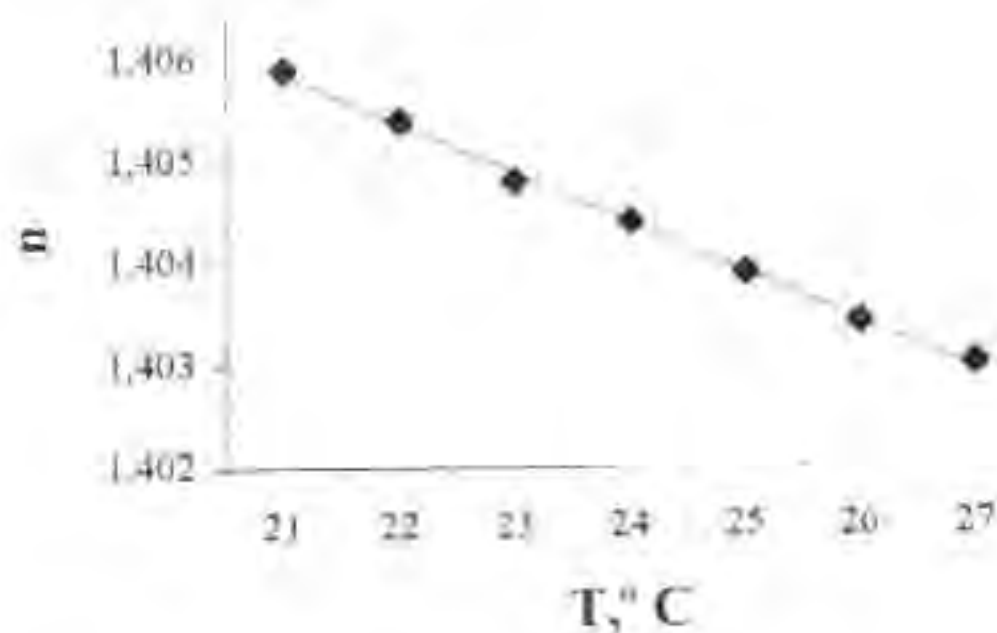


Рис. 1. Температурна залежність показника заломлення кремнійорганічного полімеру, використаного в даній роботі.

Збільшення температури призводить до зменшення густини речовини оптичної оболонки ВС. Це, в свою чергу, спричиняє збільшення різниці показників заломлення серцевини і оболонки, що викликає збільшення кількості напрямних мод серцевини волокна згідно з (1), а відповідно і вихідної потужності випромінювання з ВС.

Теоретичний розрахунок температурної залежності кількості мод серцевини ( $M_c$ ) ВС, як оптична оболонка якого використаний даний кремнійорганічний полімер, наведено на рис. 2.

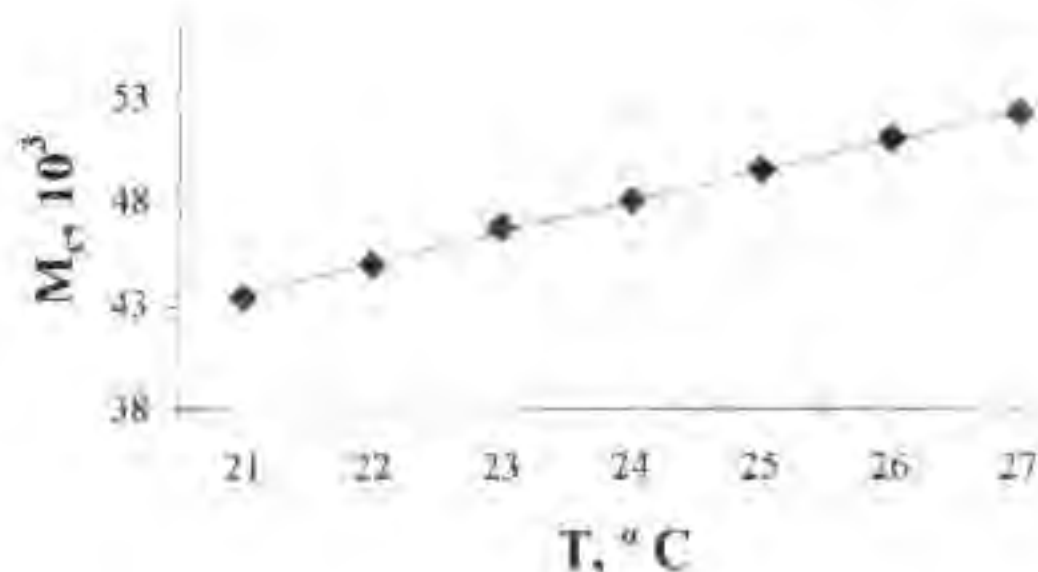


Рис. 2. Теоретичний розрахунок температурної залежності кількості мод серцевини ВС, як оболонка якого використаний даний кремнійорганічний полімер.

Виходячи з вищенаведеного, продемонстрована можливість створення датчика температури. Принципова схема пристрою наведена на рис. 3. 1 – джерело випромінювання (лазерний діод,  $\lambda = 0,85$  мкм), 2 та 9 – системи введення випромінювання у ВС та фотоприймальну систему відповідно.

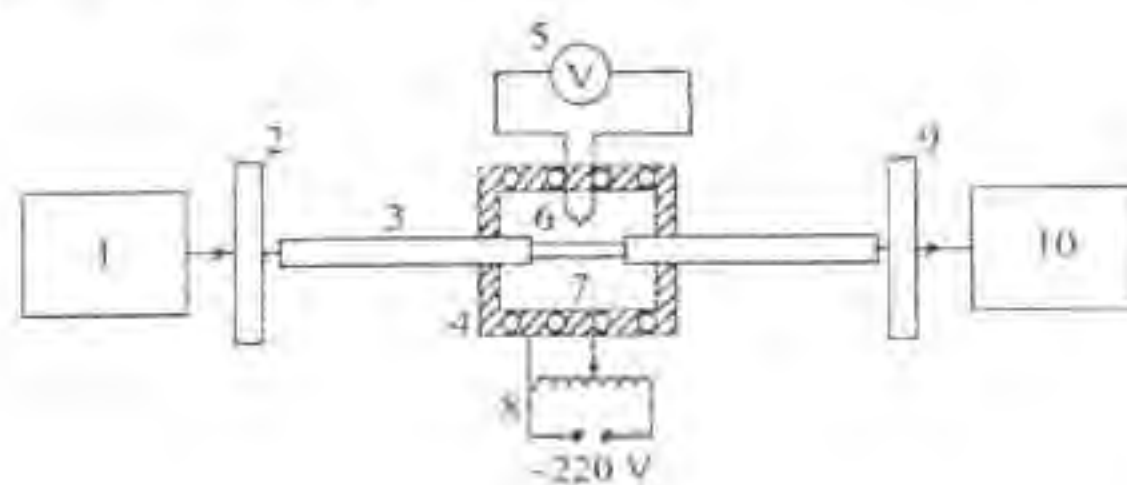


Рис. 3. Схема експериментальної установки

Для створення чутливого елемента датчика використано кварц-полімерне оптичне волокно 3 з діаметром серцевини 200 мкм довжиною 1 м. Посередині цього ВС, на відрізок 10 см, знято захисну і оптичну оболонку та нанесено кремнійорганічний полімер - суміш полімера з наповнювачем (5% - аеросил з питомою поверхнею 180 м<sup>2</sup>/г з прищепленими  $\text{Si}(\text{CH}_3)_2$  радикалами (гідрофобна поверхня), характерний середній розмір частинок 5 нм) – 7. Після полімеризації суміші отримано залежність потужності вихідного випромінювання від температури (рис. 4). Підтримання сталої температури досягалося системою



термостатування 4 та нагрівання 8, а її вимірювання – термopарою 6, яка під'єднана до вольтметра 5. Вимірювання вихідної потужності виконувалось фотоприймальною системою 10.

ділянки „оголеного” вихідного волокна. Суттєвою перевагою запропонованого датчика температури є простота виготовлення, низька інерційність ( $\sim 0,1$  с) та відсутність складних активних елементів у схемі.

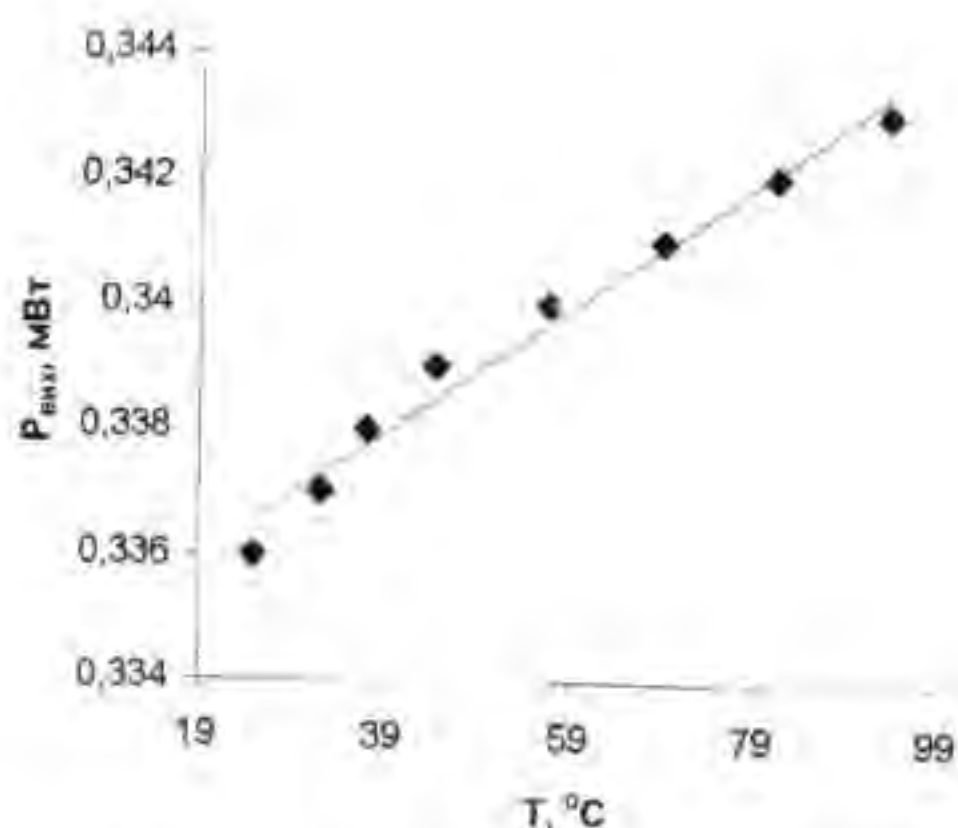


Рис. 4. Залежність вихідної потужності волоконного чутливого елемента від температури

Незначне відхилення отриманої залежності від лінійної пояснюється не досить жорстким кристалом ВС і похибкою вимірювання вихідної потужності випромінювання  $\approx 10$  %. Слід зазначити, що був перевірений температурний вплив на показник заломлення оптичної оболонки вихідного ВС. Зміна температури у тому ж діапазоні практично не впливала на вихідну потужність випромінювання. Конкретний діапазон температур, у якому були проведені дослідження характеристик датчика, визначався експериментальними можливостями. Врахування лінійності температурних залежностей показників заломлення кремнійорганічних полімерів у більш широкому діапазоні [1], дозволяє прогнозувати подібні результати і там.

Для підвищення чутливості волоконного датчика необхідно використовувати довші

## Висновки

Таким чином, продемонстрована можливість застосування температурної залежності показника заломлення кремнійорганічного полімеру для створення активного елемента волоконно-оптичного датчика температури.

## Література

1. Григорук В. І., Дмитрук А. М., Огенко В. М., Онисько Ю. Т., Сліченко Ю. А. // УФЖ, т. 50, № 10, с. 1185-1188, 2005.
2. Окоси Т. и др. Волоконно-оптические датчики / Пер. с япон. – Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отд-ние, 1990. – 256 с.
3. Желтиков А. М. // УФН, т. 170, № 11, с. 1203-1215, 2000.
4. Дианов Е. М. // УФН, т. 174, № 10, с. 1139-1142, 2004.
5. Унгер Г. Г. Теория планарных и волоконных оптических волноводов / Пер. с англ. под ред. Шевченко В. В. – М., - 1980. – 656 с.
6. Стоян В. А., Григорук В. І., Онисько Ю. Т., Сліченко Ю. А. // Вісник Київського національного університету: радіофізика та електроніка, К., 2003, вип. №5, с. 62-64.
7. Григорук В. І., Масловський С. О., Онисько Ю. Т. // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 1993, – 3. – с. 213-216.

Надійшла до редколегії 26.03.07



УДК 535.241.13:534

Денег С.З.<sup>\*</sup>, магістр  
Колєнов С.О.<sup>\*\*</sup>, канд. фіз.-мат. наук  
Смирнов Е.М., канд. фіз.-мат. наук

**Дослідження просторового спектра першого порядку брегівської дифракції світла в частотно-модульованому акустичному полі.**

*Створено експериментальну установку для дослідження просторового спектра дифрагованого світла у першому порядку брегівської дифракції. Для частотно-модульованого акустичного поля отримані експериментальні результати. Проведено теоретичне обґрунтування отриманих результатів на основі існуючих методів аналізу сильної акустооптичної взаємодії.*

*Ключові слова:* акустооптична взаємодія, просторовий спектр, дифракція Брегга.

E-mail: \* sadz@univ.kiev.ua, \*\* ksa@univ.kiev.ua

### Вступ

Надзвичайно розповсюджене використання лазерів у техніці дуже тісно пов'язане з методами керування його випромінюванням. Для цього використовують акустооптичну (АО) дифракцію. Одним з режимів дифракції, що використовується в техніці, є дифракція світла в частотно модульованому акустичному полі [1]. Незважаючи на те, що АО взаємодія досліджується досить давно, більшість робіт присвячені режиму слабкої акустооптичної взаємодії. Для режиму сильної акустооптичної взаємодії відомі роботи, в яких досліджується лінійна частотна та гармонічна частотна модуляції. Однак прийнятного (з точки зору реальності отримання кінцевого результату) загального підходу для вирішення даної задачі в режимі сильної АО взаємодії досі не існує. Виходячи з цього, будемо опиратись на експериментальне дослідження і розглянемо просторовий спектр першого порядку брегівської дифракції світла в частотно-модульованому акустичному полі.

#### 1. АО дифракція в частотно-модульованому акустичному полі

Брегівський режим акустооптичної (АО) взаємодії характеризується тим, що у випадку монохроматичної акустичної хвилі падаюча плоска світлова хвиля дифрагує в єдиний

Denega S.Z.<sup>\*</sup>, M.S. student,  
Kolyenov S.O.<sup>\*\*</sup>, PhD  
Smirnov E.M., PhD

**Spatial spectrum investigation of diffracted light in the first Bragg order of acousto-optics diffraction in frequency modulated acoustics field.**

*The experimental measuring equipment for spatial spectrum investigation of the first Bragg order was developed. The experimental results for frequency modulated acoustic field were obtained. The theoretically grounds for obtained results were provided in accordance with existent methods*

*Key Words:* acousto optics interaction, spatial spectrum, Bragg diffraction

дифракційний порядок. У цьому режимі досягається висока ефективність дифракції (в теорії до 100%)[2]. Якщо звук не монохроматичний і складається з деякого набору частотних компонент, то результат дифракції являє собою велику кількість парціальних хвиль. Уся сукупність цих хвиль утворює перший брегівський порядок. В цьому наборі хвиль присутні не лише частоти, що існують в акустичному сигналі, а і комбінаційні частоти [3]. Виникнення відгуку на комбінаційних частотах обумовлено нелінійністю АО взаємодії.

При використанні режиму слабкої АО взаємодії (при ефективності дифракції не більше 10%) просторовий спектр світла в першому дифракційному порядку повторює частотний спектр звуку, що подається на п'єзоперетворювач АО комірки [4]. Такий підхід не працює для режиму високої ефективності дифракції.

Задача знаходження кутового спектра дифрагованого світла в режимі сильної АО взаємодії за відомим спектром акустичного сигналу в загальному випадку не має аналітичного розв'язку. В роботах [5-6] запропоновано метод, який дозволяє для певного класу функцій модуляції спростити теоретичний аналіз задачі. В системі рівнянь для зв'язаних хвиль [2] запропоновано вважати параметр Рамана – Натта  $q$  таким, що залежить від часу та



координати (вздовж якої розповсюджується акустична хвиля). Такий підхід дозволяє отримати систему рівнянь зв'язаних мод для випадку, коли акустичний сигнал не монохроматична хвиля, а частотно модульований сигнал. Для того, щоб можна було користуватись вище згаданим підходом, необхідне виконання умови повільності зміни модулюючої функції [5].

Також відхилення світлових променів при проходженні АО комірки повинно задовольняти умову (1)

$$l \cdot \lg(\varphi_{1,0}) \ll d_{ac} \quad (1)$$

Тут  $d_{ac}$  – просторовий період модуляції акустичного поля,  $l$  – довжина п'єзоперетворювача, а  $\varphi_0$  та  $\varphi_1$  – кути падіння та дифракції відповідно.

Тоді, якщо умова (1) виконується, то згідно з [5,6], просторовий спектр першого бреггівського порядку буде повторювати спектр акустичного поля.

В роботах [7,8] використано більш точний метод опису АО дифракції в режимі високої ефективності, проте він дуже громіздкий і фактично не застосовний у випадках, коли акустичне поле має складну структуру.

## 2. Наближення для використаної моделі

Будемо розглядати схему геометрії АО взаємодії, що зображена на рис. 1. Світловий промінь розповсюджується під кутом до осі Z у площині XZ. Акустична хвиля розповсюджується вздовж осі X.

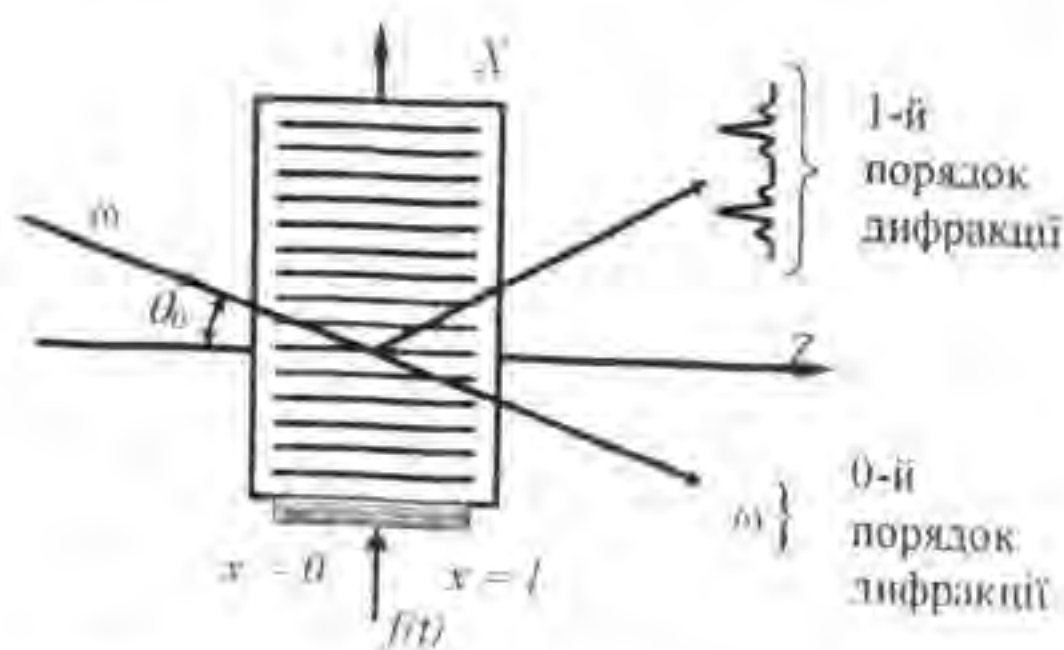


Рис. 1. Схема геометрії АО взаємодії

Для такої геометрії перепишемо систему рівнянь для зв'язаних мод [2] у вигляді

$$\begin{cases} l \frac{dE_1(x, y, z, t)}{dz} = V(t, x) E_0(x, y, z, t), \\ l \frac{dE_0(x, y, z, t)}{dz} = -V^*(t, x) E_1(x, y, z, t). \end{cases} \quad (2)$$

Тут  $E_1, E_0$  – комплексні амплітуди дифрагованого і падаючого світлових променів відповідно. Якщо не враховувати дисперсію швидкості звуку, то  $V(t, x)$  (параметр АО зв'язку) можна представити у вигляді (5).

$$V(t, x) = V_a \cdot a(\tau). \quad (3)$$

Тут  $V_a$  – дійсний параметр, що відповідає акустичному сигналу у вигляді гармонійного сигналу із такою амплітудою, що параметр Раманна дорівнює  $\frac{V_a}{l}$ . Функція  $a(\tau)$  – це (в загальному випадку) комплексна функція модуляції, причому  $|a| \leq 1$ . Параметр  $\tau$  визначається формулою (4).

$$\tau = t - x/v_z, \quad (4)$$

$v_z$  – швидкість акустичної хвилі в АО комірі.

Розв'язуючи систему (3) методом послідовних наближень отримаємо

$$E_1(k_x, k_y, t) = \sin V_a \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \exp(-in\Omega t) E_0(k_x - nK, k_y) \quad (5)$$

де  $\Omega = K \cdot v_z$ , а  $a_n$  – член розкладу модулюючої функції (6) у ряд Фур'є

$$a(t) = \exp(i\omega(t) \cdot t + \theta(t)). \quad (6)$$

де  $\omega(t)$  наступна функція

$$\omega(t) = \begin{cases} \omega_1, & -\frac{T}{2} \leq t < -\frac{T}{4}, \\ \omega_2, & -\frac{T}{4} < t < \frac{T}{4}, \\ \omega_1, & \frac{T}{4} < t < \frac{T}{2}. \end{cases} \quad (7)$$

Функція  $\theta(t)$  потрібна для того, щоб значення модулюючої функції змінювалось у часі без розриву фази.



$$\theta(t) = \begin{cases} 0, & -\frac{T}{4} < t < \frac{T}{4}; \\ (\omega_2 - \omega_1) \cdot \frac{T}{4}, & \frac{T}{4} < t < \frac{T}{2}; \\ -(\omega_2 - \omega_1) \cdot \frac{T}{4}, & -\frac{T}{2} < t < -\frac{T}{4}. \end{cases} \quad (8)$$

Графік зміни частоти модулюючої функції в часі зображено на рис. 2.

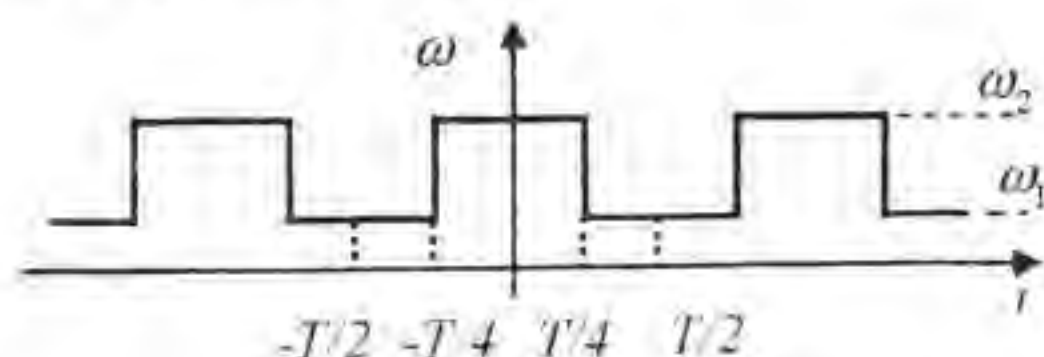


Рис. 2. Залежність частоти акустичного поля від часу.

### 3. Експеримент

Для експериментального дослідження просторового спектра першого порядку брегівської дифракції була використана АО комірка з кристала парателуриту ( $\text{TeO}_2$ ). Параметр  $Q$  для даної комірки дорівнює приблизно  $22\pi$ , що дає можливість вважати режим дифракції близьким до брегівського. Центральна частота 102 МГц. Розміри п'єзоперетворювача: довжина  $l=3\text{ мм}$  та висота  $H=2\text{ мм}$ .

Блок-схема експериментальної установки представлена на рис.3. Оптична частина установки включає АО комірку, лінзу ( $L_1$ ), діафрагми ( $D_0$  та  $D_1$ ) та фотодетектор (ФД). Використовувався напівпровідниковий лазер з довжиною хвилі 0,65 мкм. Пучок лазера на вході оптичної схеми мав потужність порядку 1 мВт та обмежувався діафрагмою  $D_0$  до діаметра 6 мм. Фотодетектор та АО комірка знаходяться в фокальних площинах лінзи  $L_1$ .

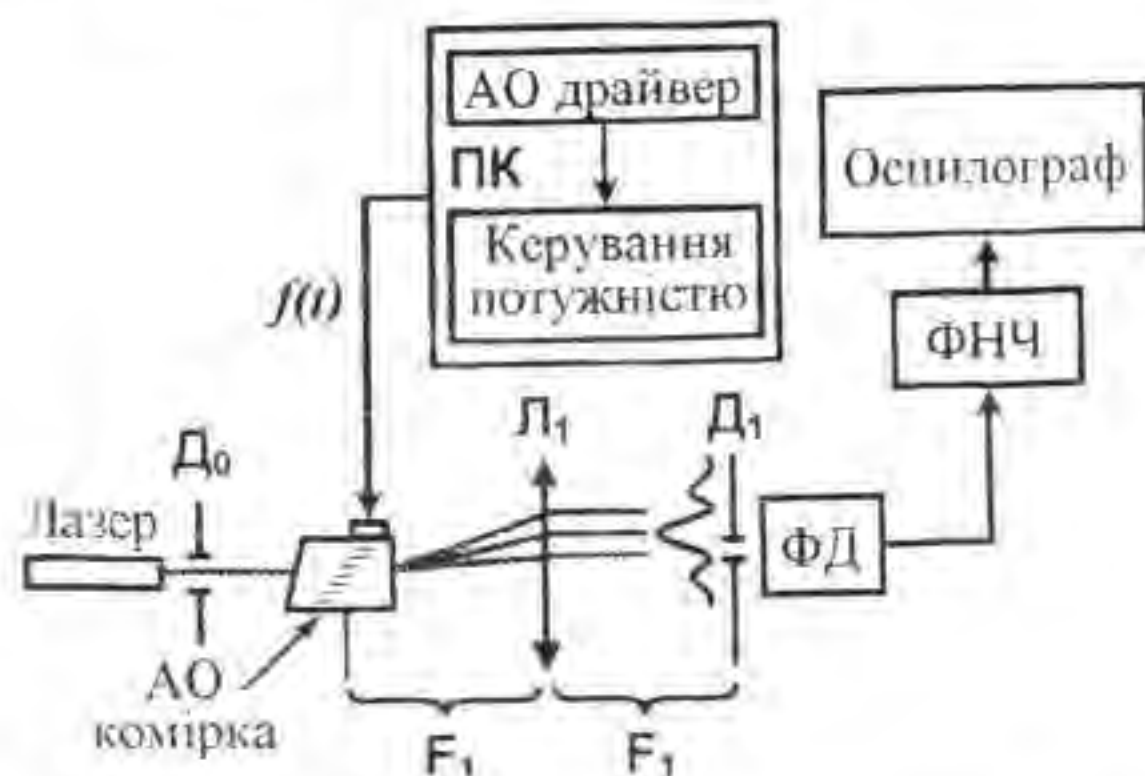


Рис. 3. Блок-схема лабораторної установки.

Електрична частина схеми розроблена так, щоб була можливість подавати на п'єзоперетворювач АО комірки сигнал виду (6). Для керування акустичним полем в АО комірни використовуються АО драйвер на синтезаторі прямого синтезу, вихідні частоти якого встановлюються з точністю  $\pm 5\text{ кГц}$ , із стабільністю кварцу приблизно  $0.001\%$  і змінюються від 80 до 115 МГц.

Керуючий сигнал за допомогою комп'ютера (ПК) подається на синтезатор частоти, який через вказаний програмою проміжок часу перемикається між частотами  $f_1$  та  $f_2$  ( $f_2=f_1+\Delta f$ ) кожні  $T$  мікросекунд (величина  $T$  є керованим параметром в ході експерименту). Сигнали з виходу синтезатора надходять до АО комірки. Величина частоти  $f_1$  сканується в межах 80–115 МГц за лінійним законом з кроком 0,01 МГц та часовим інтервалом 1 мілісекунда між кроками. Такий режим використовується для того, щоб створити сканування дифракційної картини по діафрагмі. Сигнал з фотодетектора (ФД) через фільтр низьких частот (ФНЧ) надходить до осцилографа. За рахунок сканування утворюється осцилограма сигналу, що повторює зміну інтенсивності світла на діафрагмі і є відображенням просторового спектра дифрагованого світла.

#### Методика вимірювань

Створена лабораторна установка дозволяє змінювати керуючий параметр  $T$  у широких межах.

Виходячи з параметрів АО комірки та апертури світлового променя був обраний діапазон зміни параметра  $T$ . Зверху величина  $T$  обмежена з міркувань того, що в апертурі світла повинен уміщатися принаймні один період модуляції акустичного імпульсу. Тобто  $T$  не може бути більше ніж

$$T < \frac{d}{2v_s} = \frac{0,006\text{ м}}{2 \cdot 617\text{ м/с}} \approx 0,5 \cdot 10^{-6}\text{ с} \quad (9)$$

Величина  $T$  обмежена знизу тим, що хоча б один період сигналу повинен уміщатися в один імпульс модуляції. Тобто частота модуляції повинна бути хоча б вдвічі меншою за частоту сигналу. Однак для того, щоб ефективно відбувалась дифракція на частоті сигналу, треба щоб в напівперіоді модуляції уміщалося кілька періодів сигналу



### Обґрунтування методу вимірювань

Розподіл інтенсивності дифрагованого світла залежно від кута падіння визначається за формулою (10) [1]:

$$I_1 = I^0 W^2 \frac{\sin^2 \frac{\pi L}{\Lambda \cos \theta} \sqrt{W^2 + (\sin \theta_k - \sin \theta)^2}}{W^2 + (\sin \theta_k - \sin \theta)^2} \quad (10)$$

Тут  $\lambda$  – довжина хвилі світла,  $\Lambda$  – довжина хвилі звука,  $\theta_k$  – кут Брегга. Параметр  $W$  визначається формулою (11)

$$W = \left( \frac{\Lambda}{\lambda} \right) \left( \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon} \right) \quad (11)$$

З (11) видно, як впливає зміна умов синхронізму (або зміна кута падіння, або зміна частоти звуку при фіксованому куті падіння).

Підставивши в (10) параметри даної АО комірки та діапазон використовуваних частот отримуємо, що значення  $I_1$  на краях використовуваного діапазону відрізняється від центру діапазону не більш як на 11%. Це означає, що вибраний режим вимірювань забезпечує адекватність результатів.

Для того, щоб сам процес сканування не впливав на просторовий спектр дифрагованого поля, треба виконати ще одну умову, а саме, щоб за час, відведений для одного кроку сканування, акустична хвиля встигла заповнити апертуру світла. Для цього час між кроками сканування повинен бути не менше 10 нс. В даних експериментах він дорівнював 1 мс.

### 4. Результати

Амплітуда сигналу на осцилограмах (рис. 4) пропорційна інтенсивності світла в першому порядку брегівської дифракції, що розповсюджуються в певному напрямку. По осі абсцис відкладено відповідні їм значення частот акустичних хвиль, при яких відбувається така акустооптична дифракція.

Осцилограми майже симетричні відносно вертикалі, оскільки сканування за частотою відбувалось відносно центральної частоти АО комірки.

Осцилограми знімалися для  $\Lambda = 5$  МГц. Амплітуда акустичних хвиль відповідала величині параметра Рамана-Натта  $1,2\pi$ .

На осцилограмі (рис. 4 а), що відповідає граничному випадку (коли на апертурі світла укладається рівно період модуляції) видно, що дифракція відбувається окремо на двох частотах, що присутні в апертурі комірки. Коли кількість періодів модуляції, що потрапляють до апертури світла збільшується, то стає видно структуру максимуму дифракції. З [1] відомо, що максимум дифракції при дифракції на монохроматичній акустичній хвилі, має форму функції  $\text{sinc}(x)$ . Це відбувається внаслідок обмеженості ділянки АО взаємодії (світло має кінцеву апертуру). У випадках, що зображені на рис. 4 б-е, в області взаємодії знаходилось кілька періодів модуляції акустичного поля.

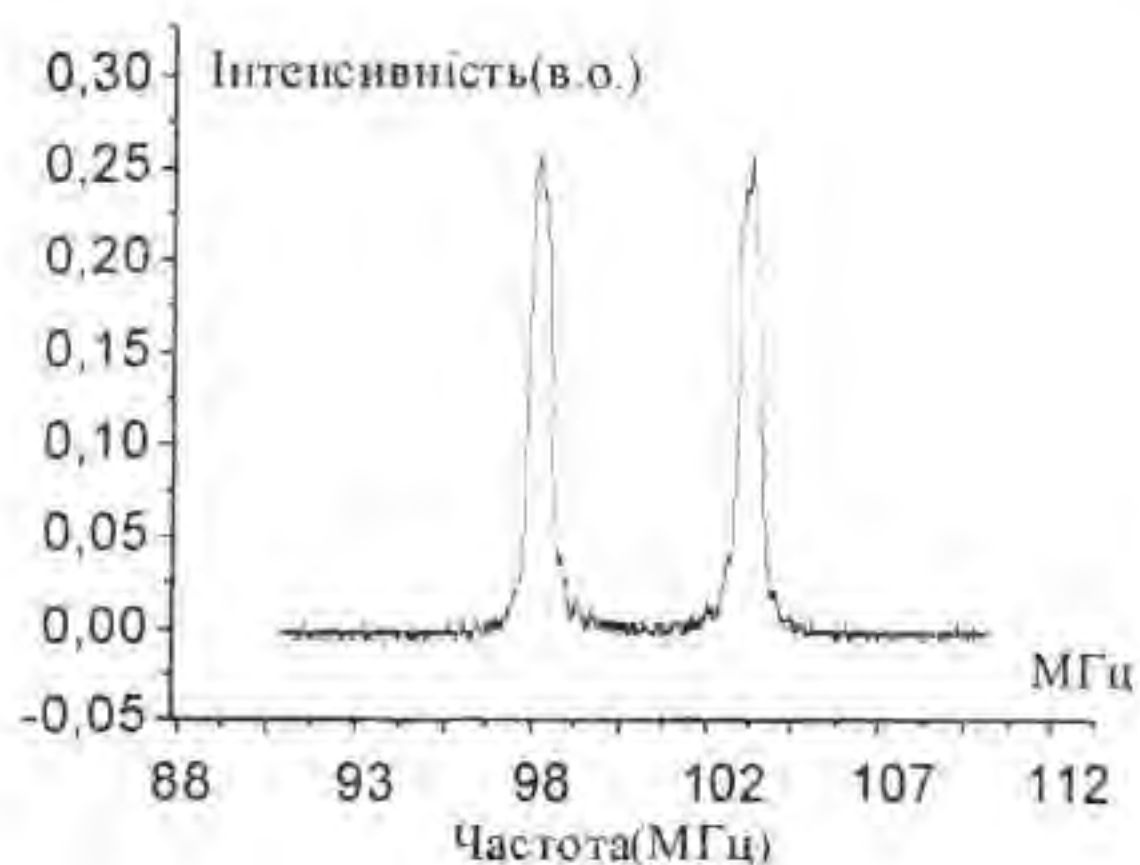
При виконанні умови (1) кутовий спектр дифрагованого світла повинен бути подібним до частотного спектра акустичного сигналу. Такий результат можна було очікувати, зважаючи на формулу (5). Цим можна пояснити розділення максимумів на осцилограмах.

Коли умова (1) не виконуються, результатом дифракції буде складна взаємодія максимумів дифракції парціальних хвиль. Зміна умов нерівності (1) здійснювалась шляхом зміни частоти модуляції.

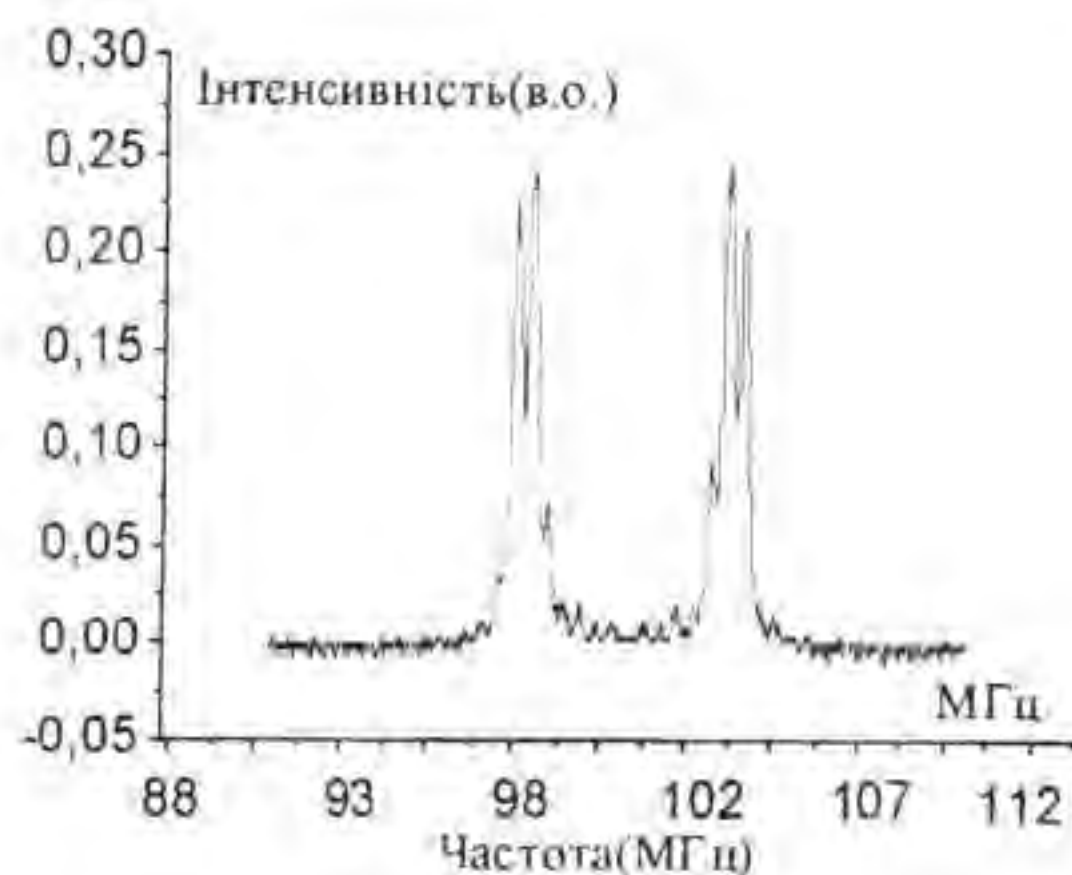
Розглянемо спектр акустичного сигналу (рис. 5). Як бачимо, при частотах модуляції що відповідають пунктам д) і е) на рис. 4 та рис. 5 видно суттєві відмінності між спектром акустичного сигналу і просторовим спектром дифрагованого світла. Це пояснюється тим, що для таких частот модуляції умова (1) не виконується. Для того, щоб нерівність (1) справджувалась при даних конструктивних параметрах АО комірки, потрібно, щоб використовувалась частота модуляції не більше 800 кГц.

На рис. 4 є видно, що при великій частоті модуляції в дифрагованому світлі можна отримати один максимум із незначними бічними компонентами. Частота акустичного поля, що відповідає цьому максимуму, дорівнювала 100 МГц, а в спектрі акустичного поля немає суттєвого максимуму на даній частоті. Такі результати можна пояснити нелінійністю сильної АО взаємодії.

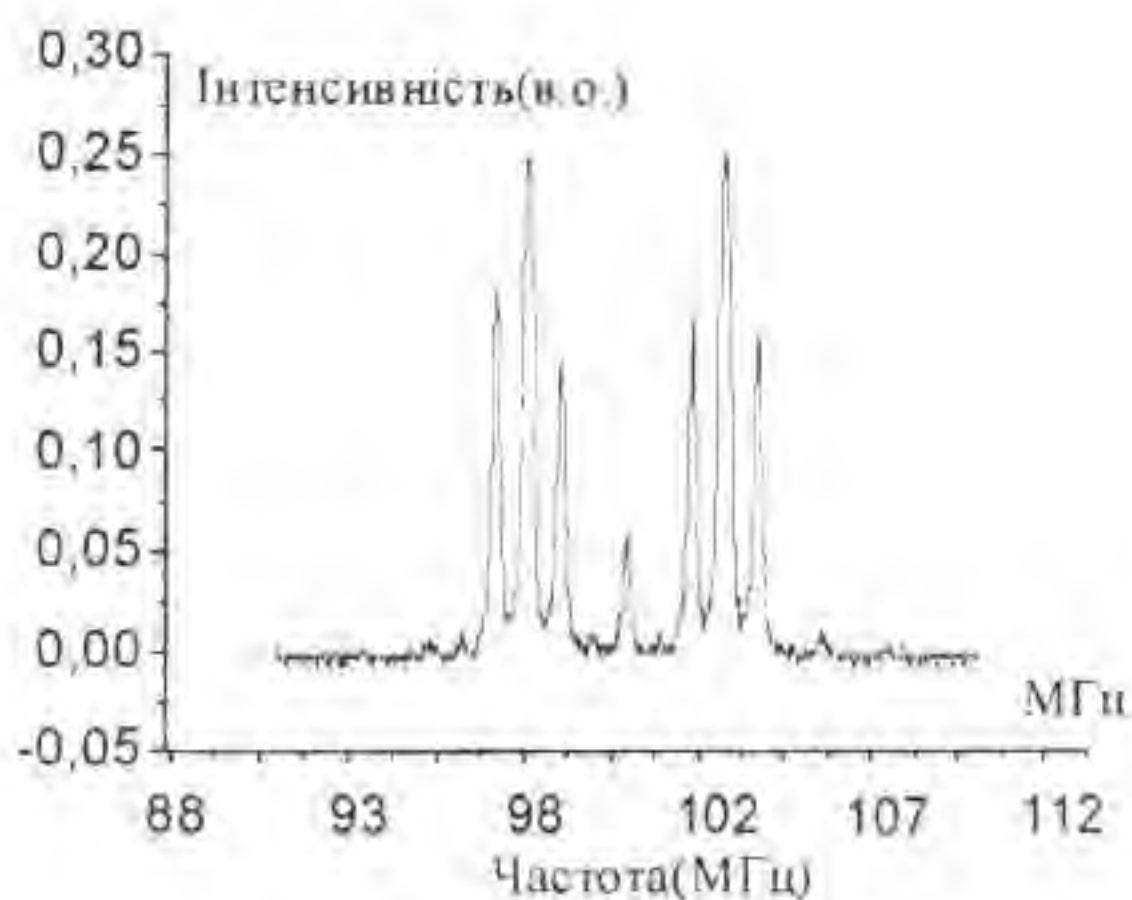




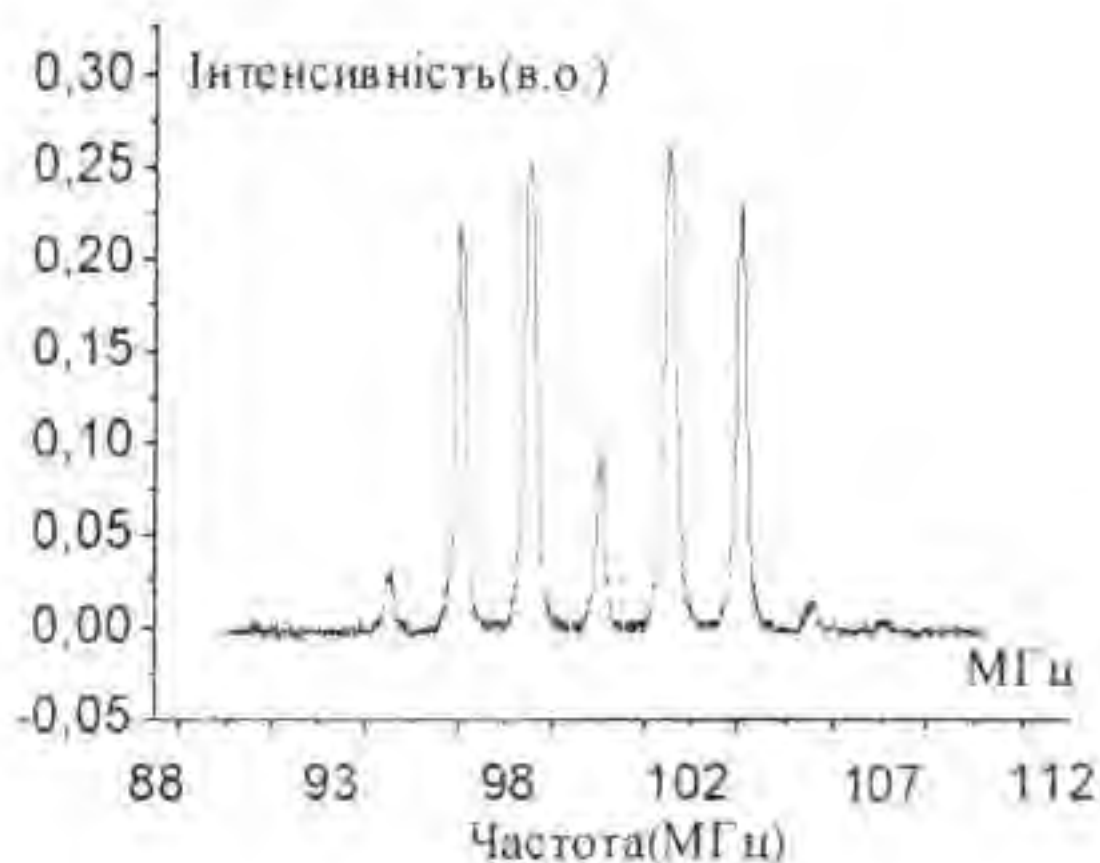
а) частота модуляції 97,656 кГц



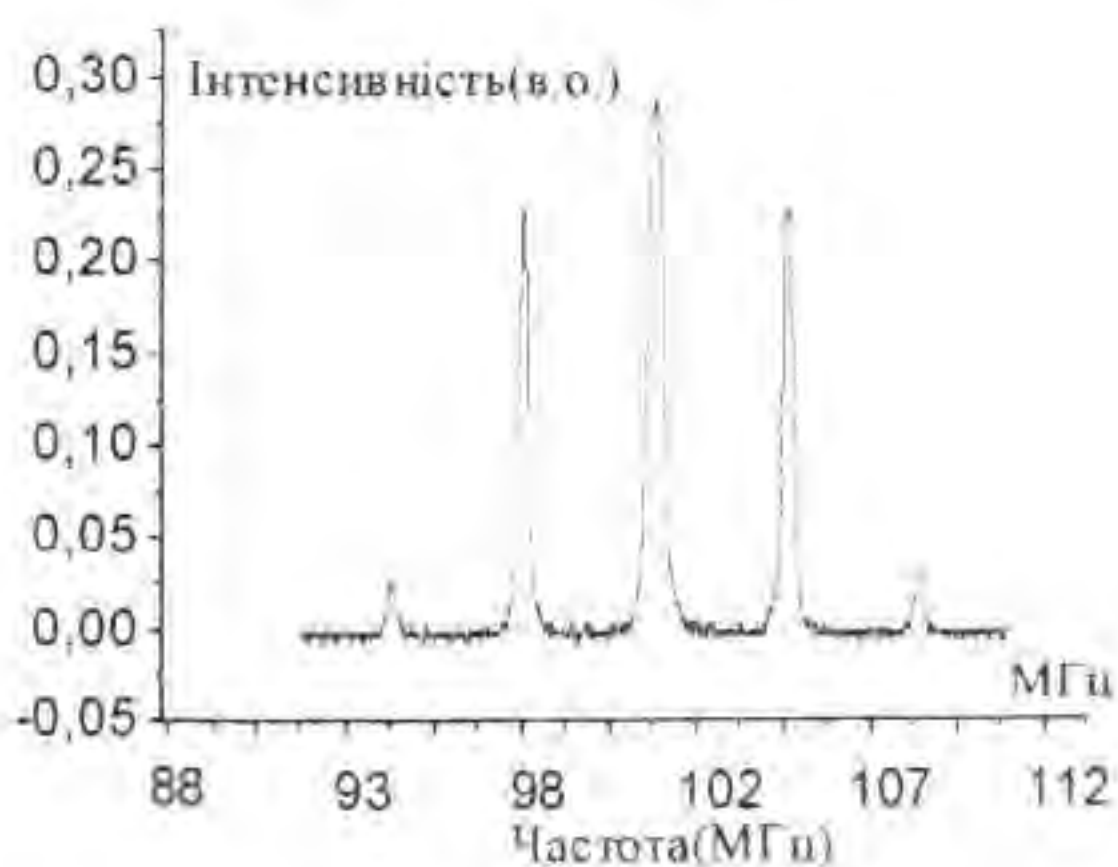
б) частота модуляції 195,312 кГц



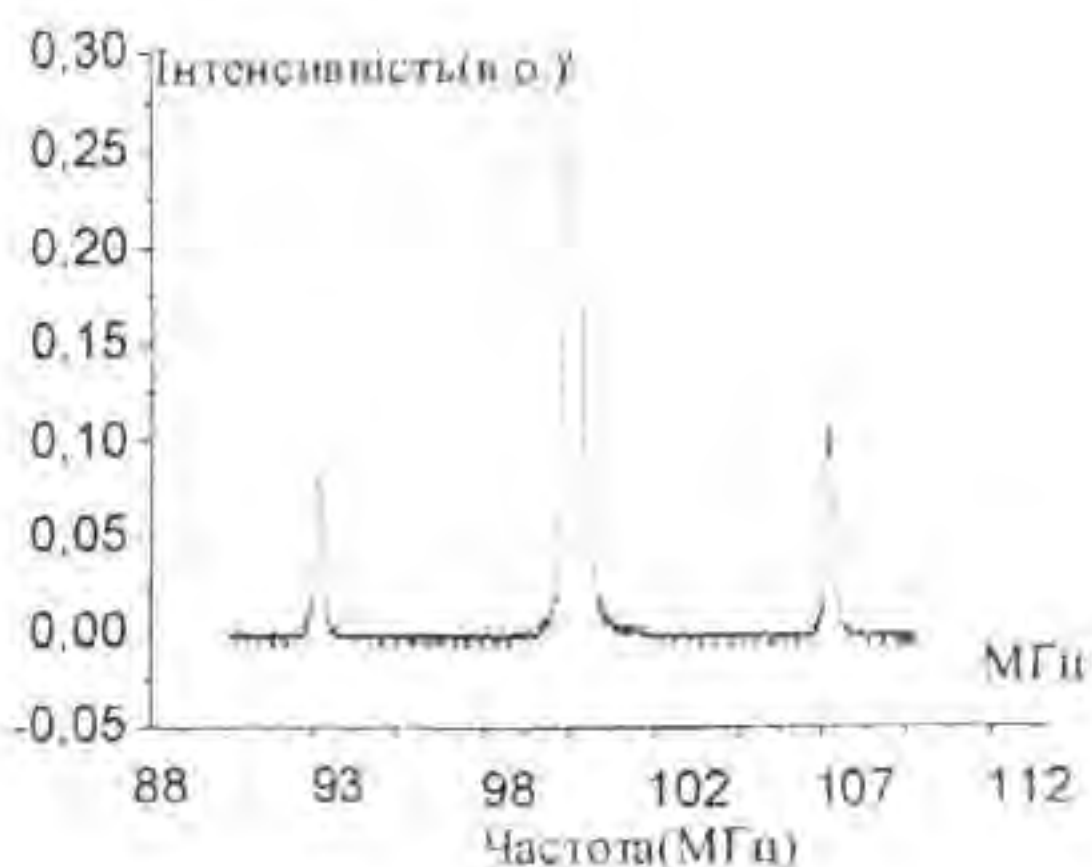
в) частота модуляції 390,625 кГц



г) частота модуляції 781,25 кГц



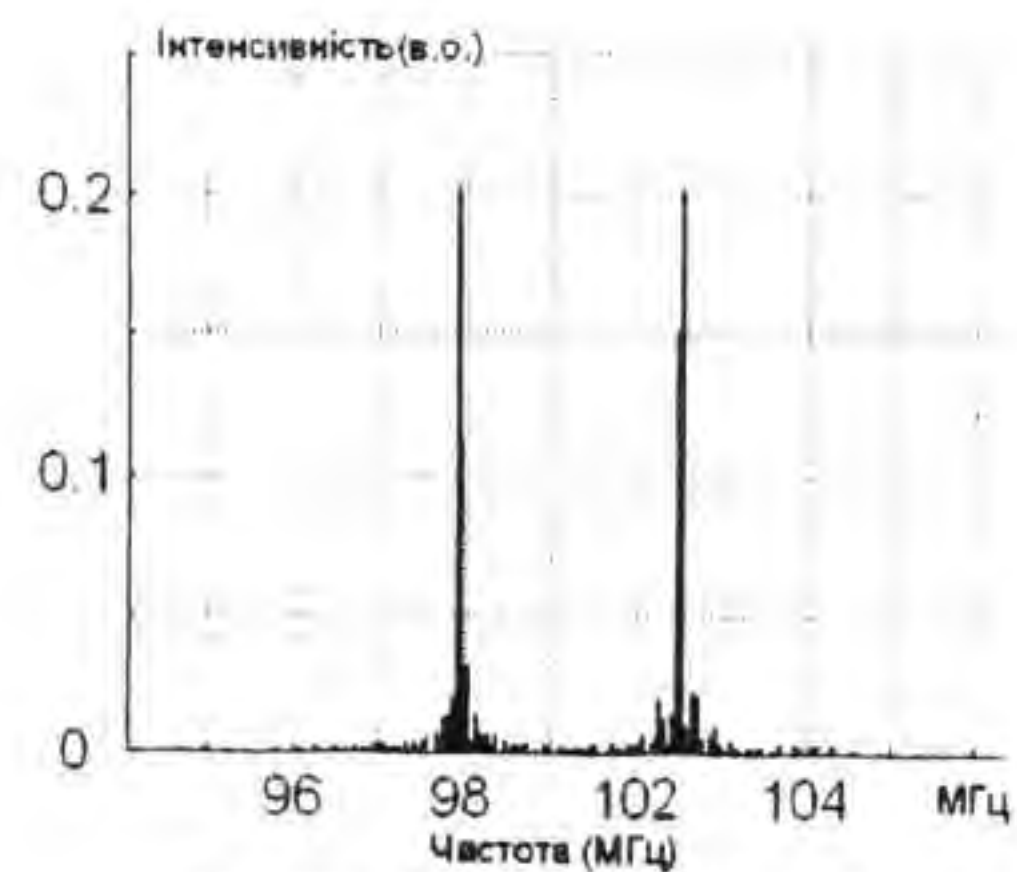
д) частота модуляції 1,5625 МГц



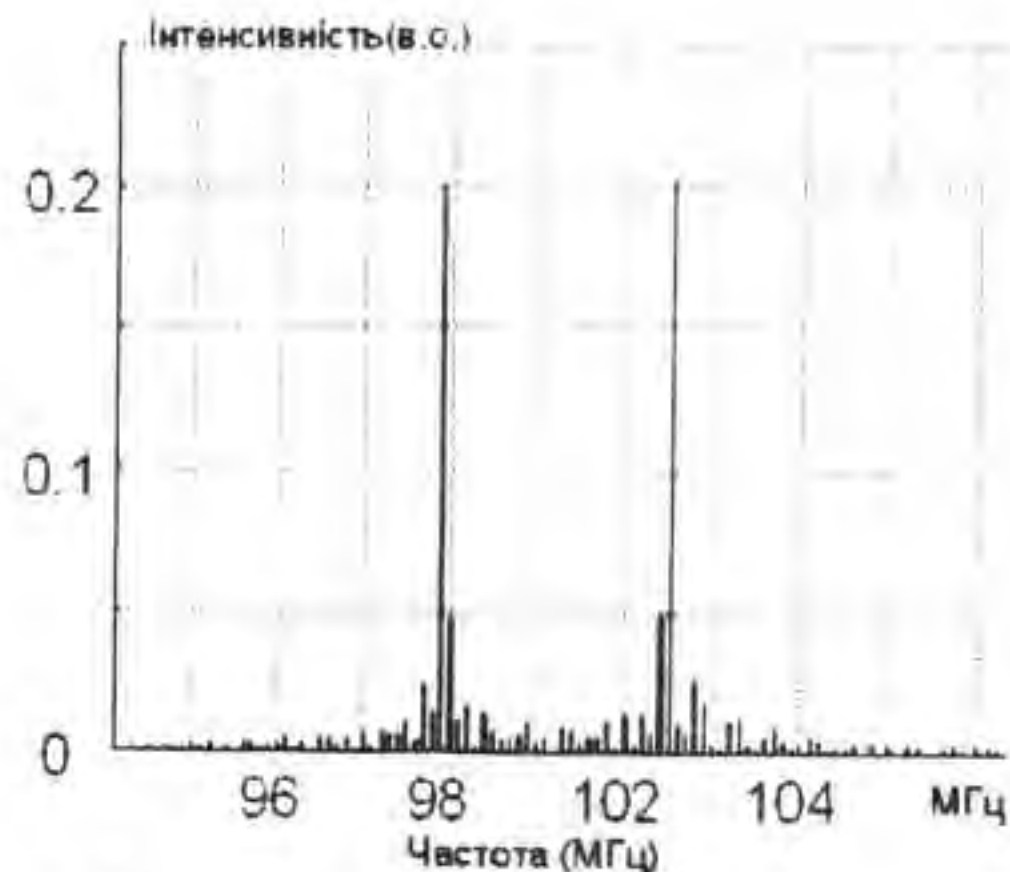
е) частота модуляції 3,125 МГц

Рис. 4 Осцилограми для різних частот модуляції

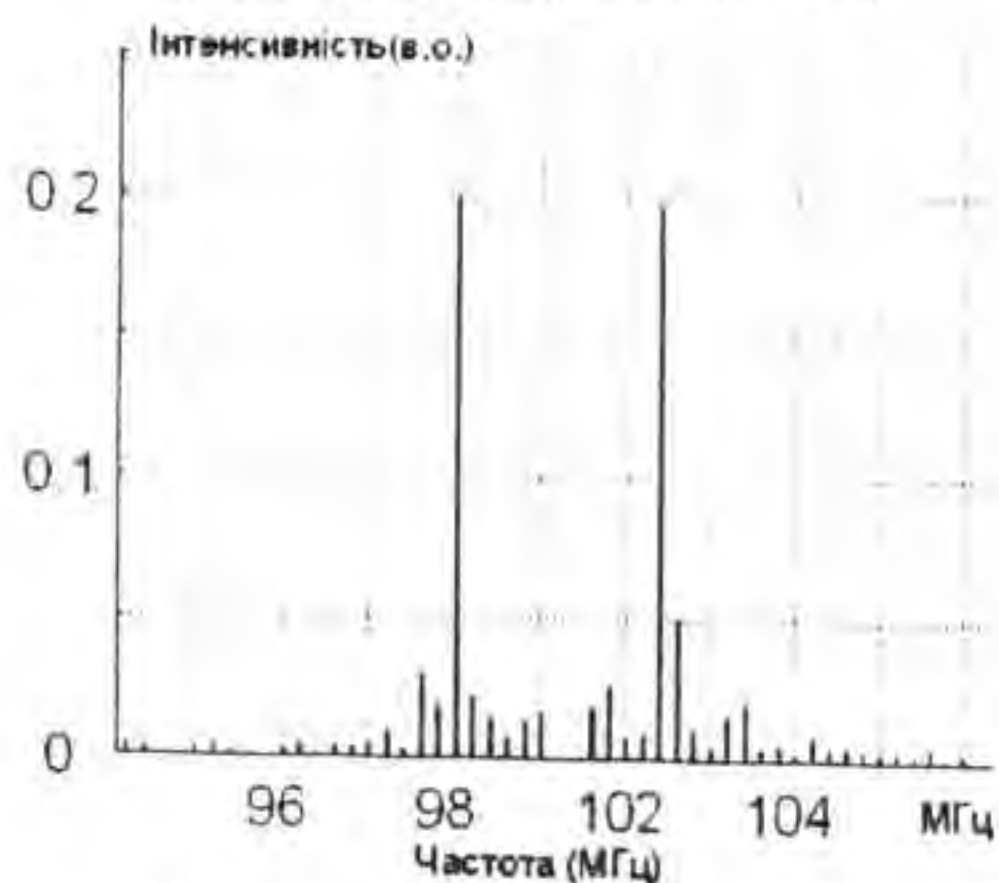




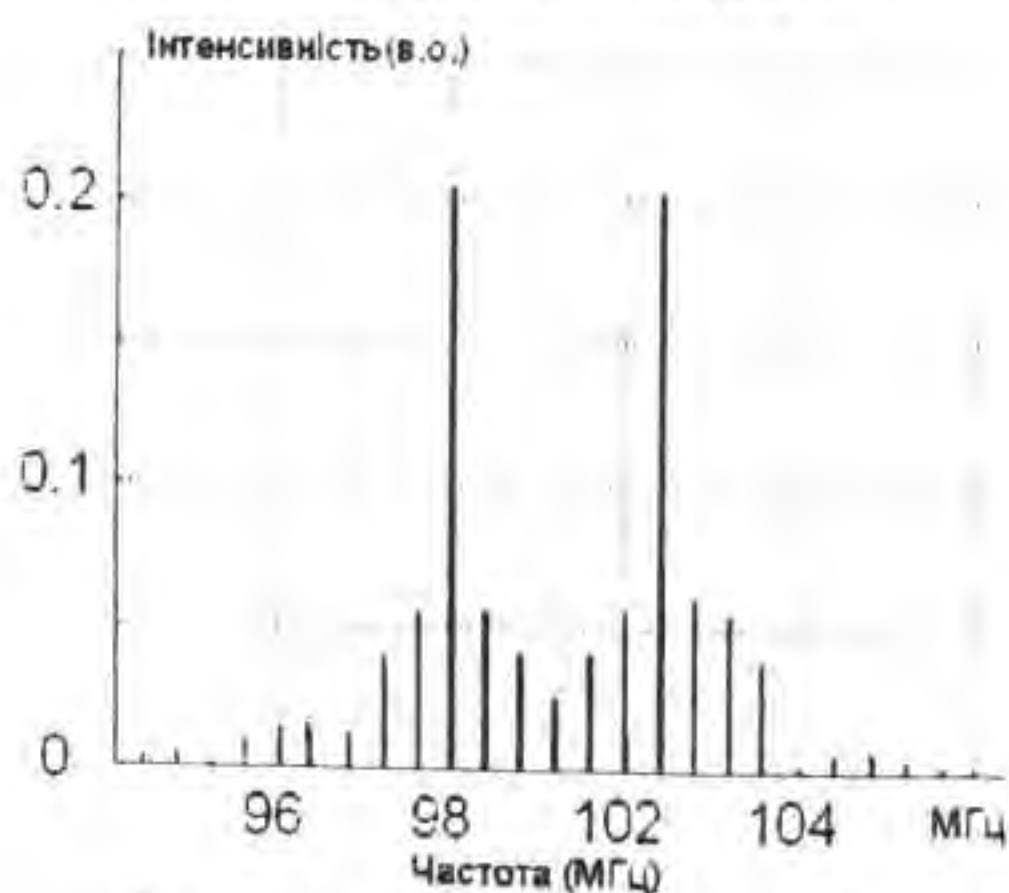
а) частота модуляції 97.656 кГц



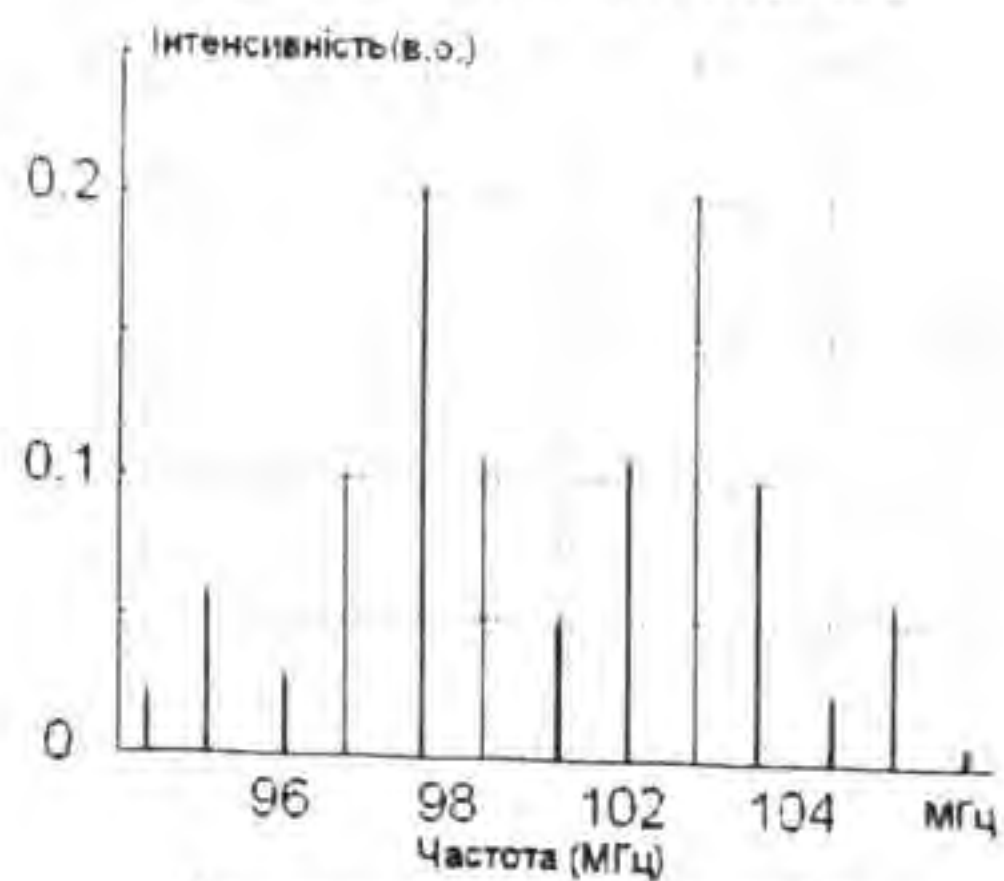
б) частота модуляції 195.312 кГц



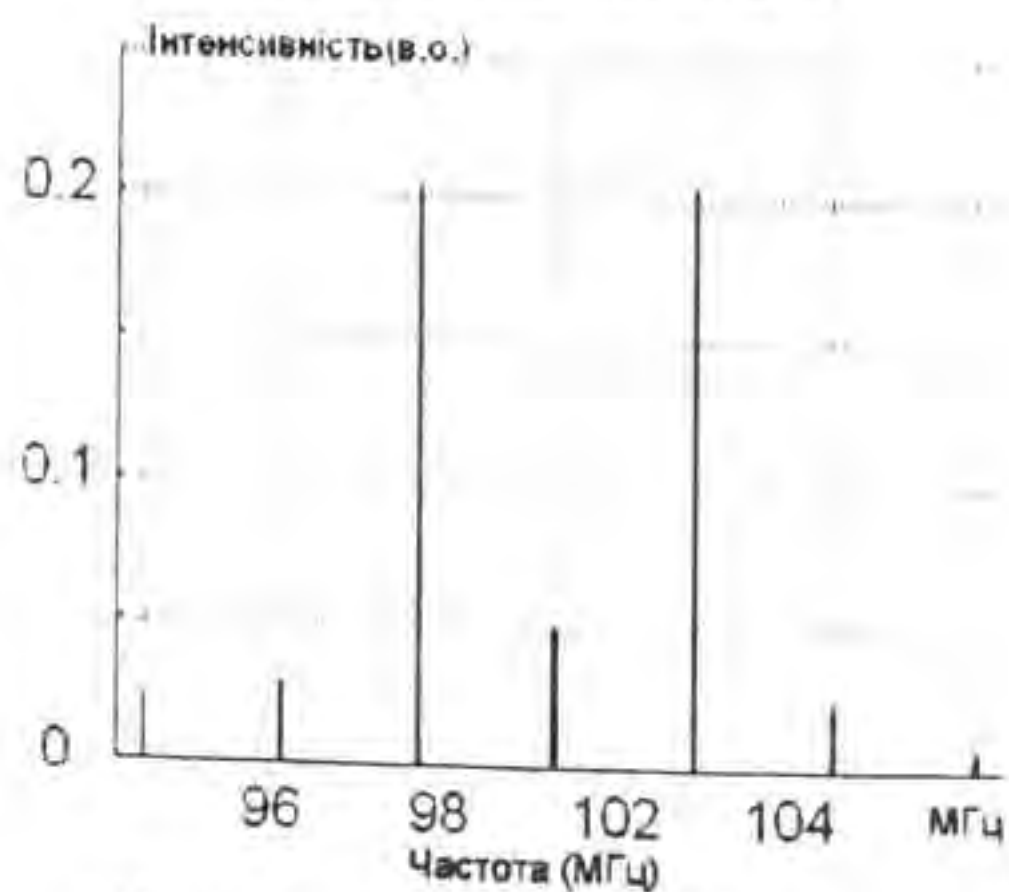
в) частота модуляції 390.625 кГц



г) частота модуляції 781.25 кГц



д) частота модуляції 1.5625 МГц



е) частота модуляції 3.125 МГц

Рис. 5 Спектри сигнала, що збуджує акустичне поле.



## Висновки

В даній роботі були проведені експериментальні дослідження просторового спектра першого порядку брегівської дифракції світла в частотно модульованому акустичному полі. За допомогою створеної експериментальної установки отримано результати, що пояснюються в межах існуючих методів аналізу АО взаємодії. Експериментально перевірено межі застосовності прийнятого теоретичного методу аналізу.

Отримані результати показують, що при виконанні умови (1) просторовий спектр дифрагованого світла подібний до спектра акустичного сигналу, що підводиться до п'єзоперетворювача АО комірки. Цей результат є нетривіальним, оскільки дифракція відбувається за умов сильної АО взаємодії. При збільшенні частоти модуляції відмінності в спектрах стають більш суттєвими, і коли умова (1) перестає виконуватись, результатом дифракції в першому порядку є нелінійна взаємодія дифракційних максимумів від парціальних хвиль. Порогове значення частоти модуляції визначається геометрією АО взаємодії та параметрами матеріалу.

Результати дослідження підтверджують можливість використання методу аналізу АО дифракції, запропонованого в [5], для певних меж параметрів.

В майбутньому планується дослідити вплив рівня потужності акустичного сигналу та апертури світлового променя на просторовий спектр дифрагованого світла.

Результати можуть бути корисними при дослідженні перехідних процесів, що пов'язані з переключенням між частотами в системах з акустооптичним скануванням лазерного випромінювання.

## Список використаних джерел

1. Магдич Л.П., Молчанов В.Я. Акустооптические устройства и их применение. – М.: Советское радио. 1978. – 112с.

2. Балакиши В.И., Парыгин В.Н., Чирков Л.Е. Физические основы акустооптики – М.: Радио и связь. 1985. – 280с.
3. Корнел А. Акустооптика / Пер. с англ. М.: Мир, 1993 – 280 с.
4. Трубецкой А.В. Многочастотное акустооптическое взаимодействие в анизотропной среде // Автометрия. – 1987. – №2, – С. 43–52.
5. Антонов С.Н., Резвов Ю.Г. Брегговская дифракция на частотно-модулированной звуковой волне – угловое расщепление дифракционного порядка // Радиотехника и электроника. – 2005. – Т.50, №4, – С.472–479.
6. Антонов С.Н., Проклов В.В., Резвов Ю.Г., Чесноков Л.Н., Чесноков В.Н. Повышение эффективности акустооптического модулятора с двулучевой диаграммой направленности методом коррекции двухчастотного электрического сигнала // Журнал технической физики. – 2006. – Т.76, №1. – С.60–65.
7. Zadorin A.S. Light modulation by acoustic signals for high diffraction efficiency // Russian Physics Journal. – 1999 – Vol. 42, №1. – P 115–122.
8. Zadorin A.S. Spatial dependence of the dynamic optical transfer function of a transparent medium perturbed by an acoustic signal // Russian Physics Journal. – 1999 – Vol. 42, № 5. – P 467–475.
9. Москалец О.Д. Об анализе спектра акустооптическим устройством – В кн. Обработка радиосигналов акустоэлектронным методом и акустическими устройствами – Л.: Наука, 1983. – С.81–86.

Надійшла до редколегії 2.3.2007



УДК 535.2:621.373.8

Іванісік\* А. І., канд. ф.-м. наук, доцент,  
Конопатський\* А. В., аспірант

### Формування надкоротких оптичних імпульсів унаслідок перехідного ефекту на межі самофокусуємого середовища

Розглядається можливість формування надкоротких оптичних імпульсів унаслідок перехідного ефекту на межі самофокусуємого середовища. Показано, що амплітудна модуляція лазерного випромінювання, яка трансформується у фазову самомодуляцію, веде до утворення цугу імпульсів пікосекундної тривалості.

Ключові слова: самофокусування, фазова самомодуляція, надкороткі імпульси.

A. I. Ivanisik\*, Ph.D., As. Prof.,  
A. V. Konopatskiy\*, graduate student

### The formation of ultrashort optical impulses in consequence of transition effect on border of a self-focusing environment

The opportunity of formation of ultrashort optical pulses in consequence of transition effect on border of the self-focusing environment is considered. It is shown, that amplitude modulation of laser radiation transforms to self-phase modulation and conducts to occurrence of picoseconds pulse train.

Key Words: self-focusing, self-phase modulation, ultrashort impulses.

\*E-mail: aivan@uninet.kiev.ua, konopatskiy@univ.kiev.ua

#### Вступ

В експериментальній оптиці генератори надкоротких імпульсів когерентного випромінювання посідають чільне місце, оскільки дають можливість прямих досліджень швидкоплинних процесів, вивчення нестационарних явищ у нелінійній оптиці, безпосереднього визначення сталих часу релаксації молекулярних систем у молекулярній фотофізиці, фотохімії, фотобіології. Необхідно зауважити, що мова йде насамперед про колімовані пучки з високою просторовою когерентністю, а отже, й направленістю, які можна фокусувати в об'єкти з розмірами порядку довжини хвилі.

Проблема створення генераторів надкоротких імпульсів когерентного випромінювання може вирішуватися багатьма шляхами, приміром, через використання пікосекундних лазерів із подальшою компресією імпульсів [1], у процесі генерації вищих компонент вимушеного комбінаційного розсіювання [2], тощо. Кожен із методів має певні недоліки та складності реалізації, а тому актуальним залишається пошук нових фізичних підходів до вирішення поставленої задачі. Про один із таких підходів уперше згадувалося в [3], де пропонувалося використання перехідного ефекту на межі самофокусуємого середовища. Мета цієї роботи полягає в розвитку ідей закладених у [3], та визначенні тривалості й амплітуди надкоротких імпульсів або цугу таких імпульсів на основі

моделювання перехідного ефекту у випадку амплітудно модульованої накачки.

#### Теоретична модель і результати розрахунків

Унаслідок збільшення  $\Delta n$  показника заломлення  $n_0$  у самофокусуємому середовищі відбувається затримка фази лазерного випромінювання. Вона залежить від інтенсивності випромінювання, а отже, часу  $t$  та координати  $z$ . Для затримки фази  $\Delta\varphi(L, t)$  на виході із середовища довжиною  $L$  маємо [4]:

$$\Delta\varphi(L, t) = \frac{2\pi}{\lambda_0} \int_0^L \Delta n(z, t) dz = \frac{2\pi}{\lambda_0} \tilde{P}(t) \frac{(1,22\lambda_0)^2}{16n_0} \int_0^L \frac{1}{a_z^2} dz, \quad (1)$$

де вважається, що самофокусуєме середовище розташоване на відрізку  $z = 0 \div L$ , а пучок на вході є колімованим;  $\tilde{P} = P/P_{cr}$  – відношення миттєвої потужності пучка до критичної потужності самофокусування;  $\lambda_0$  – довжина хвилі лазерного випромінювання у вакуумі. Квадрат радіуса пучка  $a_z^2$  змінюється за законом:

$$a_z^2 = a_0^2 \left[ 1 - (z/z_f)^2 \right]^{n/2} + (a_f/a_0)^2, \quad (2)$$

де  $a_0$  – початковий радіус пучка або його фрагменту, який самофокусується незалежно, а фокальна відстань самофокусування  $z_f$  і параметр  $n$  визначаються виразами:



$$z_j = \frac{2\pi}{\lambda_0} \frac{0,367n_0a_0^2}{[(\tilde{P}^{1/2} - 0,852)^2 - 0,0219]^{1/2}},$$

$$\mu = 2,9\tilde{P}^{-1/2} + \tilde{P}^{-1} - 1. \quad (3)$$

Для часової залежності  $\Delta\varphi(t)$  вирішальне значення має рух фокальної точки внаслідок зміни  $\tilde{P}(t)$ . Найшвидші перепади  $\Delta\varphi(t)$  реалізуються протягом перетину фокальною точкою межі самофокусуємого середовища, що власне й отримало назву перехідного ефекту.

На рис. 1 подана залежність  $\Delta\varphi(t)$  для амплітудно модульованого лазерного випромінювання, заданого у вигляді

$$\tilde{P}(t) = \tilde{P}_0(1 - 2\kappa \sin^2 \frac{\pi}{T}t) \quad (4)$$

з коефіцієнтом амплітудної модуляції  $\kappa = 0,2$ , періодом модуляції  $T = 2$  нс та максимальним значенням приведеної миттєвої потужності  $\tilde{P}_0 = 1,7$ . Інші параметри становили:  $L = 0,3$  м;  $n_0 = 1,49052$ ;  $\lambda_0 = 0,6943$  мкм;  $a_0 = 113$  мкм;  $a_f = 5$  мкм. В моменти часу, коли  $\tilde{P} = 1,23$ , реалізуються найшвидші зміни  $\Delta\varphi(t)$ , яким на рис. 1 відповідають майже вертикальні відрізки кривих.

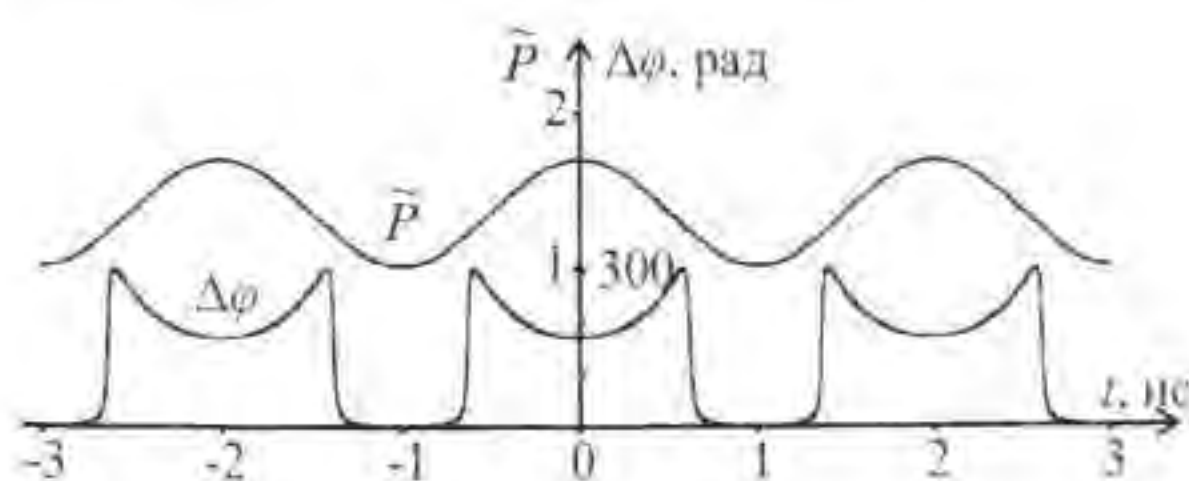


Рис. 1. Часова залежність потужності випромінювання  $\tilde{P}$  та затримки фази  $\Delta\varphi$ :  $\kappa = 0,2$ ;  $L = 0,3$  м;  $T = 2$  нс;  $\tilde{P}_0$ .

Фазова самотуляція випромінювання веде до відповідної частотної модуляції, а отже, до розширення спектра випромінювання. Амплітуди  $E_j$  членів ряду Фур'є для електричного поля  $E$  випромінювання на виході із середовища з точністю до постійного коефіцієнта пропорційності  $\eta$  між  $E$  та  $\sqrt{\tilde{P}}$  розраховуються з використанням відомого виразу для періодичних функцій:

$$E_j = \eta \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \sqrt{\tilde{P}(t)} \exp[-i(\omega_0 t - \Delta\varphi)] \exp[ij\Omega t] dt, \quad (5)$$

де  $\omega_0$  – циклічна частота випромінювання на вході в середовище;  $i$  – уявна одиниця;  $j = -\infty \div \infty$  – ціле число (номер гармоніки);  $\Omega = 2\pi/T$  – циклічна частота амплітудної модуляції.

Для періоду  $T = 2$  нс частота амплітудної модуляції в обернених сантиметрах становить  $\Omega/(2\pi) = 1/(cT) = 1/60$  см<sup>-1</sup>, де  $c$  – швидкість світла. Тож частоті, приміром, рубінового лазера  $\omega_0/(2\pi) = 14403$  см<sup>-1</sup> відповідає гармоніка з номером  $j_0 = \omega_0/\Omega = 864180$ . При значному віддаленні  $j$  від цього значення, а тим паче, для від'ємних  $j$  амплітуди  $E_j$  за лемою осциляції прямують до нуля. Крім цього, внаслідок інерційності самофокусування розширення спектра лазера на практиці [4] реалізується переважно в стоксовий бік, тому амплітуди  $E_j$  розраховувалися лише в діапазоні  $0 \ll j < j_0$ .

На рис. 2 подано стоксовий фрагмент спектра  $|E_j|^2$  на виході середовища за тих же умов, для яких розраховувалася  $\Delta\varphi$  на рис. 1. Частота  $\Delta\nu$  в см<sup>-1</sup> на рис. 2 пов'язана з  $j$  співвідношенням:  $\Delta\nu = \Omega j/(2\pi)$ , де  $\Delta j = j - j_0$ . Зображений спектр формується на ділянці траси руху фокальної точки поблизу межі середовища, де слід очікувати формування надкоротких імпульсів випромінювання. Останній пік у спектрі, який позначений сірим кольором на рис. 2, утворюється безпосередньо у момент перетину фокальною точкою межі середовища.

За допомогою оптичних фільтрів,

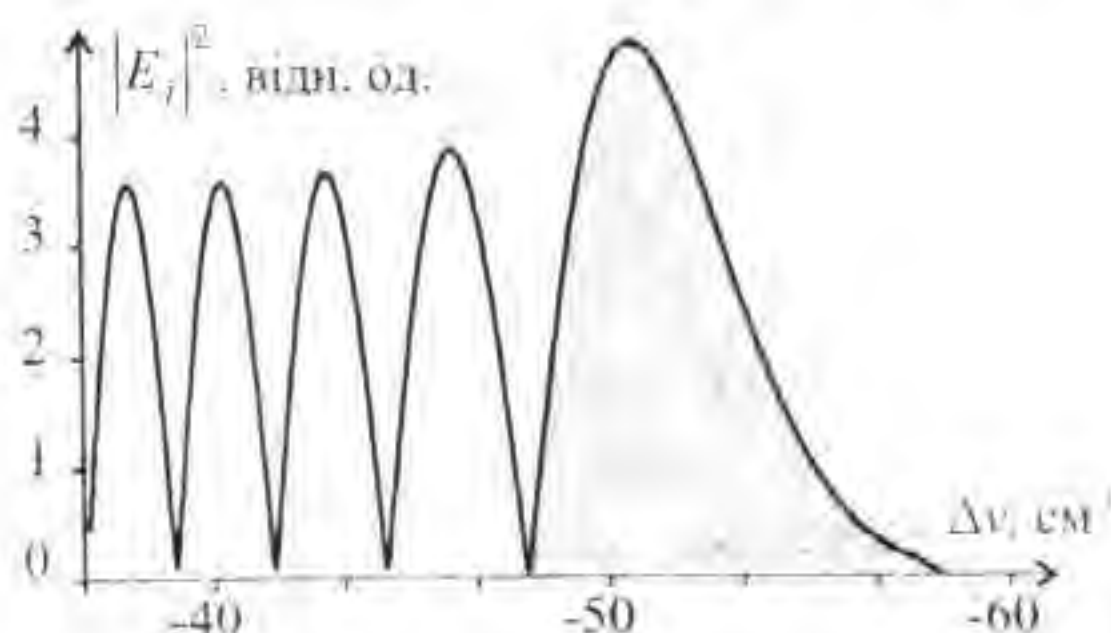


Рис. 2. Стоксовий фрагмент спектра випромінювання на виході з середовища:  $\kappa = 0,2$ ;  $L = 0,3$  м;  $T = 2$  нс;  $\tilde{P}_0 = 1,7$ .



спектральних приладів або оптичної системи збору випромінювання з деякої ділянки траси фокальної точки можна виділити певні фрагменти спектра випромінювання. Потужність  $\tilde{P}_{\text{відн}}(t)$  випромінювання з таким спектральним складом має амплітудно-часові характеристики, які можна визначити, просумувавши відповідні члени ряду Фур'є:

$$\tilde{P}_{\text{відн}}(t) = \left| \frac{1}{\eta} \sum_n E_n \exp[-i\chi_n \Omega t] \right|^2 = \left| \frac{1}{\eta} \sum_n E_n \exp[-i\Delta\nu_n \Omega t] \right|^2. \quad (6)$$

Результати розрахунків для амплітуди  $\tilde{P}_{0,\text{відн}}$  імпульсів та їх тривалості  $\tau_{\text{відн}}$  на піввисоті подані на рис. 3. Використаний різний підхід до виділення ділянки спектра відновленого імпульсу  $\tilde{P}_{\text{відн}}(t)$ : рис. 3а – виділення спектральних фрагментів  $(\Delta\nu - \delta\nu/2) \div (\Delta\nu + \delta\nu/2)$  із фіксованою шириною  $\delta\nu = 6 \text{ см}^{-1}$  і розташованих в околі  $\Delta\nu$ ; рис. 3б – поступове нарощування

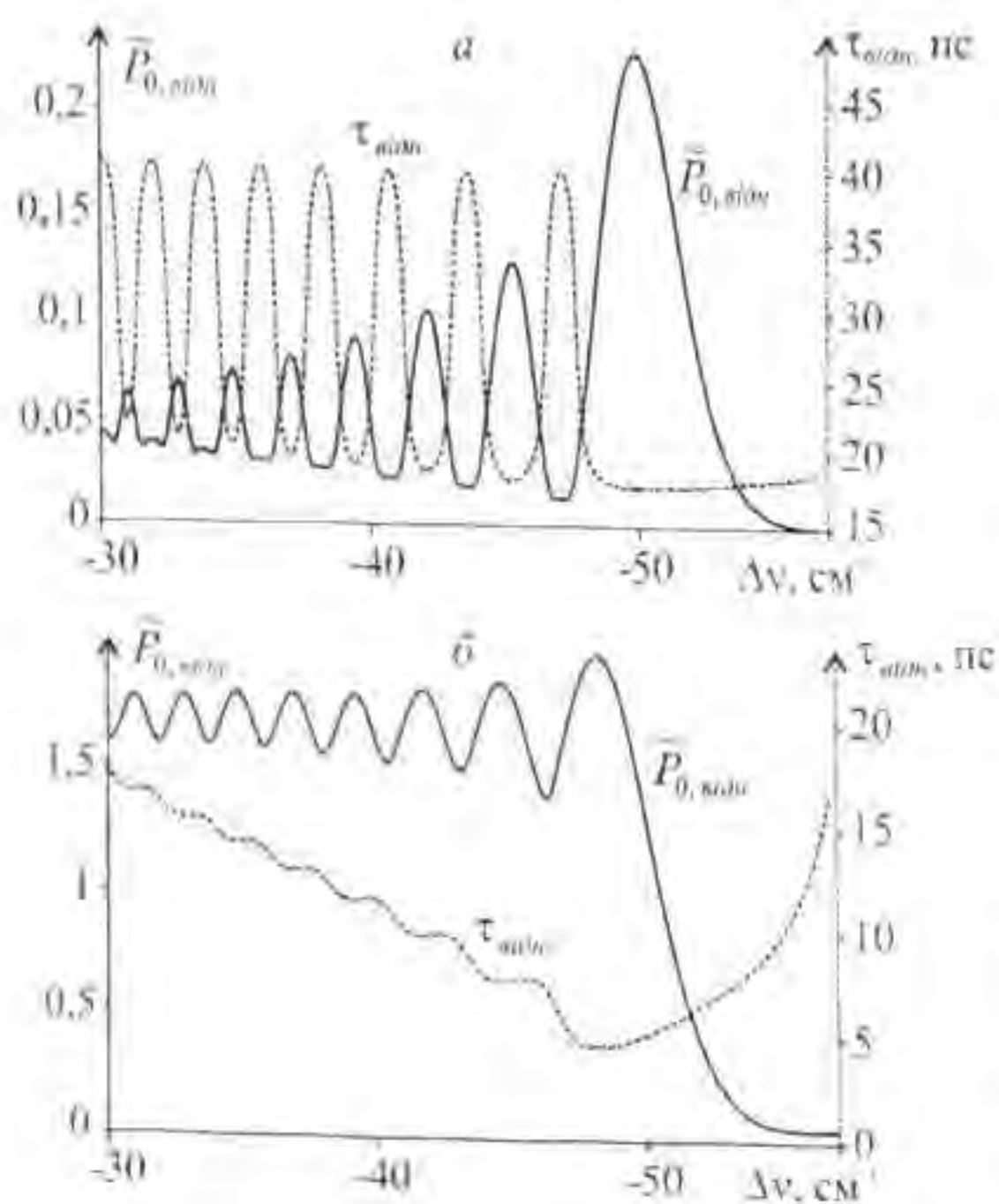


Рис. 3. Залежність амплітуди  $\tilde{P}_{0,\text{відн}}$  імпульсів і тривалості  $\tau_{\text{відн}}$  від розташування виділеного фрагменту спектра  $(\Delta\nu - \delta\nu/2) \div (\Delta\nu + \delta\nu/2)$  з фіксованою шириною  $\delta\nu = 6 \text{ см}^{-1}$  (а) та від розташування межі  $\Delta\nu$  виділеної ділянки  $\Delta\nu_s \div \Delta\nu$  з шириною  $\delta\nu = |\Delta\nu - \Delta\nu_s|$  (б).  
 $\kappa = 0,2$ ;  $L = 0,3 \text{ м}$ ;  $T = 2 \text{ нс}$ ;  $\tilde{P}_0 = 1,7$ ;  
 $\Delta\nu_s = -58,3 \text{ см}^{-1}$ .

ширини  $\delta\nu = |\Delta\nu - \Delta\nu_s|$  виділеної ділянки, коли одна з меж  $\Delta\nu_s$  є крайньою стоксовою компонентою спектра, а інша зсувається до значення  $\Delta\nu$ , вказаного на осі абсцис. Розрахунки виконувалися для тих же умов, що і спектр  $|E_s|^2$  на рис. 2 з  $\Delta\nu_s = -58,3 \text{ см}^{-1}$ .

Аналіз рис. 3 вказує на суттєві переваги другого варіанта виділення спектральних ділянок для формування надкоротких імпульсів. Так, у першому випадку досягається максимальне значення амплітуди лише  $(\tilde{P}_{0,\text{відн}})_{\text{max}} \approx 0,23$  ( $\Delta\nu = -49,8 \text{ см}^{-1}$ ) і мінімальна тривалість  $(\tau_{\text{відн}})_{\text{min}} \approx 18 \text{ пс}$  ( $\Delta\nu = -50,3 \text{ см}^{-1}$ ) на різних частотах  $\Delta\nu$ .

У другому випадку маємо  $(\tilde{P}_{0,\text{відн}})_{\text{max}} \approx 1,98$  ( $\Delta\nu = -47,9 \text{ см}^{-1}$ ), що перевищує потужність  $\tilde{P} = 1,23$ , коли фокальна точка розташована на межі середовища, і навіть максимальну миттєву потужність  $\tilde{P}_0 = 1,7$  вхідного випромінювання. Тривалість імпульсу у другому варіанті становить  $(\tau_{\text{відн}})_{\text{min}} \approx 4,53 \text{ пс}$  (теж на частоті  $\Delta\nu = -47,9 \text{ см}^{-1}$ ).

Указане значення  $\Delta\nu = -47,9 \text{ см}^{-1}$  у другому варіанті відповідає виділеній ділянці спектра від  $-47,9 \text{ см}^{-1}$  до  $-58,3 \text{ см}^{-1}$ , тобто, останньому піку зі стоксового боку на спектрі, поданому на рис. 2. Цей пік на рис. 2 позначений сірим кольором.

Результати розрахунків показують, що максимальна амплітуда відновлених імпульсів з останнього піку зі стоксового боку спектра залишається постійною  $(\tilde{P}_{0,\text{відн}})_{\text{max}} \approx 1,98$  для коефіцієнта амплітудної модуляції  $\kappa$  у межах  $0,15 \div 0,3$ . У той же час  $(\tau_{\text{відн}})_{\text{min}}$  помітно зменшується зі зростанням  $\kappa$  (рис. 4). Так, якщо для  $\kappa = 0,15$  тривалість  $(\tau_{\text{відн}})_{\text{min}}$  становить  $10,0 \text{ пс}$ , то для  $\kappa = 0,3$  маємо  $(\tau_{\text{відн}})_{\text{min}} = 2,77 \text{ пс}$ .

Імпульси, які формуються на межі самофокусуємого середовища у випадку виділення останнього піку зі стоксового боку спектра, мають наближено гауссову огинаючу (рис. 5). Деяка відмінність спостерігається лише на "крилах" імпульсу. Зауважимо на тому, що центральна частота  $\Delta\nu_c$  спектра імпульсів і напівширина  $\delta\nu_{\text{шир}}$  суттєво залежить від  $\kappa$  (рис. 6).



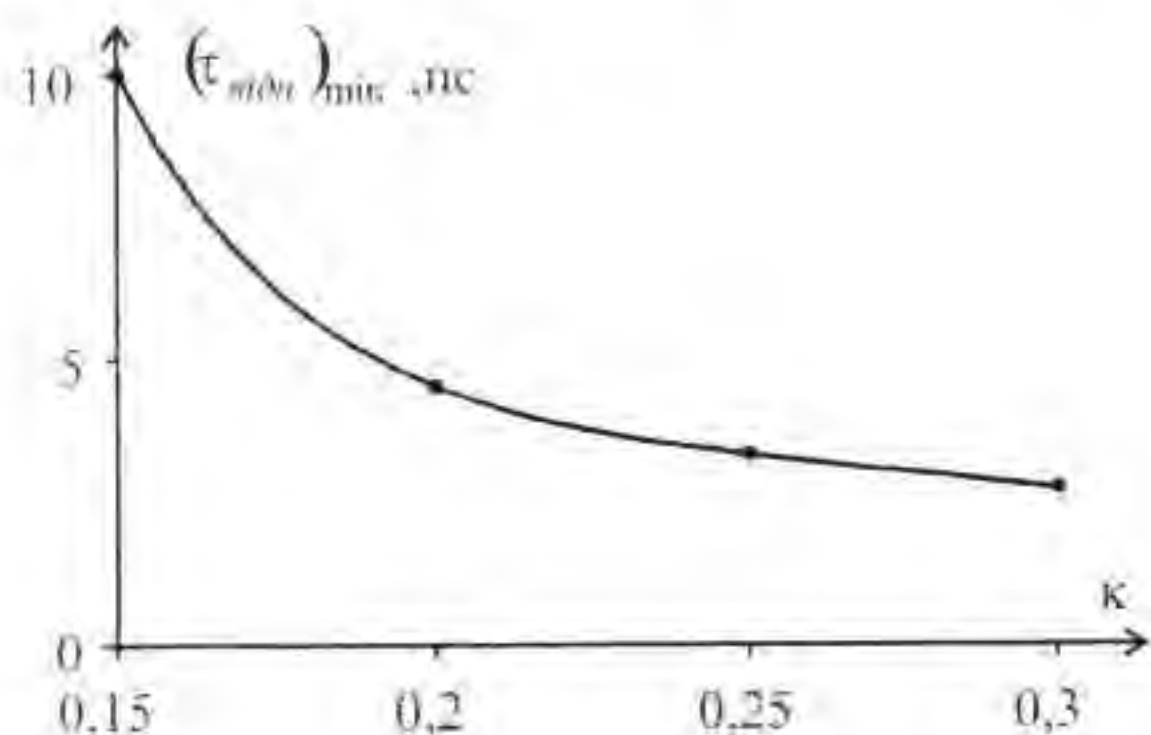


Рис. 4. Залежність мінімальної тривалості  $(\tau_{\min})_{\min}$  імпульсу від коефіцієнта  $\kappa$  модуляції;  
 $L = 0,3$  м;  $T = 2$  нс;  $\tilde{P}_0 = 1,7$ .

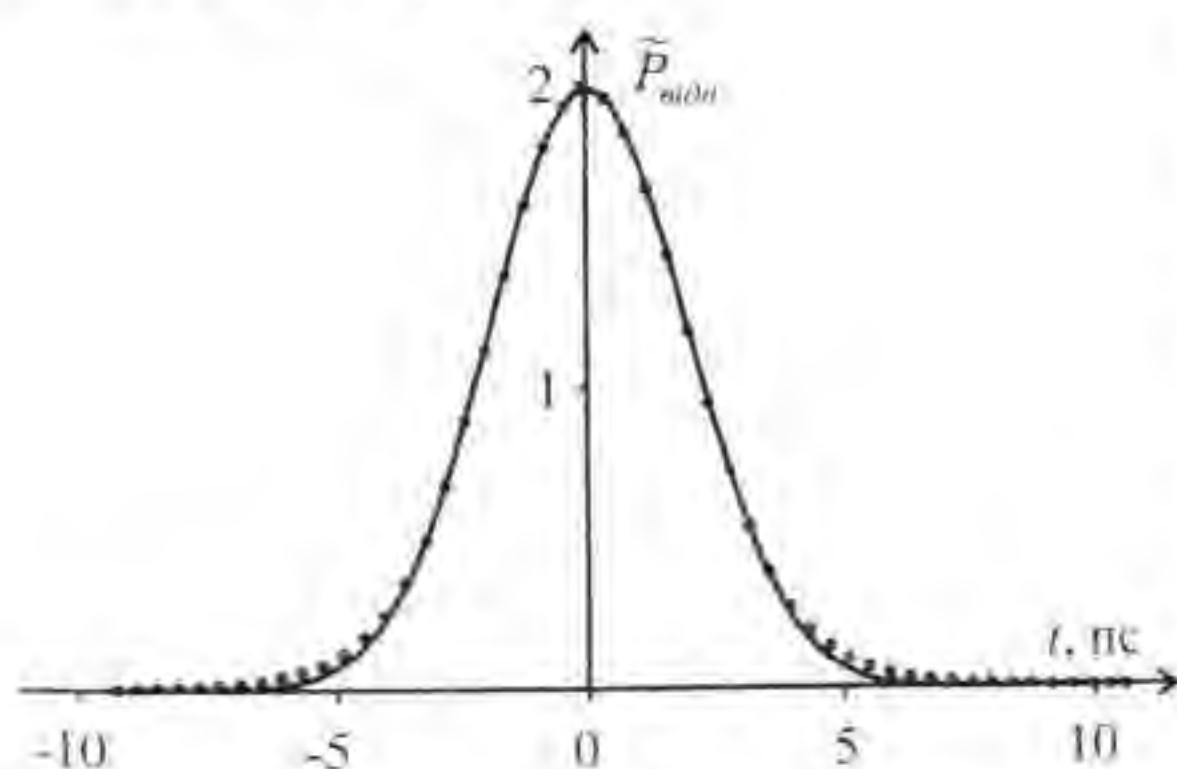


Рис. 5. Розрахована (•) огинаюча імпульсу  
( $\kappa = 0,2$ ;  $L = 0,3$  м;  $T = 2$  нс;  $\tilde{P}_0 = 1,7$ ) та її  
апроксимація (—) гаусовою функцією.

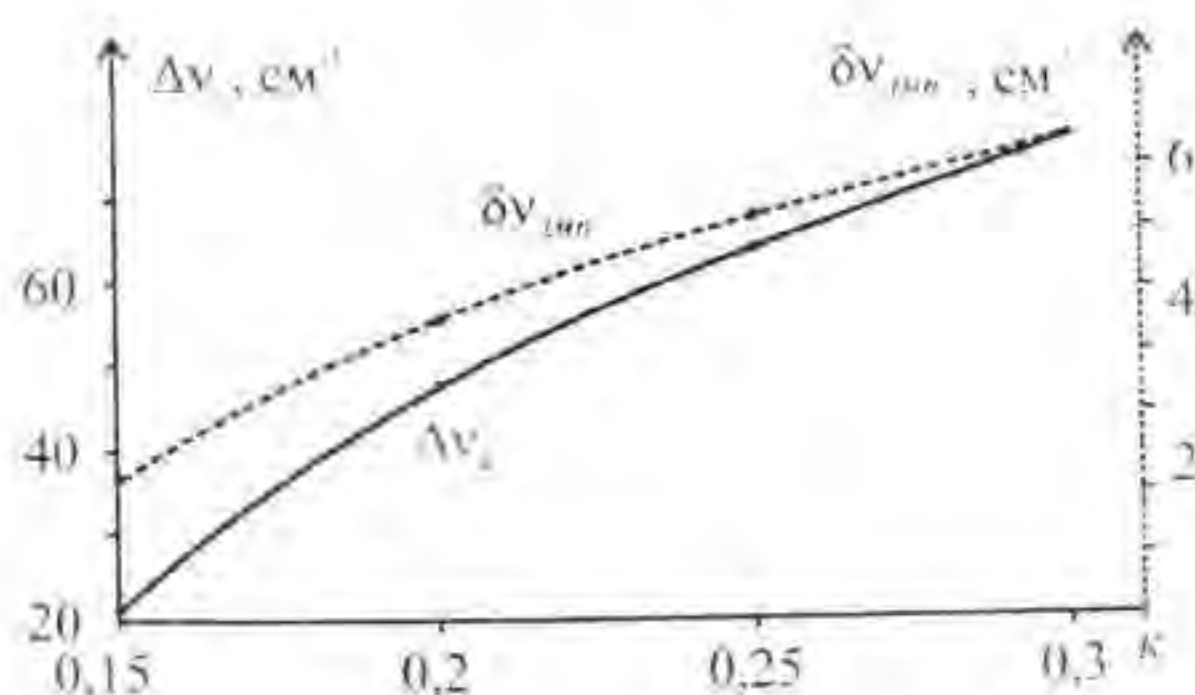


Рис. 6. Розраховані (•) та апроксимовані (—)  
залежності центральної частоти  $\Delta\nu_{\text{ц}}$  і  
напівширина  $\delta\nu_{1/2}$  спектра імпульсів від  $\kappa$ .

### Висновки

Результати моделювання перехідного ефекту у  
випадку амплітудно модульованих імпульсів

накачки вказують на те, що на вихідній межі  
самофокусуємого середовища формуються  
надкороткі оптичні імпульси з тривалістю  $\sim 1$  пс і  
амплітудою, яка перевищує потужність вхідного  
випромінювання.

Як із точки зору параметрів імпульсів, так і  
практичної реалізації методу оптимальним є  
виділення частини спектра фазово  
модульованого випромінювання, що відповідає  
останньому піку зі стоксового боку спектра.  
Оскільки ця частина спектра формується в  
момент перетину фокальною областю межі  
середовища, то її можна виділити, використавши  
оптичну систему збору випромінювання, що  
сфокусована на межу середовища.

Підбором періоду амплітудної модуляції,  
коефіцієнта амплітудної модуляції, довжини  
середовища, максимальної потужності вхідного  
випромінювання, вхідного діаметра пучка,  
самофокусуємого середовища можна в широких  
межах змінювати тривалість, частоту та період  
повторення імпульсів.

Фізичним обмеженням мінімальної тривалості  
імпульсів є інерційність ефектів, що ведуть до  
самофокусування. Для оптичного ефекту Керра у  
рідинях стала часу не перевищує 1 пс.

### Література

1. Херман Й., Вильгельми Б. Лазери  
сверхкоротких световых импульсов: Пер. с  
нем. — М.: Мир, 1986. — 368 с.
2. Wu J., Zeng H. Generation of subfemtosecond  
pulses with coherence modulation using high-  
order stimulated Raman scattering // Europhys.  
Lett. — 2004. — V. 66, N 5. — P. 661 - 666.
3. Дудка С. О., Іванісік А. І., Коротков П. А.  
Аналог перехідного випромінювання в оптиці  
// Вісник Київського університету. Сер. фіз-  
мат. науки. — 2003. — В. 4. — С. 324 - 330.
4. Дудка С. О., Іванісік А. І., Конопатський А.  
В., Коротков П. А. Перехідний ефект на межі  
поділу середовище-вакуум в умовах фазової  
само модуляції світлового імпульсу // Укр.  
фіз. журн. — 2006. — Т. 51, № 2. — С. 142 - 148.

Надійшла до редакції 25.02.2007



УДК 621.272.832.01

Іванюта О. М., канд. фіз.-мат. наук,  
Прокопенко О. В., канд. фіз.-мат. наук

## Методи підвищення власної добротності резонатора поверхневої електромагнітної хвилі

Теоретично та експериментально розглянуті методи підвищення власної добротності резонатора поверхневої електромагнітної хвилі.

Показано, що для збільшення власної добротності РПХ необхідно максимально віддалити його від стінок хвильоводу, а також застосовувати достатньо товсті діелектричні покриття з високою діелектричною проникністю.

Ключові слова: резонатор поверхневої електромагнітної хвилі, власна добротність.

O. M. Ivanyuta, Cand. Phys. & Math. Sci. (Ph.D.),  
O. V. Prokopenko, Cand. Phys. & Math. Sci. (Ph.D.)

## Methods of increase of surface electromagnetic wave resonator unloaded Q-factor

Methods of increase of surface electromagnetic wave resonator unloaded Q-factor are examined theoretically and experimentally.

It is shown that maximum moving off the resonator from waveguide walls, using thick enough dielectric substrates with high dielectric permittivity it is needed for significant increase of unloaded Q-factor of the resonator.

Key Words: surface electromagnetic wave resonator, unloaded Q-factor.

E-mail: mga@mail.univ.kiev.ua, wrld@mail.univ.kiev.ua

### Вступ

Одною з основних характеристик НВЧ резонаторів є добротність  $Q$ , яка характеризує співвідношення між втратами в системі за період коливань  $T$  та енергією  $W$ , що надходить в електродинамічну систему за той же час [1].

$$Q = \omega \frac{W}{P}, \quad (1)$$

де  $\omega$  – кругова частота коливань електромагнітного поля (ЕМП) в резонаторі, пов'язана з періодом коливань  $T$  звичайним співвідношенням  $\omega = \frac{2\pi}{T}$ ;  $P$  – потужність втрат.

Власна добротність  $Q_0$  реальних резонансних НВЧ систем може змінюватись у достатньо широких межах: від  $Q_0 \sim 10^1 - 10^2$  для металевих квазіоптичних резонаторів поверхневої електромагнітної хвилі [7] (РПХ) до  $Q_0 \sim 10^6 - 10^8$  для об'ємних циліндричних резонаторів на основі низькотемпературних надпровідників [2]. Вона залежить від багатьох параметрів системи: в першу чергу від її провідності, тангенсів кутів діелектричних та магнітних втрат, частоти, тощо.

Метою роботи є аналіз умов отримання максимальної власної добротності  $Q_0$  резонатора поверхневої хвилі, що розміщений у металевому прямокутному хвильоводі (рис. 1).

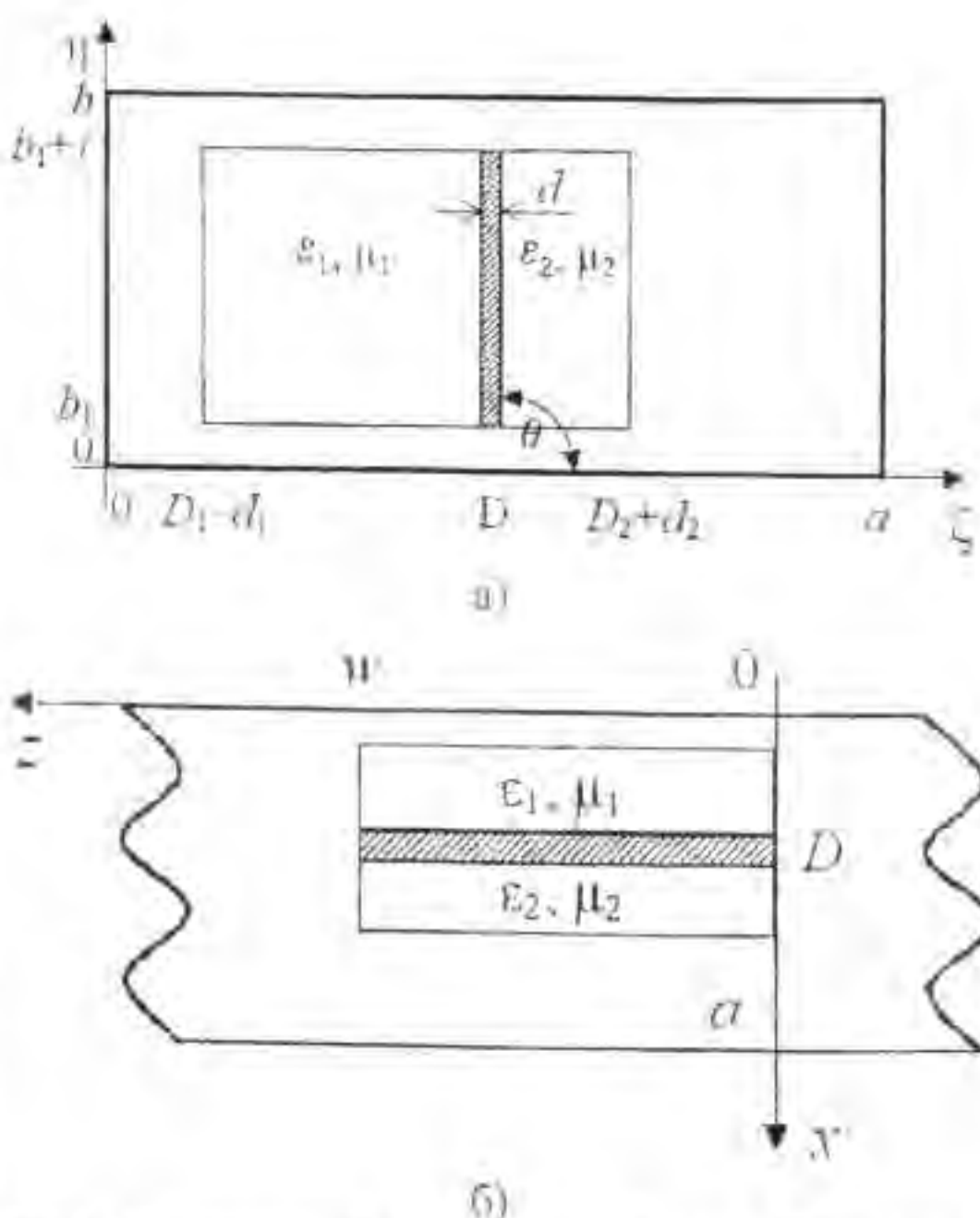


Рис. 1. Поперечний (а) та поздовжній (б) перерізи прямокутного хвильоводу з півхвильовим РПХ. Залежність від кута  $\theta$  (нуль або  $\pi/2$ ), осі  $\eta, \zeta$  – це осі  $x$  або  $y$ ;  $D_1 = D - d/2$ ,  $D_2 = D + d/2$ .

Ми не розглядаємо питання про навантажену добротність  $Q_n$  РПХ, оскільки вона суттєво залежить від зв'язку РПХ з лінією передачі НВЧ.



а цей зв'язок в свою чергу залежить від багатьох випадкових факторів (неточність розташування РПХ в хвилеводі, наявність стиків хвилевідних секцій і т.д.), уникнути яких або чітко зафіксувати на експерименті неможливо. В той же час власна добротність, вимірювана на експерименті, виявляється практично незмінною при загальній похибці вимірювань не більше 10%. Похибку експериментального значення власної добротності РПХ можна також суттєво знизити, якщо усереднити отримані результати за достатньо великою кількістю  $N$  однотипних дослідів (в нашому випадку  $N$  дорівнювало 3–5). І, таким чином, провівши  $N$  вимірів власної добротності  $Q_0$  для одного і того ж зразка і усереднивши результати було нами досягнуто точності визначення  $Q_0$ , що дорівнює приблизно 5%, що цілком достатньо для порівняння теоретичних та експериментальних результатів

### Теорія

Теоретичний аналіз РПХ був проведений за допомогою методу частинних областей (МЧО) [3]. Для цього весь простір усередині хвилеводу з резонатором було поділено на парціальні області

I область:  $0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, -\infty < z \leq 0$ ;

II область:  $0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq w$ ;

III область:  $0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, w \leq z < +\infty$ .

В кожній з областей були записані граничні умови на внутрішніх поверхнях областей, виходячи з яких було визначено загальний вигляд власних ЕМП у кожній області при довільному значенні частоти  $\omega$  [7-8]. Використовуючи умови неперервності тангенціальних компонент ЕМП у площинах при  $z = 0$  та  $z = w$ , була отримана однорідна система лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР). З умови рівності її визначника нулеві були знайдені власні частоти  $\omega_j$ ,  $j = \overline{1, N}$  нижчих  $N$  мод РПХ, а також визначене з точністю до постійного множника загальне ЕМП у кожній з областей [7-8].

Безпосередній розрахунок власної добротності під час вищевикладеного теоретичного аналізу РПХ суттєво утруднений, оскільки при врахуванні втрат у системі власні функції областей стають вже не ортогональними [4], тобто умова

$$\int_V \varphi_n(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}) dV = 0 \quad (2)$$

для власних функцій  $\varphi_n(\mathbf{r})$  та  $\varphi_m(\mathbf{r})$  перестав виконуватись;  $u(\mathbf{r})$  – функція нормування,  $\mathbf{r}$  – радіус-вектор,  $V$  – область, в якій задані функції  $\varphi_n(\mathbf{r})$  та  $\varphi_m(\mathbf{r})$ .

В той же час відомо з експерименту [7-9], що типові РПХ у 3-см та 8-мм діапазонах довжин хвиль мають власні добротності на рівні  $10^2 - 10^3$  для металевих систем і  $10^3 - 10^4$  для надпровідних систем. Це свідчить про відносну малу втрат у таких системах, що дозволяє використати для розрахунку власної добротності РПХ спрощений метод збурень [5]. При цьому, можна вважати, що наявність втрат слабо змінює розподіл поля в РПХ і значення його резонансних частот.

Будемо вважати, що середнє значення енергії ЕМП  $W(t)$  в РПХ змінюється від часу  $t$  за законом

$$W(t) = W_0 e^{-2\omega'' t}, \quad (3)$$

де  $W_0$  – енергія ЕМП у РПХ без врахування втрат,  $\omega''$  – коефіцієнт затухання. В цьому випадку закон збереження енергії має вигляд [1]

$$\frac{dW}{dt} + \Sigma = 0, \quad (4)$$

де  $\Sigma$  – середня потужність втрат (потужність, що витікає з об'єму резонатора та потужність втрат в матеріалі РПХ). Вона може бути розрахована за формулою:

$$\Sigma = P_w + P_n + P_d + P_f, \quad (5)$$

де  $P_w$  – потужність втрат у широких стінках прямокутного хвилеводу в області резонатора,  $P_n$  – потужність втрат у вузьких стінках прямокутного хвилеводу в тій же області,  $P_d$  – потужність втрат в діелектричних елементах,  $P_f$  – потужність втрат в провідній пластині (або надпровідній плівці) резонатора. За область резонатора прийнята область  $\Omega_r = \{0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, z_1 \leq z \leq z_2\}$ , де  $z_{1,2}$  – координати площин, в яких потік енергії ЕМП з РПХ зменшився в  $2e$  разів, порівняно з потоком енергії в площинах  $z = 0$  та  $z = w$  відповідно. Ця ж область визначає також об'єм, у якому визначається середня за період енергія коливань РПХ.

З урахуванням (4), (5) власна добротність РПХ  $Q_0$  може бути представлена у вигляді:



$$Q_0 = \omega_0 \frac{W_0}{P_w + P_n + P_d + P_f},$$

де  $\omega_0$  – резонансна частота певного коливання РПХ, розрахована без урахування втрат.

Потужності втрат, що входять до формули (6) можуть бути розраховані таким чином:

$$P_w = \int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^a dx \operatorname{Re} p_w(x, b, z) -$$

$$\int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^a dx \operatorname{Re} p_w(x, 0, z)$$

$$P_n = - \int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^b dy \operatorname{Re} p_n(0, y, z) +$$

$$\int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^b dy \operatorname{Re} p_n(a, y, z)$$

$$P_d = \frac{1}{2} \omega_0 |\epsilon| \lg \delta \int_V |\mathbf{E}|^2 dV,$$

$$P_f = \int_0^w dz \int_0^2 dy \operatorname{Re} p_n(D_1, y, z) -$$

$$\int_0^w dz \int_0^2 dy \operatorname{Re} p_n(D_2, y, z) -$$

$$\int_0^w dz \int_{D_1}^{D_2} dx \operatorname{Re} p_w(x, l, z),$$

де  $V$  – об'єм діелектрика.

$$p_w(x, y, z) = E_x(x, y, z) H_y^*(x, y, z) -$$

$$E_y(x, y, z) H_x^*(x, y, z)$$

$$p_n(x, y, z) = E_y(x, y, z) H_z^*(x, y, z) -$$

$$E_z(x, y, z) H_y^*(x, y, z)$$

$$p_z(x, y, z) = E_x(x, y, z) H_z^*(x, y, z) -$$

$$E_z(x, y, z) H_x^*(x, y, z)$$

знак (\*) означає комплексне спряження,  $\operatorname{Re} z$  – функція, що повертає дійсну частину від  $z$ .

Енергія ЕМП  $W_0$  в РПХ розраховується за формулою

$$W_0 = \frac{1}{16\pi} \int_{z_1}^{z_2} dz \int_{\Omega} dx dy \tilde{\epsilon}(x, y, z) |\mathbf{E}|^2 +$$

$$\frac{1}{16\pi} \int_{z_1}^{z_2} dz \int_{\Omega} dx dy \tilde{\mu}(x, y, z) |\mathbf{H}|^2$$

де  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  – комплексні амплітуди ЕМП на власній частоті  $\omega = \omega_0$ .

$$\tilde{\epsilon}(x, y, z) = \begin{cases} \epsilon(x, y), & (x, y) \in \Omega_1, 0 \leq z \leq w \\ 1, & (x, y) \notin \Omega_1 \cup \Omega_2, z \in [0, w] \end{cases}$$

$$\tilde{\mu}(x, y, z) = \begin{cases} \mu(x, y), & (x, y) \in \Omega_1, 0 \leq z \leq w \\ 1, & (x, y) \notin \Omega_1 \cup \Omega_2, z \in [0, w] \end{cases}$$

Використовуючи (6)–(11), було розраховано власну добротність  $Q_0$  півхвильового РПХ залежно від координати  $D$  його положення вздовж широкої стінки хвильоводу, від діелектричної проникності  $\epsilon$  підкладки РПХ та її товщини  $d$ , а також від відстані між РПХ та широкими стінками хвильоводу.

## Експеримент

Експериментальні дослідження власної добротності півхвильового РПХ проводилися на плівкових ВТНП  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  резонаторах, виготовлених за допомогою лазерного осадження та магнетронного розпорошення. Як підкладки ВТНП плівки використовувалися діелектричні підкладки з різними товщинами і різними діелектричними проникностями.

Розміри резонатора підбирались таким чином, щоб частота його фундаментальної моди основного класу коливань знаходилася посередині частотного діапазону експериментальної установки, що була побудована на основі стандартного панорамного вимірювача коефіцієнта стоячої хвилі та ослаблення Р2-67 [6].

На експерименті резонатор спочатку розміщувався по центру хвильовідної секції, побудованої на основі стандартного або повернутого на  $\pi/2$  8-мм прямокутного хвильоводу. В останньому випадку, оскільки вхідні та вихідні хвильоводи, що були під'єднані до експериментальної секції, були стандартними, сама секція являла собою відрізок позамежного хвильоводу для хвилі  $H_{10}$ , що розповсюджувалась у стандартному хвильоводі. Для дослідження впливу стінок хвильовода на власну добротність РПХ проводилось зміщення РПХ відносно центру хвильовідної секції окремо до однієї з широких та вузьких стінок хвильоводу.

## Отримані результати та їх обговорення

На рис 2–5 показані отримані в роботі залежності власної добротності РПХ від параметрів діелектричної підкладки та від положення РПХ у хвильоводі.

Наведені графіки показують, що за умов використання високоякісних діелектриків



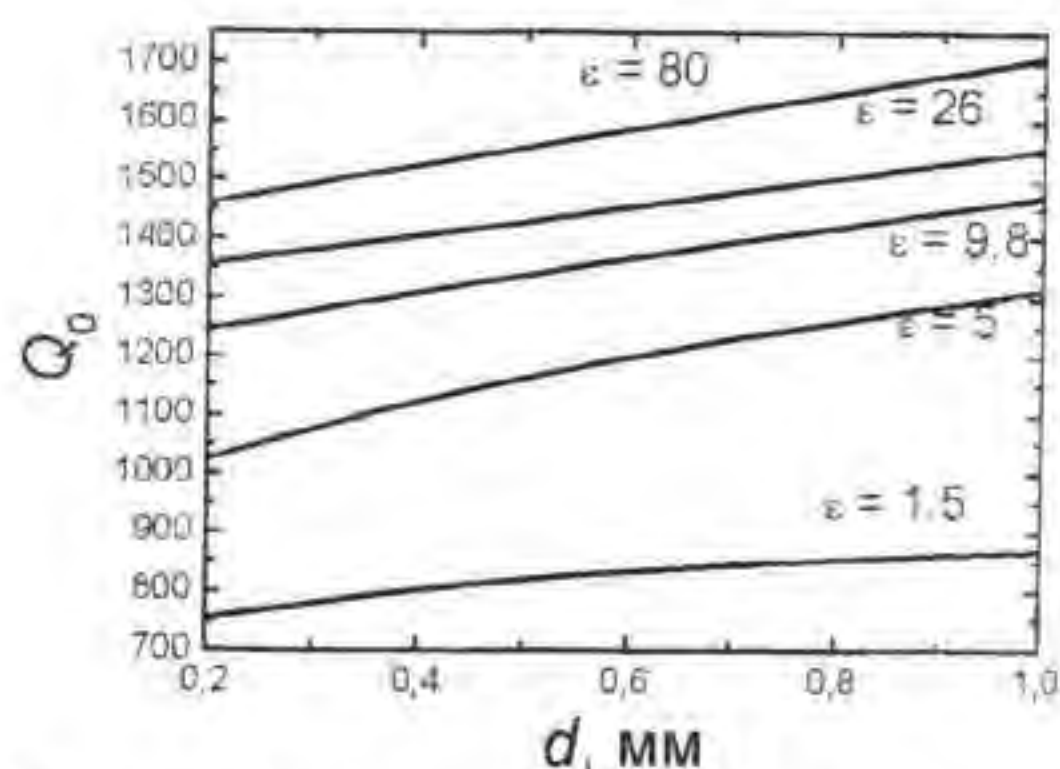


Рис. 2. Теоретична залежність власної добротності ВТНП РПХ ( $\ell=3$  мм,  $w=10$  мм,  $D=3.6$  мм) від товщини діелектричної підкладки  $d$ .

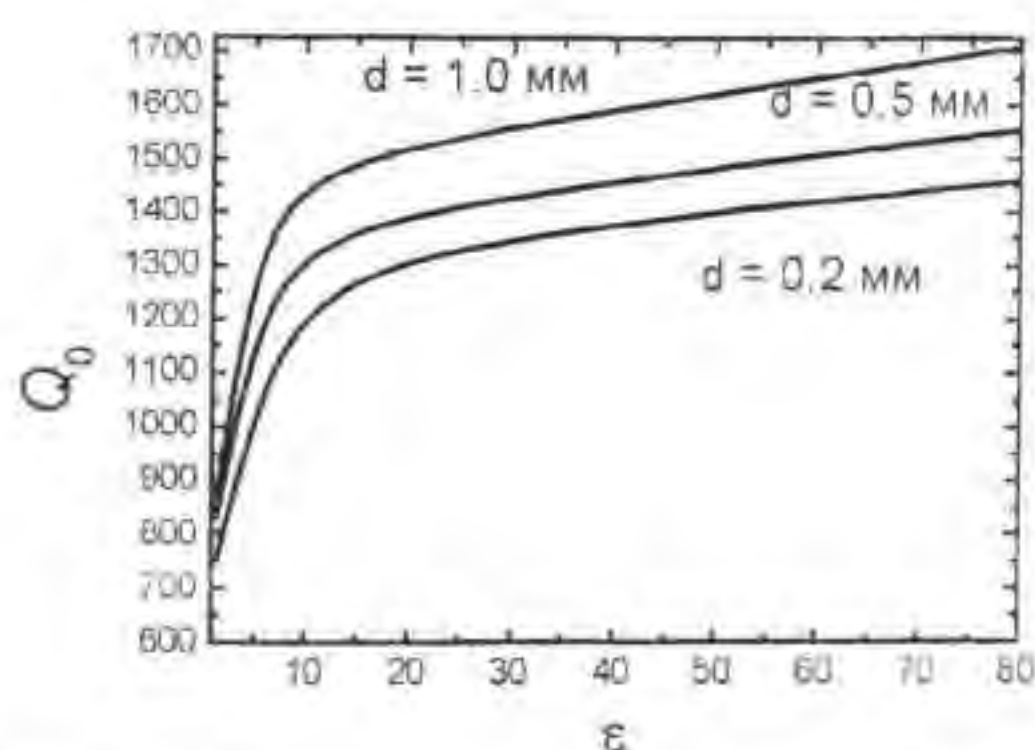


Рис. 3. Теоретична залежність власної добротності ВТНП РПХ ( $\ell=3$  мм,  $w=10$  мм,  $D=3.6$  мм) від діелектричної проникності підкладки  $\epsilon$ .

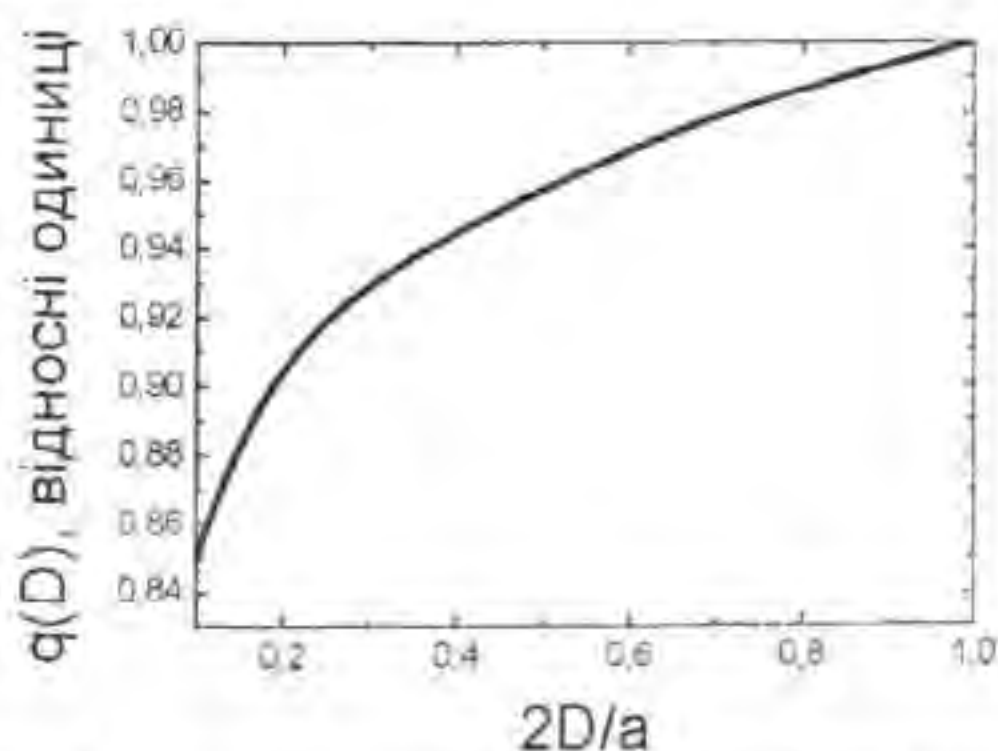


Рис. 4. Теоретична залежність нормованої власної добротності ВТНП РПХ  $q(D)=Q_0(D)/Q_0(a/2)$  ( $\ell=3$  мм,  $w=10$  мм,  $D=3.6$  мм) від положення резонатора в хвилеводі.

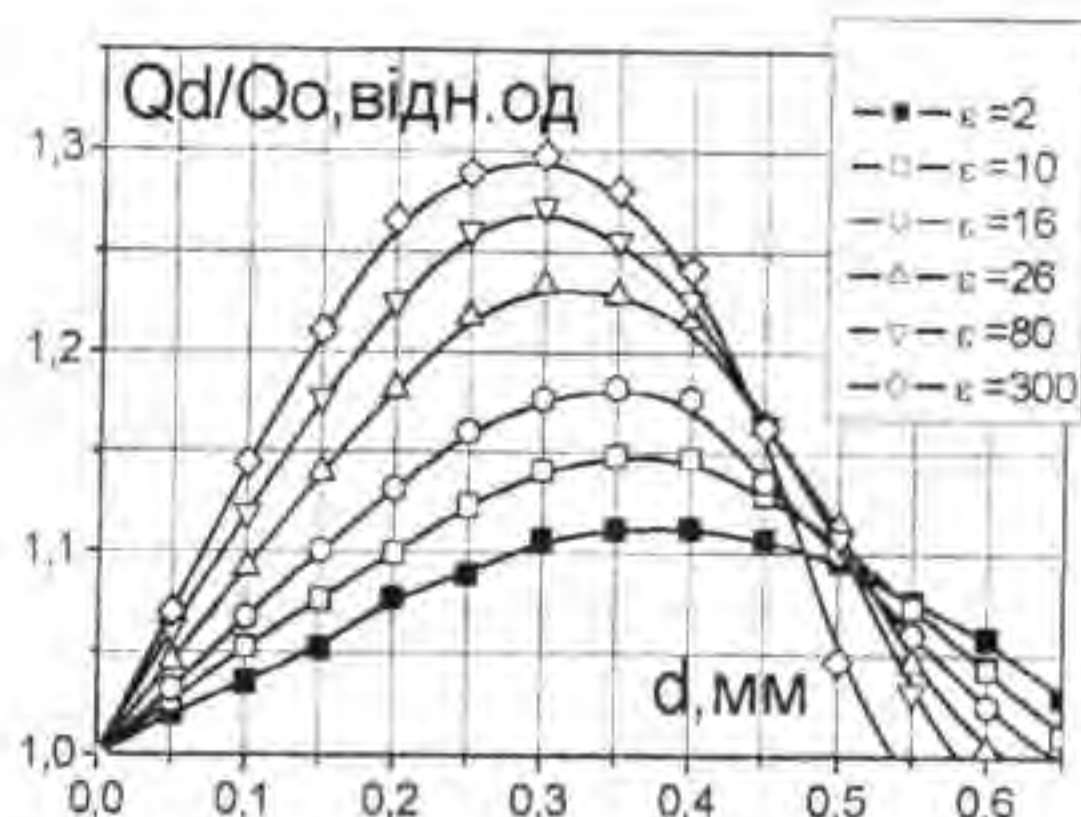


Рис. 5. Експериментальна залежність відношення добротності за рахунок втрат в діелектрику  $Q_d$  до власної добротності  $Q_0$  ВТНП РПХ ( $\ell=3$  мм,  $w=10$  мм,  $D=3.6$  мм) від діелектричної проникності  $\epsilon$  та товщини  $d$  діелектричної підкладки.

основною причиною втрат на частотах  $\sim 25 - 40$  ГГц є втрати в широких стінках хвилеводу. Зменшити ці втрати можливо лише двома шляхами: зменшуючи розміри резонатора, а, відповідно, і відстань від нього до стінок хвилеводу, або розташовуючи РПХ у позамежному хвилеводі. Найбільш перспективним шляхом підвищення власної добротності РПХ є саме другий шлях, оскільки в першому випадку при зменшенні розмірів РПХ збільшуються його резонансні частоти, що призводить до збільшення втрат у діелектричних і металевих елементах системи і особливо в ВТНП пливці. В той же час розміщення резонатора в позамежному хвилеводі не тільки дозволяє збільшити його власну добротність на 10 – 40%, а й дозволяє позбутися паразитних коливань неосновного класу.

Для зменшення впливу вузьких стінок хвилеводу бажано розміщувати РПХ по центру прямокутного хвилеводу. В протилежному випадку власна добротність РПХ може зменшуватись на 10 – 20%.

Власну добротність можна також підвищити, використовуючи товсті діелектричні підкладки, тим самим збільшуючи енергію, що запасється всередині РПХ. Але вплив товщини підкладки достатньо ефективний лише для підкладок з діелектричною проникністю  $\epsilon < 15$ . Застосування товстих підкладок на основі діелектриків з більш високою діелектричною проникністю призводить лише до збільшення власної добротності на 1 – 10%.



### Висновки

В роботі показано, що для збільшення власної добротності PRLX необхідно максимально віддалити його від стінок хвильоводу, а також застосовувати достатньо товсті діелектричні підкладки з високою діелектричною проникністю.

### Список використаних джерел

1. Вайнштейн Л.А. Электромагнитные волны. –М.: Радио и связь, 1988. –440 с.
2. Диденко А.Н. Сверхпроводящие волноводы и резонаторы. –М.: Советское радио, 1973. –256 с.
3. Миттра Р., Ли С. Аналитические методы теории волноводов. –М.: Мир, 1974. –328 с.
4. Волноводы с поперечным сечением сложной формы / Под ред. В.М. Седых. – Харьков: Вища школа. Изд-во при Харк. ун-те, 1979. –128 с.
5. Левин Л. Теория волноводов. Методы решения волноводных задач. –М.: Радио и связь, 1981. –312 с.
6. Іванюта О.М. Лінійний ланцюжок джозефсоновських контактів у резонаторі поверхневої хвилі // Дис. канд. фіз.-мат. наук. / 01.04.03. –К.: Київський нац. ун-т ім. Т.Г.Шевченка. –2003. –163 с.
7. Melkov G.A., Khushin A.M., Poustyl'nik O.D., Prokopenko O.V., Raksha V.M. Irradiation of HTS Josephson junctions with the surface wave resonator // Proceedings of the Fifth International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter, and SubMillimeter Waves –Kharkov (Ukraine), 2004. –2. –p. 128-133.
8. Іванюта О.М., Кищенко Я.І., Прокопенко О.В., Ракша В.М. Система збудження джозефсоновських контактів у резонаторі поверхневої хвилі // Український фізичний журнал. –2002. –47, №6 –с. 592-593.
9. Іванюта О.М., Прокопенко О.В., Ракша В.М., Ребіков А.І., Тягульский С.І. Вплив діелектричних підкладників на добротність напівхвильового резонатора поверхневої хвилі // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. –2002. –№ 2. –с. 328-336.

Надійшло до редколегії 20.02.2007



УДК 621.386.834; 622.383

Ільченко\* В.В., канд. ф.-м. н., доцент

**Моделювання вольт-фарадних характеристик для контакту метал-напівпровідник з кількома шарами вбудованих квантових точок**

Проведено моделювання вольт-фарадних характеристик для контакту метал-напівпровідник з кількома шарами квантових точок в області просторового заряду напівпровідника. В роботі отримано аналітичні вирази для окремих ділянок вольт-фарадних залежностей, де заряд, накопичений у квантових точках може суттєво збільшуватися і, відповідно, впливати або не впливати на величину ємності структури. Було показано, що для напівпровідників р- та n- типу ділянки, де має спостерігатися вплив шарів квантових точок на вольт-фарадну залежність, повинні знаходитись у децю різних діапазонах прикладених напруг.

Ключові слова: квантова точка, диференціальна ємність, вольт-фарадна характеристика.

\* E-mail: [ilch@uninet.kiev.ua](mailto:ilch@uninet.kiev.ua)

Дослідження вольт-фарадних характеристик контактів з бар'єром Шотткі, в області просторового заряду (ОПЗ) яких було імплантовано декілька шарів квантових точок (КТ), викликає досить великий інтерес серед науковців через те, що ці шари можуть дуже суттєво впливати на загальний вигляд вольт-фарадних характеристик (ВФХ) таких структур. У літературі досить часто наводяться приклади експериментальних ВФХ, на яких спостерігається характерний „поличкоподібний” характер поведінки ємності [1-6], проте випадок впливу на ВФХ кількох шарів КТ в ОПЗ даних структур у літературі теоретично не розглядався. В той же час, наявність кількох шарів КТ у таких структурах викликає доволі специфічні особливості ВФХ, особливо, якщо враховувати те, що в залежності від типу провідності напівпровідника, заряди, що будуть накопичуватися в шарах КТ можуть досить суттєво як збільшувати, так і

Ilchenko\* V.V., PhD.

**The modeling of capacitance-voltage dependences for the metal-semiconductor contact with several inbuilt quantum dots layers**

Modeling of several quantum dots layers installed into space charge region influence on voltage-capacitance characteristic has been carried out. Precise equations for voltage-capacitance dependence of metal-semiconductor structure taking into consideration the presence of quantum dots levels in it have been obtained.

Theoretical data for cases of low and high frequencies have been compared with experimental data. Equations for voltage-capacitance dependence calculation can be used for determination of quantum dots parameters.

Key words: quantum dot, deep level, voltage-capacitance characteristic.

зменшувати заряд основної іонізованої домішки в ОПЗ контакту.

В даній роботі будуть розглянуті випадки впливу кількох шарів КТ на ємність контакту метал-напівпровідник для р- та n- типу діодів Шотткі.

**1. Розрахунок ємності структури метал-напівпровідник р-типу з одним та кількома шарами квантових точок в ОПЗ.** Розглянемо структуру, що являє собою контакт металу з напівпровідником р- типу. Нехай у цьому напівпровіднику крім мілкового акцепторного рівня з концентрацією  $p_0$  існує ще й шар квантових точок з деякою ефективною об'ємною концентрацією  $p_1$ . Для спрощення задачі будемо вважати, що в кожній квантовій точці міститься лише один локалізований стан, що виникає внаслідок розмірного квантування.

Щоб визначити розподіл електричного поля та потенціалу в залежності від



координати, необхідно розв'язати рівняння Пуассона:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{e\rho(x)}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad (1)$$

де  $\varphi(x)$  – потенціальна енергія носія заряду,  $\varepsilon$  – діелектрична проникність напівпровідника,  $\varepsilon_0$  – діелектрична стала,  $e$  – заряд електрона,  $\rho(x)$  – густина електричного заряду.

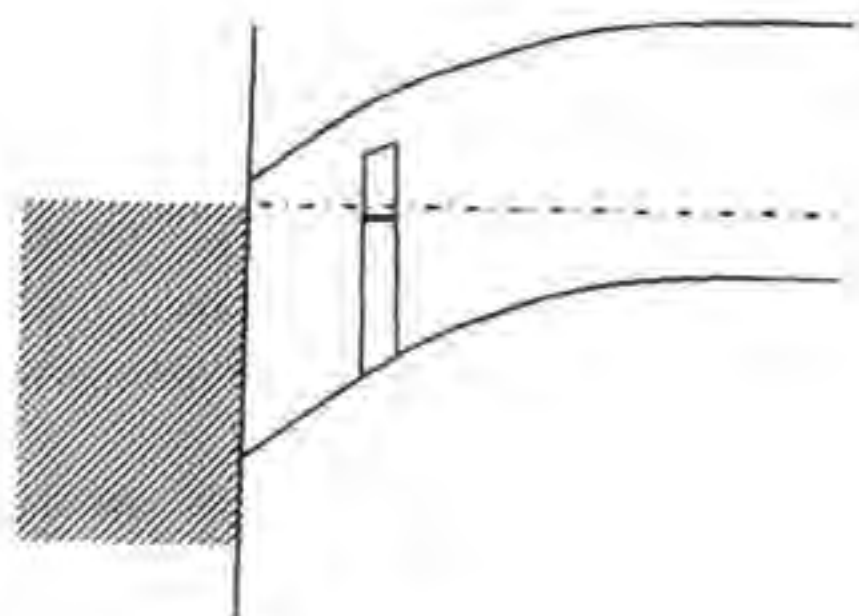


Рис.1. Зонна діаграма структури контакту метал-напівпровідник p-типу з одним шаром квантових точок

Якщо при початкових умовах, коли прикладена до структури напруга дорівнює нулю, рівень Фермі знаходитиметься нижче рівня КТ, то квантові стани КТ будуть нейтральними, а  $\rho(x) = ep_0$ . Тоді профілі електричного поля та потенціалу на проміжку  $0 < x < D$  будуть розраховуватися за добре відомими формулами:

$$E(x) = \frac{ep_0}{\varepsilon\varepsilon_0}(x - D);$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \varphi(0) + e \int_0^x E(x') dx' = \varphi(0) + \\ &+ \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \int_0^x x' p_0 dx' - \int_0^x p_0 D dx' \right] = \\ &= \varphi_0 - eV + \frac{e^2 p_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{x^2}{2} - xD \right), \end{aligned} \quad (2)$$

звідки враховуючи граничні умови  $E(0)=E_0$ ,  $E(D)=0$ ,  $\varphi(0)=\varphi_0-eV$ ,  $\varphi(D)=0$  (тут  $\varphi_0-eV$  – висота потенціального бар'єру при прикладенні до контакту напруги), при обчисленні  $\varphi(x)$  можна отримати добре відомий розв'язок рівняння Пуассона для ширини області просторового заряду:

$$D = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_0 - eV)}{p_0 e^2}}. \quad (3)$$

В цьому випадку ємність структури записується у класичному вигляді

$$C_1 = -ep_0 \frac{dD}{dV} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_0 - eV)}{p_0 e^2}}}. \quad (4)$$

Задача виглядає дещо інакше, якщо рівень Фермі при нульовій прикладеній напрузі знаходиться вище енергетичних рівнів КТ. Тоді для  $V$  менше певного значення  $V_1$ , для якого виконається умова  $\varphi(x_2) = E_1 - \mu$ , рівень квантової точки буде негативно заряджений, а починаючи із даного значення  $V_1$  та для  $V > V_1$  він почне розряджатися (тут  $E_1$  – енергія рівня точок,  $\mu$  – енергія рівня Фермі). Ідеалізуючи дану задачу, будемо вважати, що функція Фермі-Дірака при цьому може бути екстрапольована у вигляді „полички“, яка швидко змінюється до нуля при виконанні умови  $\varphi(x_2) = E_1 - \mu$ . Тоді далі, виходячи з міркувань, що потенціал у точках  $x=x_2$  та  $x=D$  запишеться у вигляді:

$$\begin{cases} \varphi(x_2) = E_1 - \mu = \varphi_0 - eV_1 + \\ + \frac{e^2 p_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{x_2^2}{2} - D_1 x_2 \right) \\ \varphi_0 - eV_1 - \frac{e^2 p_0 D_1^2}{2\varepsilon\varepsilon_0} = 0 \end{cases}, \quad (5)$$

отримаємо наступні розв'язки даної системи рівнянь:

$$\begin{aligned} D_1 &= x_2 + \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(E_1 - \mu)}{p_0 e^2}}, \\ V_1 &= \frac{\varphi_0 - (E_1 - \mu)}{e} - \frac{ep_0}{\varepsilon\varepsilon_0} x_2 \times \\ &\times \left( \frac{x_2^2}{2} + x_2 \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(E_1 - \mu)}{p_0 e^2}} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

Отже, якщо рівень КТ при початкових умовах опиняється під рівнем Фермі і має деякий початковий негативний заряд, функцію розподілу густини заряду з координатою можна представити у кусково-неперервному вигляді:

$$\rho(x) = e \begin{cases} p_0, 0 < x < x_1 \\ p_0 + p_1, x_1 < x < x_2 \\ p_0, x_2 < x < D \end{cases}. \quad (7)$$



Тепер обчислимо для нього профілі електричного поля та потенціалу. Для цього розглянемо три проміжки:

На проміжку  $0 < x < x_1$  електричне поле складатиметься з постійної складової - поля в точці 0 та складової, що залежить від координати:

$$E(x) = -\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \int_0^x \rho(x') dx' + E_0;$$

$$E_0 = -\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \int_0^D \rho(x) dx = -\frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} (p_1 x_2 + p_0 D - p_1 x_1); \quad (8)$$

$$E(x) = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} (p_0 x - p_1 x_2 x - p_0 D x + p_1 x_1 x);$$

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{p_0 x^2}{2} - x(p_1 x_2 + p_0 D - p_1 x_1) \right]$$

На проміжку  $x_1 < x < x_2$  електричне поле також складатиметься з двох частин, але постійною складовою вже буде поле в точці  $x_1$ :

$$E_1 = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} (p_0 x_1 - p_1 x_2 - p_0 D + p_1 x_1); \quad (9)$$

$$E(x) = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} [(p_0 + p_1)x - p_1 x_2 - p_0 D]$$

Потенціал структури на заданому проміжку змінюватиметься за законом:

$$\varphi(x) = \varphi(x_1) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \times \quad (10)$$

$$\times \left( \int_{x_1}^x (p_0 + p_1)x' dx' - \int_{x_1}^x (p_1 x_2 + p_0 D) dx' \right)$$

Використовуючи те, що

$$\varphi(x_1) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \times \quad (11)$$

$$\times \left( \frac{p_0 x_1^2}{2} - p_1 x_1 x_2 - p_0 D x_1 + p_1 x_1^2 \right)$$

для профілю потенціалу отримаємо:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{x^2 (p_0 + p_1)}{2} - x(p_1 x_2 + p_0 D) + \frac{p_1 x_1^2}{2} \right). \quad (12)$$

Аналогічно попереднім проміжкам, при  $x_2 < x < D$  постійною складовою електричного поля буде поле в точці  $x_2$ :

$$E_2 = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} (p_0 x_2 - p_0 D); \quad (13)$$

$$E(x) = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} (p_0 x - p_0 D).$$

Потенціал структури з координатою змінюється за законом:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{p_0 x^2}{2} - p_0 D x + \frac{p_1}{2} (x_1^2 - x_2^2) \right), \quad (14)$$

де враховано, що

$$\varphi(x) = \varphi(x_2) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \int_{x_2}^x p_0 x' dx' - \int_{x_2}^x p_0 D dx' \right),$$

$$\varphi(x_2) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{p_0 x_2^2}{2} + \frac{p_1 x_2^2}{2} - p_1 x_2^2 - p_0 D x_2 + \frac{p_1 x_1^2}{2} \right). \quad (15)$$

Ширина ОПЗ структури визначається з умови рівності потенціалу нулю в точці  $x=D$ :

$$D = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_0 - eV)}{p_0 e^2} + \frac{p_1}{p_0} (x_1^2 - x_2^2)}. \quad (16)$$

Тоді ємність структури з урахуванням заповненого рівня шару квантових точок описується наступним виразом:

$$C_2 = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_0 - eV)}{p_0 e^2} + \frac{p_1}{p_0} (x_1^2 - x_2^2)}}. \quad (17)$$

Тепер визначимо значення напруги  $V_2$ , для якої ємність структури буде описуватись цим виразом. Оскільки

$$\begin{cases} \varphi(x_1) = E_1 - \mu = \varphi_0 - eV_2 + \\ + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{p_0 x_1^2}{2} - \frac{p_1}{2} (x_2^2 - x_1^2) - p_0 D x_1 \right] \\ \varphi_0 - eV_2 + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ -\frac{p_1}{2} (x_2^2 - x_1^2) - \frac{p_0 D x_1^2}{2} \right] = 0 \end{cases} \quad (18)$$

розв'язки цієї системи мають вигляд:



$$D_2 = x_1 + \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(E_f - \mu)}{p_0 e^2}},$$

$$V_2 = \frac{\phi_0 - (E_f - \mu)}{e} - \frac{ep_0}{\epsilon\epsilon_0 2}(x_1^2 -$$

$$- 2x_1 \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(E_f - \mu)}{p_0 e^2}}) - \frac{ep_1}{2\epsilon\epsilon_0}(x_2^2 - x_1^2).$$

Отже, при напругах  $V > V_2$  для розрахунку ємності даної структури слід користуватися виразом  $C_1$ , а при  $V < V_1$  -  $C_2$ . Тобто

$$C = \begin{cases} C_1, V > V_2 \\ C_2, V < V_1 \end{cases} \quad (20)$$

Для  $p_0 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ ,  $p_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ,  $x_1 = 150 \text{ нм}$ ,  $x_2 = 170 \text{ нм}$ ,  $E_f = 0,2 \text{ еВ}$ ,  $\mu = 0,1 \text{ еВ}$ ,  $\phi_0 = 0,5 \text{ еВ}$  вольт-фарадна характеристика структури з одним шаром квантових точок має наступний вигляд:

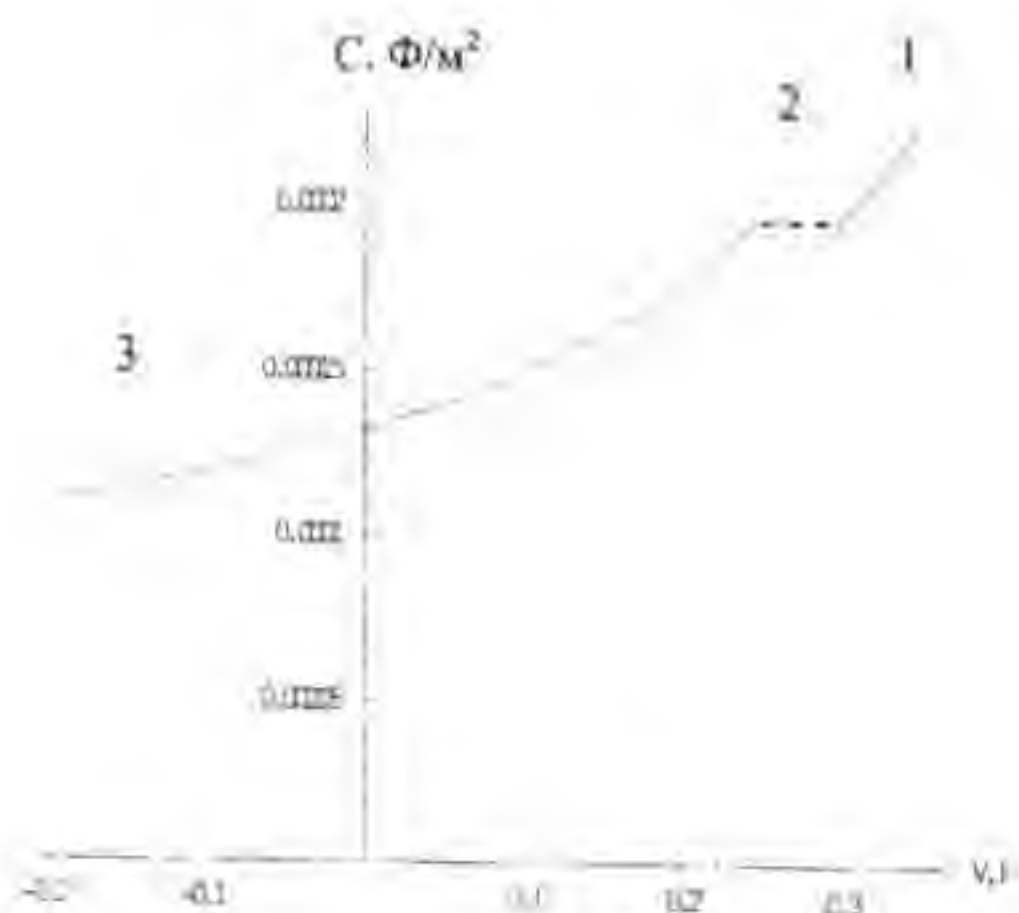


Рис.2. Вольт-фарадна характеристика структури метал-напівпровідник р-типу з одним шаром квантових точок

З рисунка 2 видно, що вплив одного шару КТ на ВФХ призводить до деякого „зсуву“  $C-V$  кривої при певному значенні напруги, так що результуюча ВФХ складається із ділянки 3, де КТ несуть той самий заряд що і заряд іонізованої домішки, певної перехідної ділянки 2, де відбувається розрядка КТ і, відповідно, зменшення електричного заряду, раніше накопиченого в них; та ділянки 1, де КТ вже повністю звільнилися від електронів і вже не впливають на ВФХ, так як заряд в ОПЗ на цій ділянці визначається лише зарядом іонізованої домішки.

Тепер можна розрахувати ВФХ для випадку кількох шарів КТ. Ця залежність вже буде дещо складнішою.

Для того, щоб обчислити вольт-фарадну залежність у цьому випадку та визначити характерні для цього випадку особливості спочатку розглянемо цю задачу для двох шарів.

Розрахунки, зроблені вище, будуть справедливими тільки до тих пір, поки не буде потрібно враховувати заряд другого шару КТ. Це відбудеться в той момент, коли ширина ОПЗ досягне певного значення  $D_2$  при певній напрузі  $V_3$ , що задовольняє умові:

$$\phi(x_4) = E_f - \mu. \text{ Тобто,}$$

$$C = \begin{cases} C_1, V > V_4 \\ C_2, V_3 < V < V_2 \end{cases} \quad \text{При напругах } V > V_2$$

вже необхідно враховувати зарядовий стан другого шару КТ. Необхідні для подальших обчислень ємності напруги  $V_3$  та  $V_4$  знайдемо нижче.

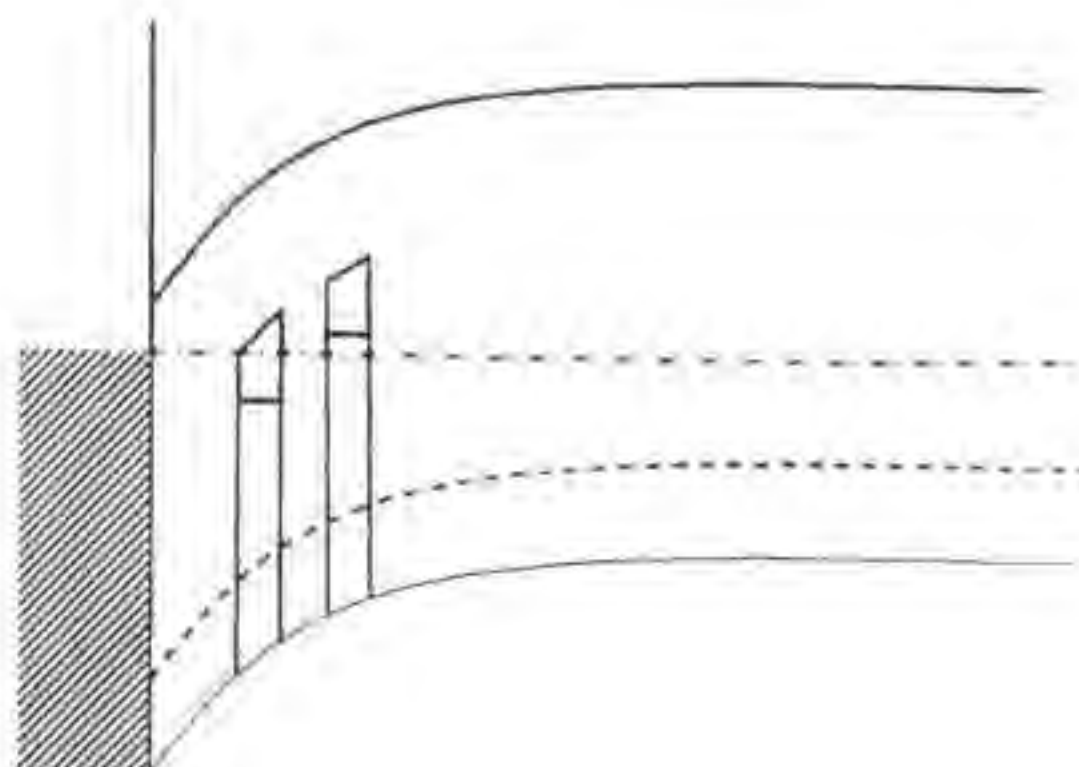


Рис.3. Зонна діаграма структури контакту метал-напівпровідник р-типу з двома шарами квантових точок

Функція розподілу заряду для цього випадку матиме наступний вигляд:

$$\rho(x) = e \begin{cases} p_0, 0 < x < x_1 \\ p_0 + p_1, x_1 < x < x_2 \\ p_0, x_2 < x < x_3 \\ p_0 + p_1, x_3 < x < x_4 \\ p_0, x_4 < x < D \end{cases} \quad (21)$$

Знайдемо вирази для профілів електричного поля та потенціалу. Тепер



будемо розглядати п'ять проміжків. Аналогічно випадку структури з одним шаром квантових точок при  $0 < x < x_1$  електричне поле буде мати постійну складову – поле в точці 0 та залежну від координати:

$$E(x) = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \times [p_0x - p_1(x_2 - x_1 + x_4 - x_3) - p_0D] \quad (22)$$

Потенціал структури на цьому проміжку буде описуватись виразом

$$\varphi(x) = \varphi(0) + e \int_0^x E(x') dx' = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[ \frac{p_0x^2}{2} - xp_1(x_2 - x_1 + x_4 - x_3) - xp_0D \right]$$

На проміжку  $x_1 < x < x_2$  електричне поле буде відраховуватись від  $E_2$  – значення поля в точці  $x_1$ :

$$E(x) = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} \times [x(p_0 + p_1) - p_1(x_2 + x_4 - x_3) - p_0D] \quad (23)$$

З урахуванням того, що

$$\varphi(x) = \varphi(x_1) + e \int_{x_1}^x E(x') dx';$$

$$\varphi(x_1) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left( \frac{p_0x_1^2}{2} - p_1x_1x_2 + \right. \quad (24)$$

$$\left. + p_1x_1^2 - p_1x_1x_4 + p_1x_1x_3 - p_0x_1D \right),$$

профіль потенціалу має наступний вигляд:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left( \frac{x^2(p_0 + p_1)}{2} - xp_1(x_2 + x_4 - x_3) - xp_0D + \frac{p_1x_1^2}{2} \right) \quad (25)$$

Для  $x_2 < x < x_3$  хід профілю електричного поля визначається наступним чином:

$$E(x) = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} [p_0x - p_1(x_4 - x_3) - p_0D] \quad (26)$$

а потенціалу:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left( \frac{p_0x^2}{2} - x(p_1(x_4 - x_3) + p_0D) + \frac{p_1(x_1^2 - x_2^2)}{2} \right) \quad (27)$$

Аналогічно попереднім проміжкам, для координати  $x_3 < x < x_4$  маємо наступні профілі електричного поля та потенціалу:

$$\varphi(x) = \varphi(x_3) + e \int_{x_3}^x E(x') dx';$$

$$\varphi(x_3) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[ \frac{p_0x_3^2}{2} - p_1x_3(x_4 - x_3) + \frac{p_1(x_1^2 - x_2^2)}{2} \right]; \quad (28)$$

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[ \frac{x^2(p_0 + p_1)}{2} - x(p_1x_4 + p_0D) + \frac{p_1(x_1^2 - x_2^2 + x_3^2)}{2} \right].$$

І нарешті, для проміжку  $x_4 < x < D$  зміна електричного поля та потенціалу буде описуватись наступними виразами:

$$E(x) = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} p_0(x - D);$$

$$\varphi(x_4) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[ \frac{p_0x_4^2}{2} + \frac{p_1}{2}(x_1^2 - x_2^2 + x_3^2 - x_4^2) - p_0Dx_4 \right]; \quad (29)$$

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[ \frac{p_0x^2}{2} - xp_0D + \frac{p_1(x_1^2 - x_2^2 + x_3^2 - x_4^2)}{2} \right].$$

Використовуючи граничну умову:  $\varphi(D) = 0$ , запишемо вираз для ширини ОПЗ:

$$D = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\varphi_0 - eV)}{e^2 p_0} - \frac{p_1(x_1^2 - x_2^2 + x_3^2 - x_4^2)}{p_0}} \quad (30)$$

Тоді ємність структури описується виразом:

$$C_3 = \frac{\epsilon\epsilon_0}{\sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\varphi_0 - eV)}{e^2 p_0} - \frac{p_1(x_1^2 - x_2^2 + x_3^2 - x_4^2)}{p_0}}} \quad (31)$$

Тепер знайдемо відповідні напруги  $V_3$  та  $V_4$ .  $C_1$  можна використовувати для напруг  $V > V_1$ . При напрузі  $V_1$  почне заповнюватись рівень першого шару точок. При напрузі  $V_2$  рівень буде вже заповнений і, починаючи з цієї напруги, для знаходження ємності структури вже можна використовувати  $C_2$ . Ємність структури буде описуватись виразом  $C_2$  лише доти, поки не почне змінювати свій зарядовий стан рівень другого шару КТ. Це



станеться при певній напрузі  $V_3$ , яку знайдемо з таких рівностей:

$$\begin{cases} \varphi(x_4) = E_l - \mu = \varphi_0 - eV_3 + \\ + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{P_0 x_4^2}{2} - \frac{P_1}{2} (x_4^2 - x_3^2) - P_0 D_3 x_4 \right] \\ \varphi_0 - eV_3 + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ -\frac{P_1}{2} (x_4^2 + x_3^2) - \frac{P_0 D_3^2}{2} \right] = 0 \end{cases} \quad (32)$$

а на основі цієї системи рівнянь отримаємо розв'язок:

$$\begin{aligned} D_3 &= x_4 + \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(E_l - \mu)}{P_0 e^2}}; \\ V_3 &= \frac{\varphi_0 - (E_l - \mu)}{e} - \frac{eP_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{x_4^2}{2} + \right. \\ &+ \left. x_4 \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(E_l - \mu)}{P_0 e^2}} \right) - \frac{eP_1}{2\varepsilon\varepsilon_0} (x_4^2 - x_3^2). \end{aligned} \quad (33)$$

І нарешті, починаючи з напруги  $V_4$ , при якій енергетичний рівень другого шару КТ вже повністю розрядиться, для опису ємності структури слід використовувати вираз  $C_4$ .

Напруга  $V_4$  визначається з умов:

$$\begin{cases} \varphi(x_3) = E_l - \mu = \varphi_0 - eV_4 + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{P_0 x_3^2}{2} - \right. \\ \left. \frac{P_1}{2} (x_4^2 - x_3^2 + x_2^2 - x_1^2) - P_0 D_4 x_3 \right] \\ \varphi_0 - eV_4 + \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{P_1}{2} (x_4^2 - x_3^2 + x_2^2 - x_1^2) - \right. \\ \left. - \frac{P_0 D_4^2}{2} \right] = 0 \end{cases} \quad (34)$$

звідки отримаємо:

$$\begin{aligned} D_4 &= x_3 + \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(E_l - \mu)}{P_0 e^2}}; \\ V_4 &= \frac{\varphi_0 - (E_l - \mu)}{e} - \frac{eP_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{x_3^2}{2} + \right. \\ &+ \left. x_3 \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(E_l - \mu)}{P_0 e^2}} \right) - \frac{eP_1}{2\varepsilon\varepsilon_0} (x_4^2 - x_3^2 + x_2^2 - x_1^2). \end{aligned} \quad (35)$$

Отже, ємність структури, що містить два шари квантових точок, визначається таким чином:

$$C = \begin{cases} C_1, V > V_4 \\ C_2, V_3 < V < V_4 \\ C_3, V < V_3 \end{cases} \quad (36)$$

Для  $p_0=10^{21} \text{ м}^{-3}$ ,  $p_1=10^{22} \text{ м}^{-3}$ ,  $x_1=150 \text{ нм}$ ,  $x_2=170 \text{ нм}$ ,  $x_3=320 \text{ нм}$ ,  $x_4=340 \text{ нм}$ ,  $E_l=0,2 \text{ еВ}$ ,  $\mu=0,1 \text{ еВ}$ ,  $\varphi_0=0,5 \text{ еВ}$  вольт-фарадна характеристика структури з двома шарами квантових точок має наступний вигляд:

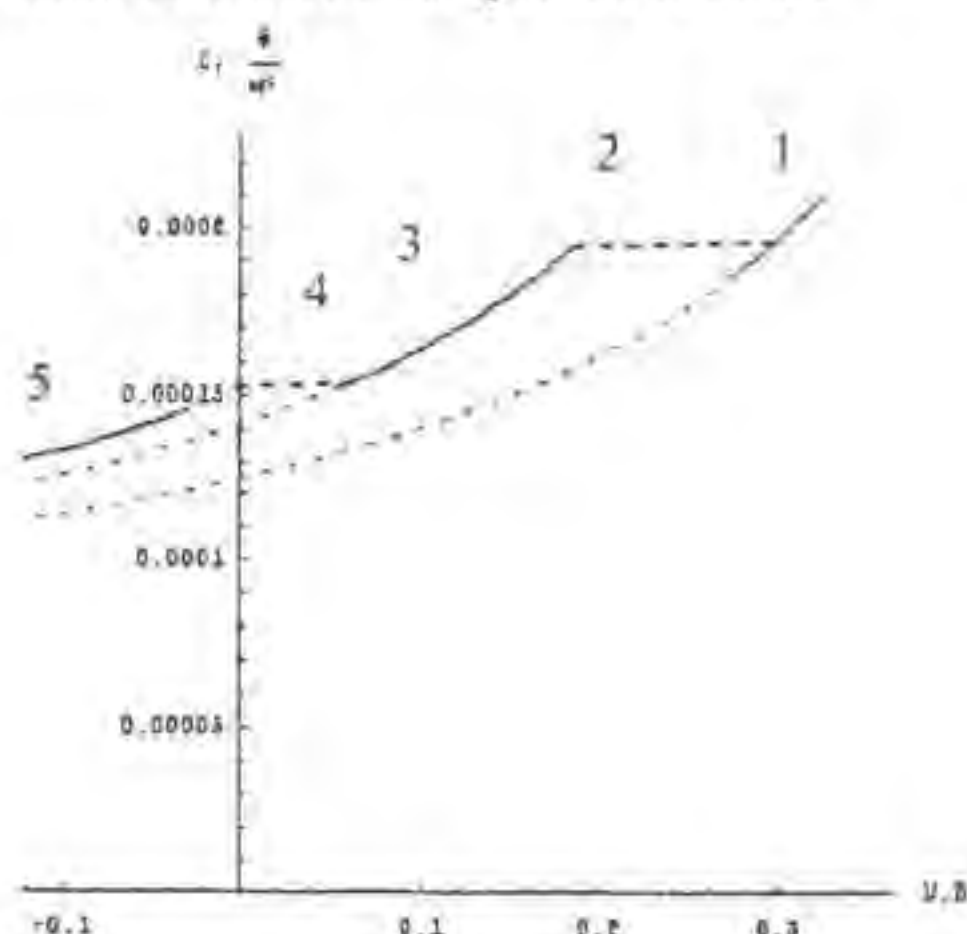


Рис.4. Вольт- фарадна характеристика структури метал-напівпровідник р-типу з двома шарами квантових точок

Як видно з отриманої кривої, тепер результуючу ВФХ можна представити як суперпозицію 5 ділянок, де дві ділянки 2 та 4 є перехідні, для яких ємність структури точно не розраховувалась, а тільки робилася її оцінка. Проте, завдяки проведеному розрахунку, можна побачити певну ідентичність виразів ємності на ділянках 1,3,5, так що тепер можна узагальнити ці вирази на випадок більшої кількості шарів КТ.

**2. Розрахунок ємності структури метал-напівпровідник n-типу з одним та кількома шарами квантових точок ОПЗ.**

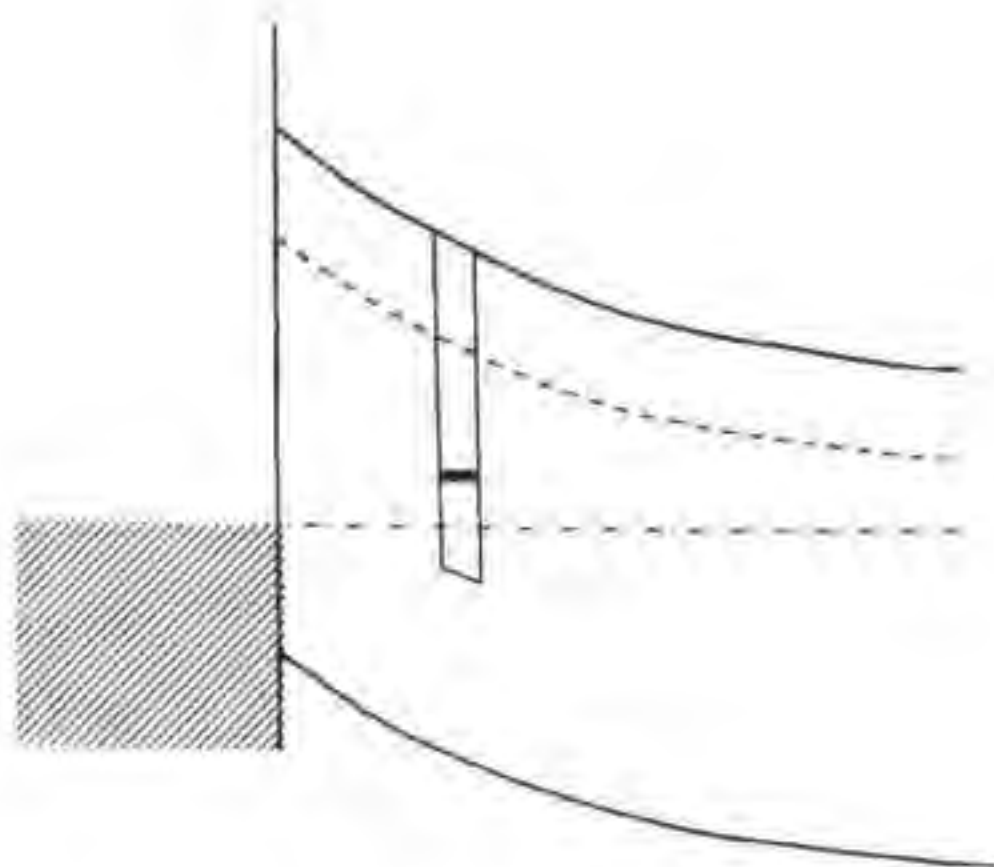


Рис.5. Зонна діаграма структури контакту метал-напівпровідник n-типу з одним шаром квантових точок



Розглянемо структуру, що являє собою контакт металу з напівпровідником  $n$ -типу. Нехай у цьому напівпровіднику крім мілкого донорного рівня з концентрацією  $n_0$  існує ще й шар квантових точок з де-якою ефективною об'ємною концентрацією  $n_1$ .

Щоб визначити електричне поле та електричний потенціал, необхідно знову розв'язати рівняння Пуассона, аналогічно тому, як це робилося в розділі 1.

Якщо положення рівня Фермі знаходиться нижче глибокого рівня домішки, то  $\rho(x) = en_0$ . Тоді профілі електричного поля та потенціалу на проміжку  $0 < x < D$  розраховуються за допомогою формул, аналогічних формулам (2), і профіль потенціального бар'єру запишеться у вигляді:

$$\varphi(x) = \varphi_0 - eV + \frac{e^2 n_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x^2}{2} - xD \right), \quad (37)$$

де граничні умови при підрахунку  $\varphi(x)$  від рівня плоских зон мають такий же вигляд, що і у розділі 1:

$$E(0) = E_0, E(D) = 0, \varphi(0) = \varphi_0 - eV, \varphi(D) = 0, \quad (38)$$

(тут  $\varphi_0 - eV$  – висота потенціального бар'єру при прикладенні до контакту напруги). У цьому випадку вираз для ширини області просторового заряду запишеться у вигляді:

$$D = \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (\varphi_0 - eV)}{n_0 e^2}}. \quad (39)$$

А ємність структури:

$$C_1 = -en_0 \frac{dD}{dV} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (\varphi_0 - eV)}{n_0 e^2}}}. \quad (40)$$

Всі ці вирази дуже нагадують вирази (3) та (4) і залишаються справедливими для тих же інтервалів напруг  $V < V_1$ . При певній напрузі  $V_1$  виконається умова  $\varphi(x_2) = E_l - \mu$ , і знову „включиться” рівень КТ (тут  $E_l$  – енергія рівня точки,  $\mu$  – енергія рівня Фермі). Оскільки хід розрахунку в цьому випадку нічим не буде відрізнятися від вже описаного в розділі 1, одразу запишемо результат розрахунку:

$$D_1 = x_2 + \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_l - \mu)}{n_0 e^2}}; \quad (41)$$

$$V_1 = \frac{\varphi_0 - (E_l - \mu)}{e} - \frac{en_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x_2^2}{2} + x_2 \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_l - \mu)}{n_0 e^2}} \right)$$

Після того як підключиться рівень КТ, функція розподілу заряду з координатою матиме такий вигляд:

$$\rho(x) = e \begin{cases} n_0, 0 < x < x_1 \\ n_0 - n_1, x_1 < x < x_2 \\ n_0, x_2 < x < D \end{cases} \quad (42)$$

Тепер знайдемо профілі електричного поля та потенціалу для цього випадку. Використовуючи той же підхід, що і в розділі 1 на проміжку  $0 < x < x_1$ , отримаємо:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \times \quad (43)$$

$$\times \left[ \frac{n_0 x^2}{2} - x(-n_1 x_2 + n_0 D + n_1 x_1) \right].$$

Так само розрахуємо профіль потенціалу на проміжку  $x_1 < x < x_2$

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[ \frac{x^2 (n_0 - n_1)}{2} + \right. \quad (44)$$

$$\left. + x(n_1 x_2 - n_0 D) - \frac{n_1 x_1^2}{2} \right].$$

Тепер вже можна за аналогією записати потенціал структури при  $x_2 < x < D$ :

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \times \quad (45)$$

$$\times \left[ \frac{n_0 x^2}{2} - n_0 D x - \frac{n_1}{2} (x_1^2 - x_2^2) \right].$$

Звідси визначається ширина ОПЗ структури з умови рівності потенціалу нулю в точці  $x = D$ :

$$D = \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (\varphi_0 - eV)}{n_0 e^2}} - \frac{n_1}{n_0} (x_1^2 - x_2^2). \quad (46)$$

Тоді об'ємна ємність структури з урахуванням заповненого рівня шару квантових точок буде описуватися виразом:

$$C_2 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (\varphi_0 - eV)}{n_0 e^2}} - \frac{n_1}{n_0} (x_1^2 - x_2^2)}. \quad (47)$$

Тепер, знайшовши напругу  $V_2$  у вигляді

$$V_2 = \frac{\varphi_0 - (E_l - \mu)}{e} - \frac{en_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x_1^2}{2} + \right. \quad (48)$$

$$\left. + x_1 \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_l - \mu)}{n_0 e^2}} \right) + \frac{en_1}{2\varepsilon \varepsilon_0} (x_2^2 - x_1^2)$$



можемо чітко визначити, як буде змінюватися сміість при різних значеннях прикладеної напруги. При напругах  $V < V_1$  для розрахунку сміості даної структури слід користуватися виразом  $C_1$ , а при  $V > V_2$  -  $C_2$ . Тобто

$$C = \begin{cases} C_1, V < V_1 \\ C_2, V > V_2 \end{cases} \quad (49)$$

Для  $n_0 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ ,  $n_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ,  $x_1 = 150 \text{ нм}$ ,  $x_2 = 170 \text{ нм}$ ,  $E_f = 0,2 \text{ еВ}$ ,  $\mu = 0,1 \text{ еВ}$ ,  $\phi_0 = 0,5 \text{ еВ}$  отримаємо  $V_1 = 0,28 \text{ В}$ ,  $V_2 = 0,35 \text{ В}$ , а вольт-фарадна характеристика структури з одним шаром квантових точок має наступний вигляд:

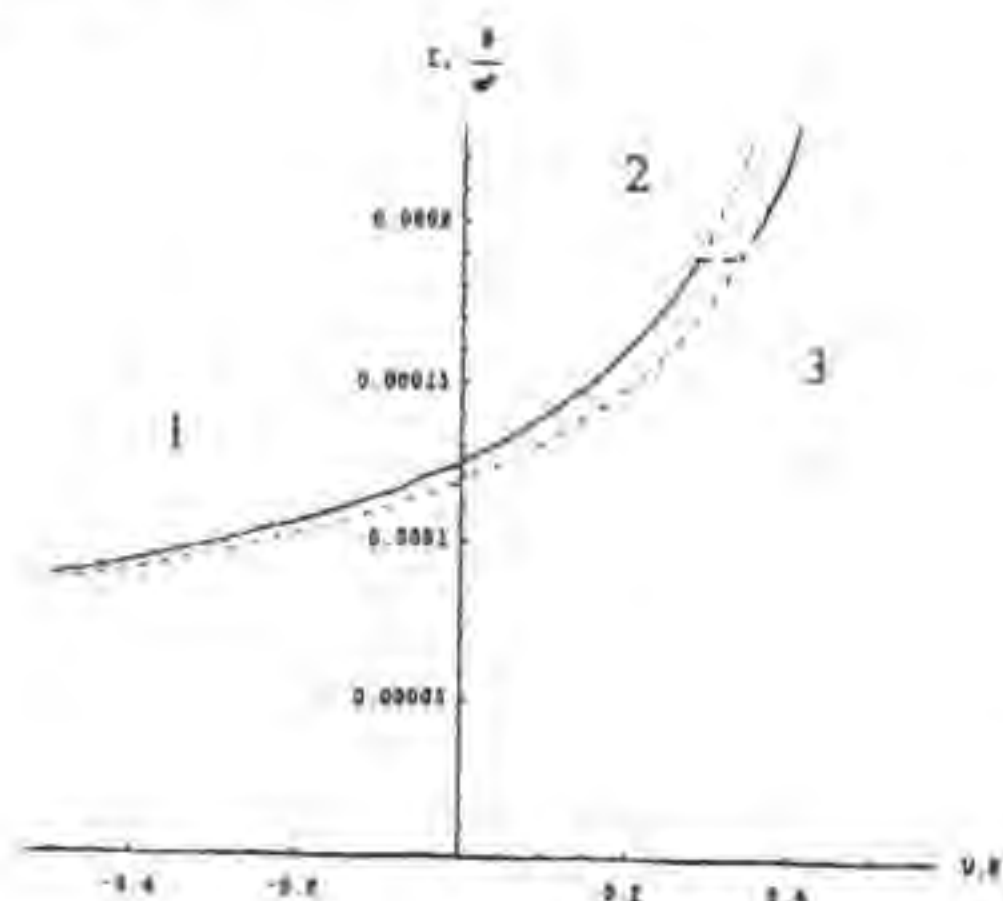


Рис.6. Вольт-фарадна характеристика структури метал-напівпровідник p-типу з одним шаром квантових точок

Слід зазначити, що у випадку p-типу напівпровідника для одного шару точок теж спостерігається специфічний „зсув” ВФХ при певному значенні зовнішньої напруги, але слід наголосити на тому, що при цьому ділянка 1 ВФХ відповідає випадку, коли всі КТ повністю вільні від електричного заряду, а ділянка 3 відповідає випадку коли КТ повністю заповнилися електронами.

Тепер припустимо, що структура містить два шари точок з однаковими енергіями рівнів та концентраціями.

До тих пір, поки при певній напрузі  $V_3$  не включиться рівень другого шару КТ, розрахунки, зроблені вище, будуть

справедливими. Тобто,  $C = \begin{cases} C_1, V < V_1 \\ C_2, V_2 < V < V_3 \end{cases}$

$$\text{де } C_1 = -en_0 \frac{dD}{dV} = \frac{\epsilon\epsilon_0}{\sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\phi_0 - eV)}{n_0 e^2}}},$$

$$C_2 = \frac{\epsilon\epsilon_0}{\sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\phi_0 - eV)}{n_0 e^2} - \frac{n_1}{n_0}(x_3^2 - x_4^2)}}. \quad (50)$$

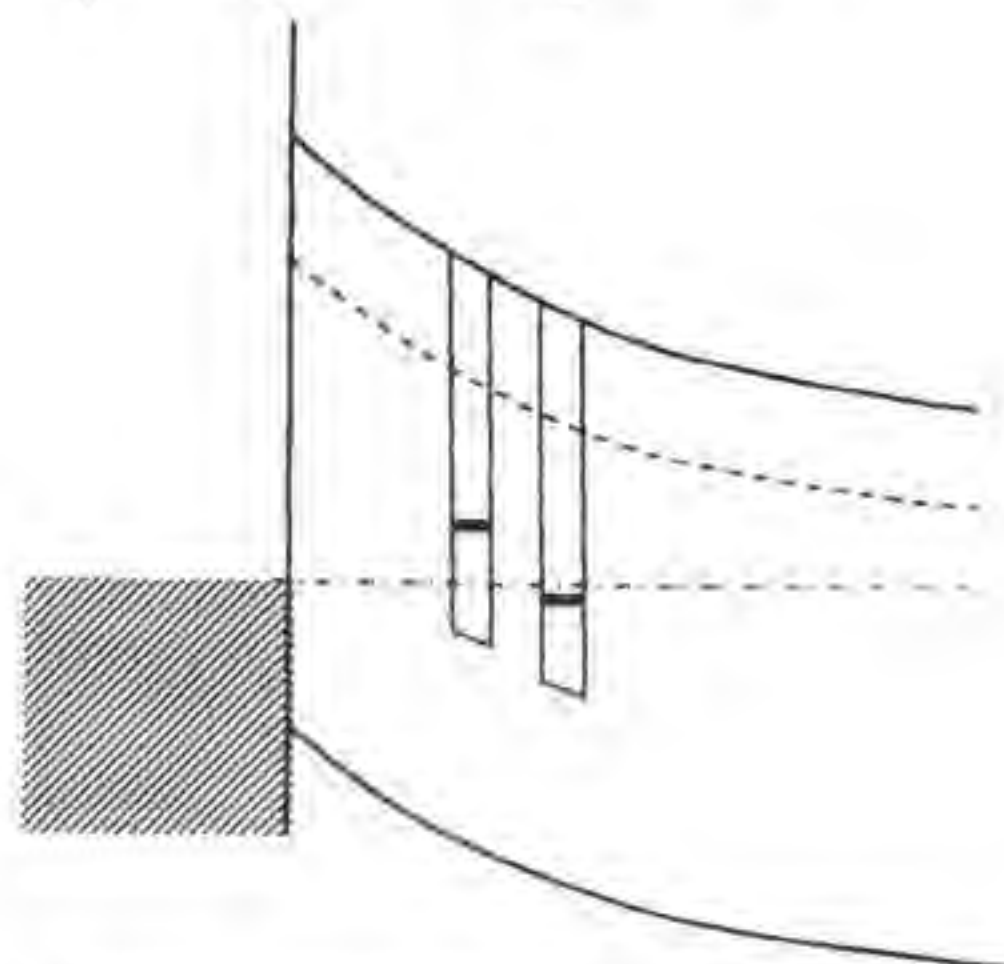


Рис.7. Зонна діаграма структури контакту метал-напівпровідник p-типу з двома шарами квантових точок

При напругах  $V > V_4$  вже необхідно розглядати участь енергетичних рівнів другого шару КТ. Відповідні напруги  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $V_3$  та  $V_4$  знайдемо нижче. Функція розподілу заряду з координатою для цього випадку матиме наступний вигляд:

$$\rho(x) = e \begin{cases} n_0, 0 < x < x_1 \\ n_0 - n_1, x_1 < x < x_2 \\ n_0 + n_1, x_2 < x < x_3 \\ n_0 - n_1, x_3 < x < x_4 \\ n_0, x_4 < x < D \end{cases} \quad (51)$$

Знайдемо вирази для профілів електричного поля та потенціалу.

Тепер будемо розглядати п'ять проміжків.

Так само, як це було зроблено в розділі 1, можна обчислити профілі потенціального бар'єру в різних діапазонах прикладених напруг.

Так, при  $0 < x < x_1$  профіль потенціалу структури буде змінюватись за таким законом:



$$\varphi(x) = \varphi(0) + e \int_0^x E(x') dx' = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[ \frac{n_0 x^2}{2} + x n_1 (x_2 - x_1 + x_4 - x_3) - x n_0 D \right]. \quad (52)$$

На проміжку  $x_1 < x < x_2$  профіль потенціалу можна записати у вигляді:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[ \frac{x^2 (n_0 - n_1)}{2} + x n_1 (x_2 + x_4 - x_3) - x n_0 D - \frac{n_1 x_1^2}{2} \right]. \quad (53)$$

Для  $x_2 < x < x_3$  хід профілю потенціалу запишеться у вигляді:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \left\{ \frac{n_0 x^2}{2} - x [-n_1 (x_4 - x_3) + n_0 D] - \frac{n_1 (x_1^2 - x_2^2)}{2} \right\}. \quad (54)$$

Аналогічно попереднім проміжкам, для координати  $x_3 < x < x_4$  маємо вираз ходу потенціалу:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[ \frac{x^2 (n_0 - n_1)}{2} - x (-n_1 x_4 + n_0 D) - \frac{n_1 (x_1^2 - x_2^2 + x_3^2)}{2} \right]. \quad (55)$$

І нарешті, для проміжку  $x_4 < x < D$  профіль потенціалу описується виразом:

$$\varphi(x) = \varphi(0) + \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[ \frac{n_0 x^2}{2} - x n_0 D - \frac{n_1 (x_1^2 - x_2^2 + x_3^2 - x_4^2)}{2} \right]. \quad (56)$$

Використовуючи граничну умову:  $\varphi(D) = 0$ , запишемо співвідношення для ширини ОПЗ:

$$D = \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (\varphi_0 - eV)}{e^2 n_0} + \frac{n_1 (x_2^2 - x_1^2 + x_4^2 - x_3^2)}{n_0}}. \quad (57)$$

Звідки ємність структури може бути обчислена у вигляді:

$$C_3 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (\varphi_0 - eV)}{e^2 n_0} + \frac{n_1 (x_2^2 - x_1^2 + x_4^2 - x_3^2)}{n_0}}}. \quad (58)$$

Тепер, за розглянутою вище методологією, знайдемо відповідні напруги  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $V_3$  та  $V_4$ .

$$V_1 = \frac{\varphi_0 - (E_i - \mu)}{e} - \frac{e n_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x_4^2}{2} + x_4 \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_i - \mu)}{n_0 e^2}} \right), \quad (59)$$

$$V_2 = \frac{\varphi_0 - (E_i - \mu)}{e} - \frac{e n_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x_3^2}{2} + x_3 \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_i - \mu)}{n_0 e^2}} \right) + \frac{e n_1}{2\varepsilon \varepsilon_0} (x_4^2 - x_1^2), \quad (60)$$

$$V_3 = \frac{\varphi_0 - (E_i - \mu)}{e} - \frac{e n_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x_2^2}{2} + x_2 \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_i - \mu)}{n_0 e^2}} \right) + \frac{e n_1}{2\varepsilon \varepsilon_0} (x_4^2 - x_1^2), \quad (61)$$

$$V_4 = \frac{\varphi_0 - (E_i - \mu)}{e} - \frac{e n_0}{\varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{x_1^2}{2} + x_1 \sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (E_i - \mu)}{n_0 e^2}} \right) + \frac{e n_1}{2\varepsilon \varepsilon_0} (x_4^2 - x_3^2 + x_2^2 - x_1^2), \quad (62)$$

Отже, ємність структури, що містить два шари квантових точок, визначається таким чином:

$$C = \begin{cases} C_1, V < V_1 \\ C_2, V_2 < V < V_3 \\ C_3, V_4 < V \end{cases}. \quad (63)$$

Для  $n_0 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ ,  $n_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ,  $x_1 = 150 \text{ нм}$ ,  $x_2 = 170 \text{ нм}$ ,  $x_3 = 320 \text{ нм}$ ,  $x_4 = 340 \text{ нм}$ ,  $E_i = 0,2 \text{ еВ}$ ,  $\mu = 0,1 \text{ еВ}$ ,  $\varphi_0 = 0,5 \text{ еВ}$  отримаємо  $V_1 = 0,11 \text{ В}$ ,  $V_2 = 0,24 \text{ В}$ ,  $V_3 = 0,39 \text{ В}$ ,  $V_4 = 0,46 \text{ В}$ , а вольт-фарадна характеристика структури з двома шарами квантових точок має наступний вигляд:

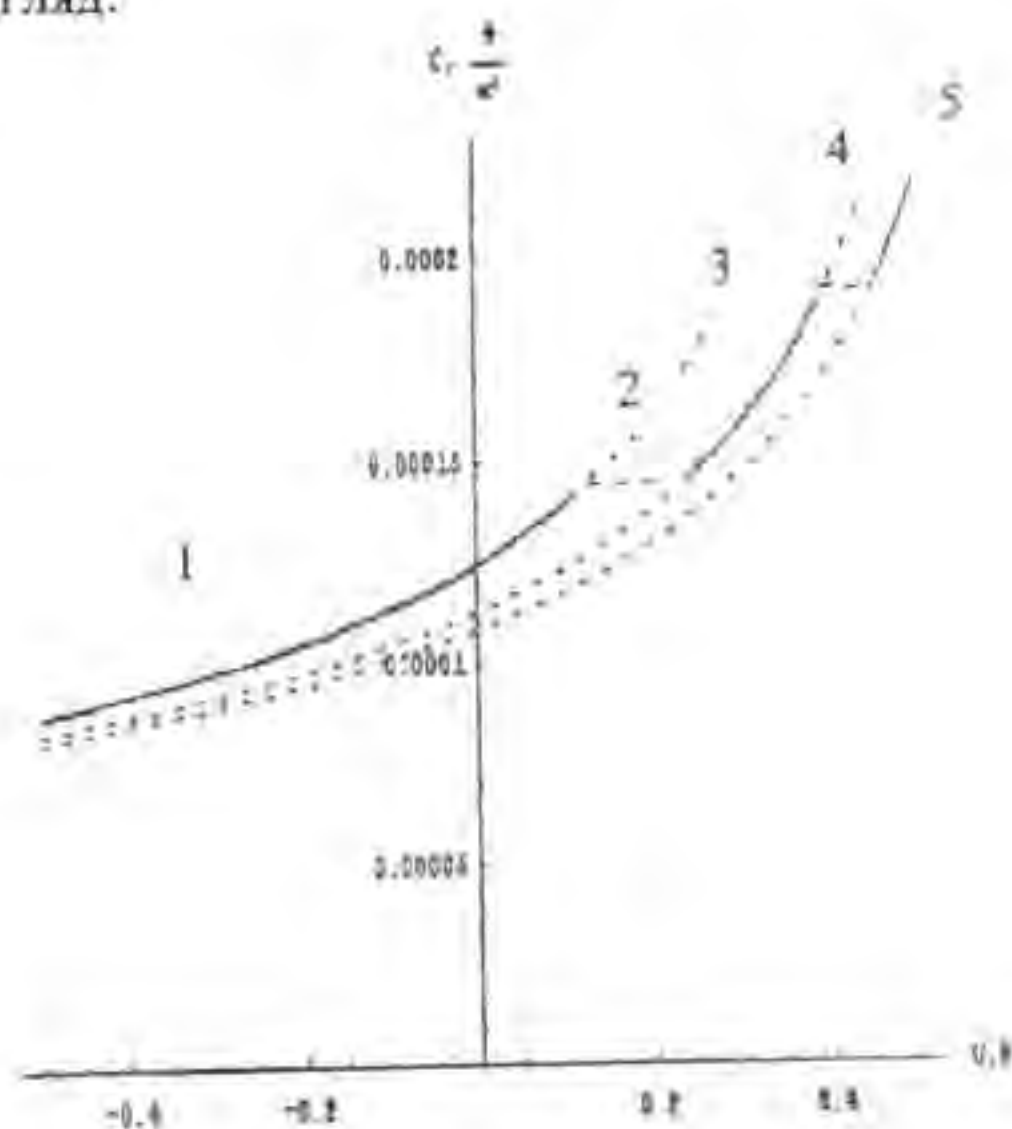


Рис.8. Вольт- фарадна характеристика структури метал-напівпровідник n-типу з двома шарами квантових точок

Як видно з графіків, вольт-фарадна залежність структури з двома шарами КТ має два перепади при певних значеннях



зовнішньої напруги. Вони є проявами впливу квантових точок на зменшення позитивного заряду в ОПЗ при заповненні електронами шарів КТ. Кожне зменшення ємності відповідає початку заповнення електронами рівнів відповідного шару квантових точок.

Слід відзначити, що дані залежності були отримані для випадку обчислення низькочастотної ємності структур і не враховували частотної залежності ємностей зумовлених шарами КТ на перехідні ділянки ВФХ.

#### Висновки:

1. Було проведено *аналітичні* розрахунки низькочастотної ємності для контактів металу з напівпровідниками *p*- та *r*- типу з одним та двома шарами квантових точок, імплантованими в їх область просторового заряду. Для обох випадків знайдено кінцеві вирази для обчислення ємності та зазначені межі їх застосування.

2. Показано, що для контактів метал-напівпровідник з різним типом провідності спостерігається специфічний „зсув” ВФХ, пов’язаний з процесами зміни зарядового стану квантових точок, що спостерігається при певних значеннях прикладених до структур зовнішніх напруг. Причому, якщо збільшення прямої напруги в структурах на основі напівпровідника *p*-типу призводить до зменшення негативного заряду, накопиченого в КТ, що спричиняє перехід до ділянки класичної ВФХ, коли впливу шарів КТ вже не спостерігається, то для напівпровідника *n*-типу „зсув” в ВФХ, пов’язаний з накопиченням негативного заряду в шарах квантових точок, призводить до навпаки – переходу від ділянки класичної ВФХ до ділянки, на якій ємність вже суттєво залежить від кількості шарів квантових точок та їх питомої поверхневої концентрації.

3. Хоча в даній роботі розрахунки були послідовно проведені лише для 2-х шарів квантових точок, отримані вирази для ємності можна узагальнити на більшу кількість (3-5) шарів квантових точок, імплантованих в ОПЗ. Наприклад, при наявності в контакті метал-напівпровідник *n*-типу третього шару квантових точок, ділянка вольт-фарадної характеристики, за яку відповідатиме цей шар, може бути описана за допомогою виразу:

$$C_4 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\sqrt{\frac{2\varepsilon \varepsilon_0 (q_0 - eV)}{e^2 n_0} + \frac{n_0 (x_1^2 - x_2^2 + x_3^2 - x_4^2 + x_5^2 - x_6^2)}{n_0}}}$$

#### Список використаних джерел

1. Yakimov A. I., Dvurechenskii A. V., Nikiforov A. I., Pchelyakov O. P. Formation of zero-dimensional hole states in Ge/Si heterostructures probed with capacitance spectroscopy // Thin Solid Films.- 1998.- Vol. 336.- P. 332-335.
2. Asperger T., Miesner C., Brunner K., Abstreiter G. Admittance spectroscopy of Ge quantum dots in Si // Thin Solid Films.- 2000.- 380.- P. 227-229.
3. Chiquito A. J., Pusep Yu. A., Mergulhao S., and Galzerani J. C. Capacitance-voltage profile in a structure with negative differential capacitance caused by the presence of InAs/GaAs self-assembled quantum dots. //Phys.Rev., - 2000.- 61, - P. 5499 – 5504.
4. Pchelyakov O.P., Bolkhovityanov Yu.B., Dvurechenskii A.V., Nikiforov A.I., Yakimov A.I., Voigtlander B. Molecular beam epitaxy of silicon-germanium nanostructures. //Thin Solid Films, - 2000.- 367, - P. 75 – 84.
5. Kapteyn C.M.A., Lion M., Heitz R., and Bimberg D. Many-particle effects in Ge quantum dots investigated by time-resolved capacitance spectroscopy. // Appl. Phys. Lett., - 2000.- 77, №25, - P. 4169 – 4171.
6. Lin S.D., Lee C.P., Plchenko V.V., Marin V.V., Shkil M.V., Buyanin A.A., Panarin K.Y., Tretyak O.V. Investigation of negative differential capacitance-voltage dependences of Schottky diodes structures with GaAs/InAs QDs.// Sensor Electronics and Microsystem Technologies.-2006.- №2, p. 3-9.

Надійшла до редакції 12.02.2007



УДК 535.373.2

Козяревич\* І. О., аспірант, Покидько О. К., студент

## Орієнтація молекулярних стіків фталоціанінів за допомогою магнітного поля

Вивчалися транспортні властивості плівок Ленгмюра-Блоджетт (ПЛБ) фталоціаніну марганцю та хрому, та термічно осаджених плівок фталоціаніну марганцю. Досліджено вплив магнітного поля на провідність плівок в залежності від напрямку магнітного поля. Виявлено залежність провідності ПЛБ фталоціаніну марганцю від напрямку магнітного поля. Встановлено залежність впливу на провідність магнітного поля від структури отриманих плівок.

Ключові слова: плівки фталоціанінів, провідність, магнітне поле.

\* E-mail: kio@univ.kiev.ua

### Вступ.

Фталоціаніни (Рс) – це органічні сполуки з високою хімічною та термічною стабільністю (вище 200 °С [1]). Молекулярні кристали фталоціанінів мають напівпровідникові властивості, крім того, фталоціаніни – це органічні барвники з дуже інтенсивним ( $\sim 10^5$ ) поглинанням, біля 670 нм. Плівки фталоціанінів можна отримувати методом Ленгмюра-Блоджетт (ЛБ) та методом термічного випаровування і фізичної конденсації у вакуумі (ФК). Механізми зародкоутворення нової фази та методи контролю структури плівок ЛБ та ФК мають різну природу, що дозволяє виготовляти матеріали з різними властивостями.

Властивості фталоціанінів привертають велику увагу при розробці різноманітних систем молекулярної електроніки і мікросенсорики [1, 2, 3]. Тому актуальною задачею є дослідження електрофізичних властивостей плівок фталоціанінів. Мета даної роботи – дослідити вплив магнітного поля на провідність плівок фталоціанінів металів, отриманих різними методами.

### Методи отримання плівок фталоціанінів та методика дослідження.

Одним з найбільш простих, розроблених на сьогоднішній день, і перспективних методів створення молекулярних впорядкованих структур вважається технологія плівок Ленгмюра-Блоджетт. Суть цього методу полягає у формуванні щільноупакованих моношарів амфифільних

I. O. Koziarevych\*, postgraduate student, O. K. Pokyd'ko, student

## Orientation of molecular sticks of phthalocyanines by magnetic field

Transport properties of Langmuir-Blodgett films (LBF) of phthalocyanine manganese and chrome and thermal evaporated films of phthalocyanine manganese were studied. The influence of direction of magnetic field on conductivity of films was investigated. Dependence of conductivity of LBF of manganese phthalocyanine from direction of magnetic field was uncovered. Dependence of influence of magnetic field on conductivity from structure of the films was established.

Key Words: phthalocyanine films, conductivity, magnetic field.

молекул на поверхні рідкої субфази з подальшим переносом їх на тверду підкладку шляхом переміщення через межу поділу рідина-повітря. В результаті на підкладці формується багат шарова молекулярна плівка. Впорядкованість плівок ЛБ у напрямку нормалі до площини підкладки є основною фізичною властивістю цих об'єктів.

ПЛБ отримано на установці, конструкція якої детально описана в роботі [4]. Молекули фталоціанінів (рис. 1) мають структуру, яка дає змогу формувати металоорганічні координаційні сполуки. На поверхні рідкої субфази метал-фталоціаніни з короткими вуглеводневими заміщувачами радикалами формують молекулярні

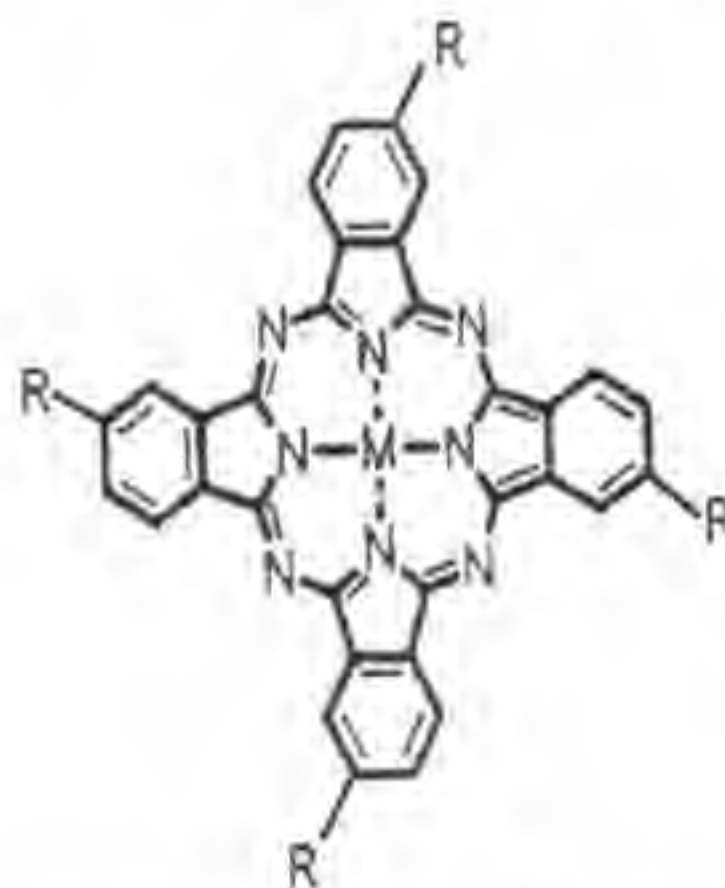


Рис. 1. Металозаміщена молекула фталоціаніну (М – атом металу).





Рис. 2 Молекулярний пакет (стік).

пакети (стіки) (рис. 2)). Метал-фталочіаніни з довгими радикалами не можуть стікуватись.

Для отримання ПЛБ використовувалися чотиризаміщені фталочіаніни марганцю ( $R=C(CH_3)_3$ ) та хрому ( $R=SO_2NHC_{18}H_{37}$ ). Фталочіанін марганцю стікувався на поверхні рідкої субфаз, а фталочіанін хрому – ні. Для нанесення плівок Ленгмюра-Блоджет використовувалися бічні поверхні кремнієвих  $p-n$  переходів.

Для термічного випаровування і фізичної конденсації у вакуумі використовували фталочіанін марганцю без заміслюючих радикалів. Плівки виготовляли за допомогою вакуумної установки ВУП-5, модифікованої для роботи із органічними сполуками. Товщина плівок становила 70-200 нм. Конденсацію проводили на кремнієвих  $p-n$  переходах. Для конденсації плівок у електричному полі до  $p-n$  переходів прикладали напругу 1,5 В.

Методикою Ленгмюра-Блоджет отримано плівки фталочіаніну марганцю з короткими заміслюючими радикалами з кількістю 2, 4 та 10 моношарів та плівки фталочіаніну хрому з довгими заміслюючими радикалами з кількістю 2, 10 та 20 моношарів. Товщина одного моношару ПЛБ фталочіаніну дорівнювала  $12 \text{ \AA}$ . Зауважимо, що наявність довгих радикалів ( $R=SO_2NHC_{18}H_{37}$ ) не давала можливості утворювати молекулярні пакети на поверхні рідкої субфаз.

Оберненозмощений кремнієвий  $p-n$  перехід є зручною підкладкою для досліджень високоомних плівок фталочіанінів тому, що на його латеральній поверхні, де розташовується молекулярна плівка, присутнє сильно-неоднорідне електричне поле, яке сприяє вирівнюванню молекулярних пакетів вздовж електричного поля і, таким чином, підвищує провідність плівки.

Вплив магнітного поля на провідність досліджувався шляхом реєстрації вольт-амперних ха-

рактеристик при різних напрямках та фіксованому значенні магнітного поля. Схема підключення  $p-n$  переходу показана на рис. 3. Під час усіх вимірів зразки розміщувалися в затемненому

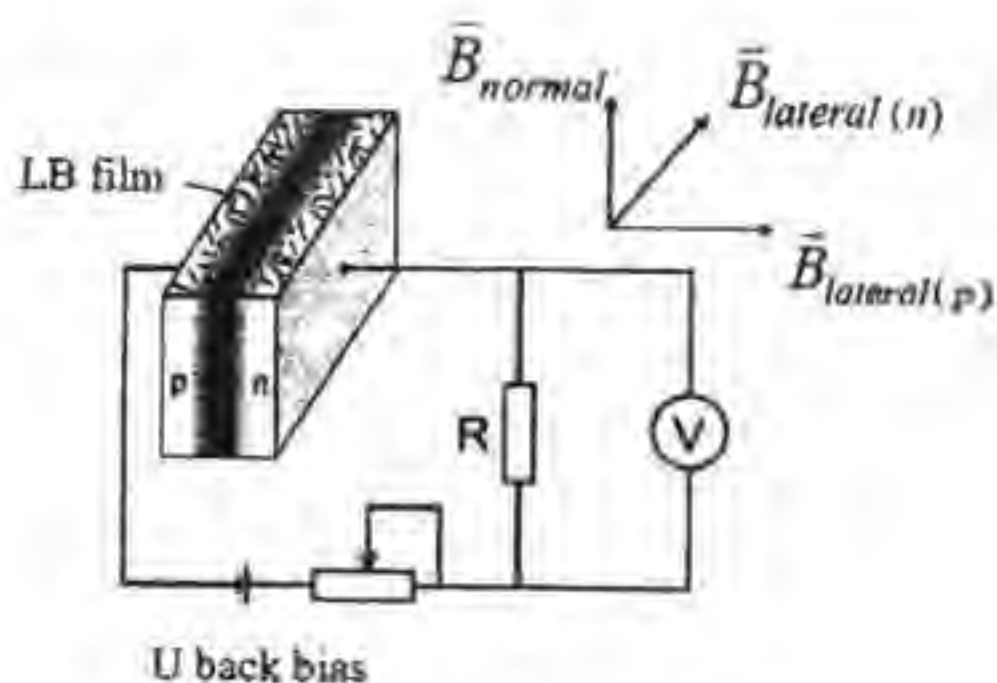


Рис. 3. Схема включення  $p-n$  переходу для дослідження впливу величини магнітного поля та його напрямку на провідність плівок фталочіанінів металів.

термостаті, щоб уникнути впливу на виміри змін кімнатної температури, зовнішньої атмосфери та світла. Клас точності зразкового резистора номіналом 1000 Ом – 0,03%.

#### Результати досліджень та їх обговорення.

Залежність зворотних вольт-амперних характеристик від напрямку магнітного поля для плівок Ленгмюра-Блоджет фталочіаніну марганцю почала проявлятися при кількості моношарів на латеральній поверхні  $p-n$  переходу, яка дорівнює 10 (рис. 4). При латеральному напрямку маг-

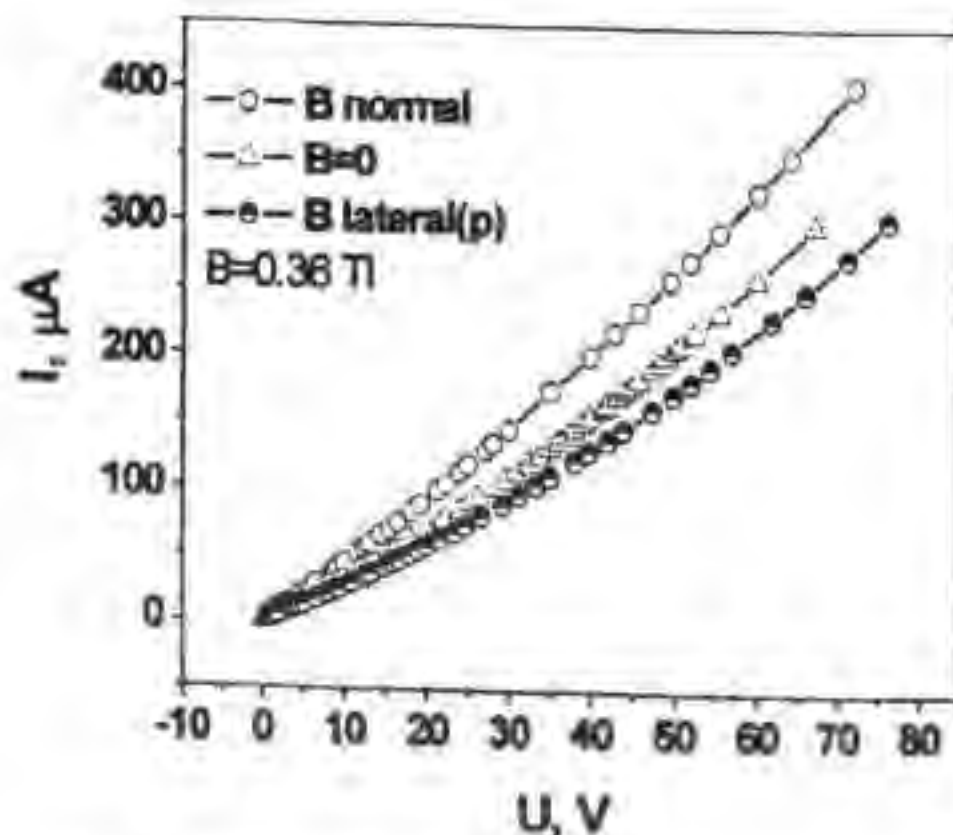


Рис. 4. Зворотні вольт-амперні характеристики ПЛБ фталочіаніну марганцю, 10 моношарів.



нітного поля ( $\vec{B}_{lateral(p)}$ ) провідність зменшується. При нормальному напрямку магнітного поля до латеральної поверхні  $p-n$  переходу провідність зростає. Величина магнітного поля дорівнювала 0,36 Тл. Ленгмюр-Блоджет плівки фталоціаніну марганцю з кількістю моношарів 2 та 4 не показали залежності провідності від магнітного поля. Також немає залежності провідності від магнітного поля в плівках фталоціаніну марганцю, отриманих термічним випаровуванням.

На рис. 5 показана залежність зворотних вольт-амперних характеристик від напрямку магнітного поля при сталому магнітному полі величиною 0,36 Тл для Ленгмюр-Блоджет плівок фталоціаніну хрому з кількістю моношарів на латеральній поверхні  $p-n$  переходу, яка дорівнює 20. Як видно з рис. 5 залежності провідності від

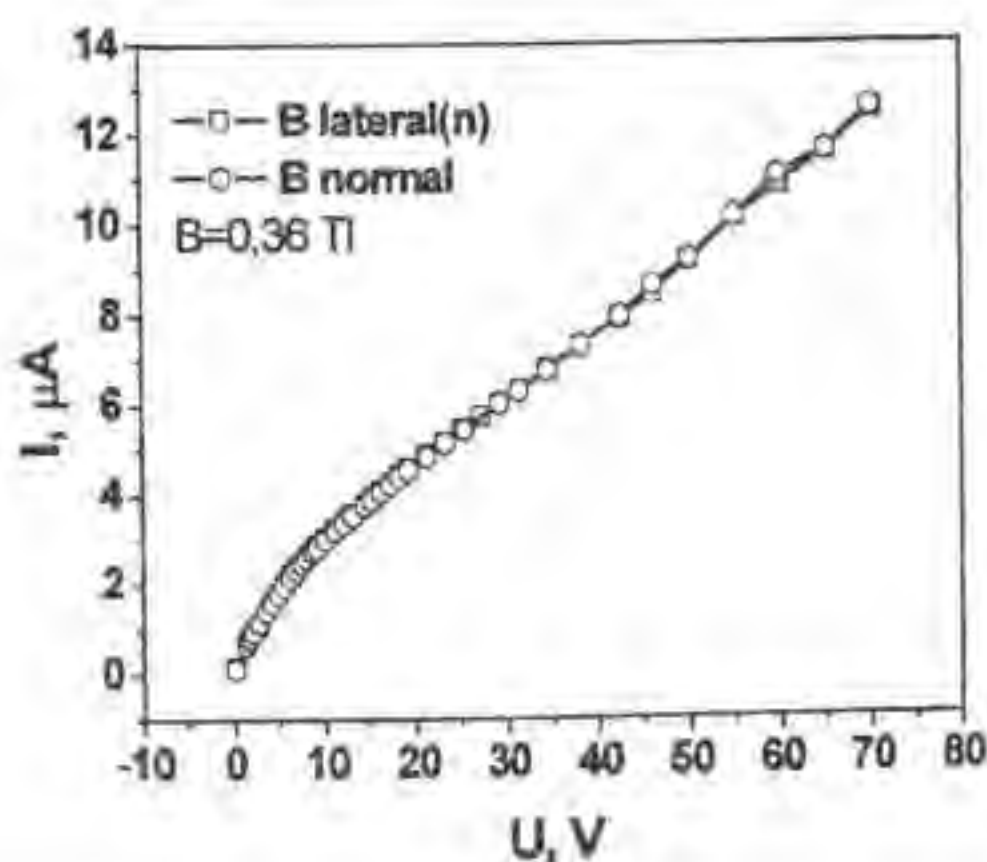


Рис. 5. Зворотні вольт-амперні характеристики ПЛБ фталоціанін хрому, 20 моношарів.

напрямку магнітного поля немає. Також немає залежності провідності і від величини магнітного поля.

Залежність провідності від магнітного поля для 10-моношарових ПЛБ фталоціаніну марганцю можна пояснити таким чином. Завдяки заміщуючим радикалам ( $R=C(CH_3)_3$ ) молекули фталоціаніну марганцю утворюють молекулярні стіки, коли знаходяться на поверхні рідкої субфази. Наявне неоднорідне електричне поле на латеральній поверхні  $p-n$  переходу впорядковує ці стіки вздовж напрямку електричного поля зриваючи, молекулярний стік з одного центра пінінгу і переміщуючи його до іншого центра пінінгу (рис. 6 б)). Після чого молекулярні пакети отримують можливість краще вирівнюватися вздовж електричного поля (рис. 6 с)), і провідність такої

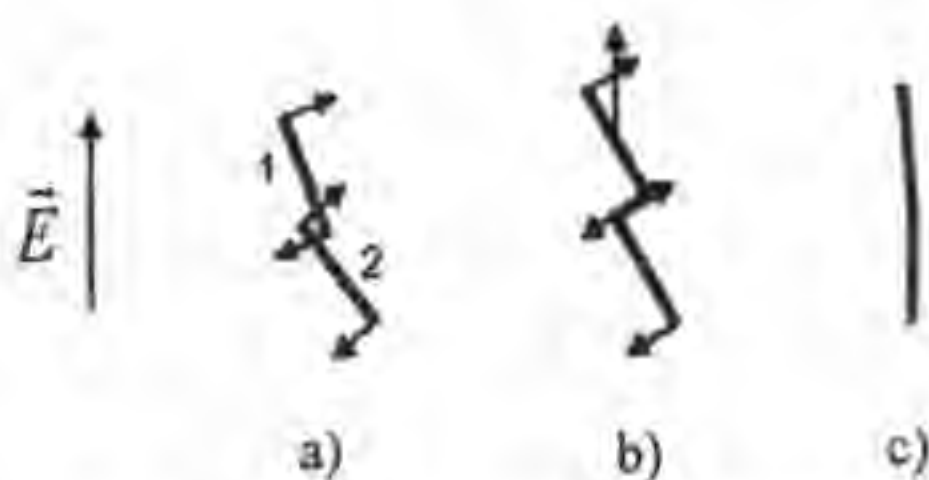


Рис. 6. а) – молекулярні пакети (стіки) в однорідному латеральному електричному полі, б) – молекулярні пакети (стіки) в неоднорідному латеральному електричному полі, с) – молекулярні стіки вирівняні вздовж латерального електричного поля.

ділянки значно (на порядки) зростає. На рис. 7 а) області з великою провідністю між молекулярними стіками відмічено кружками. У випадку нормально напрямленого магнітного поля до площини плівки (рис. 7 б)) на молекулярні стіки

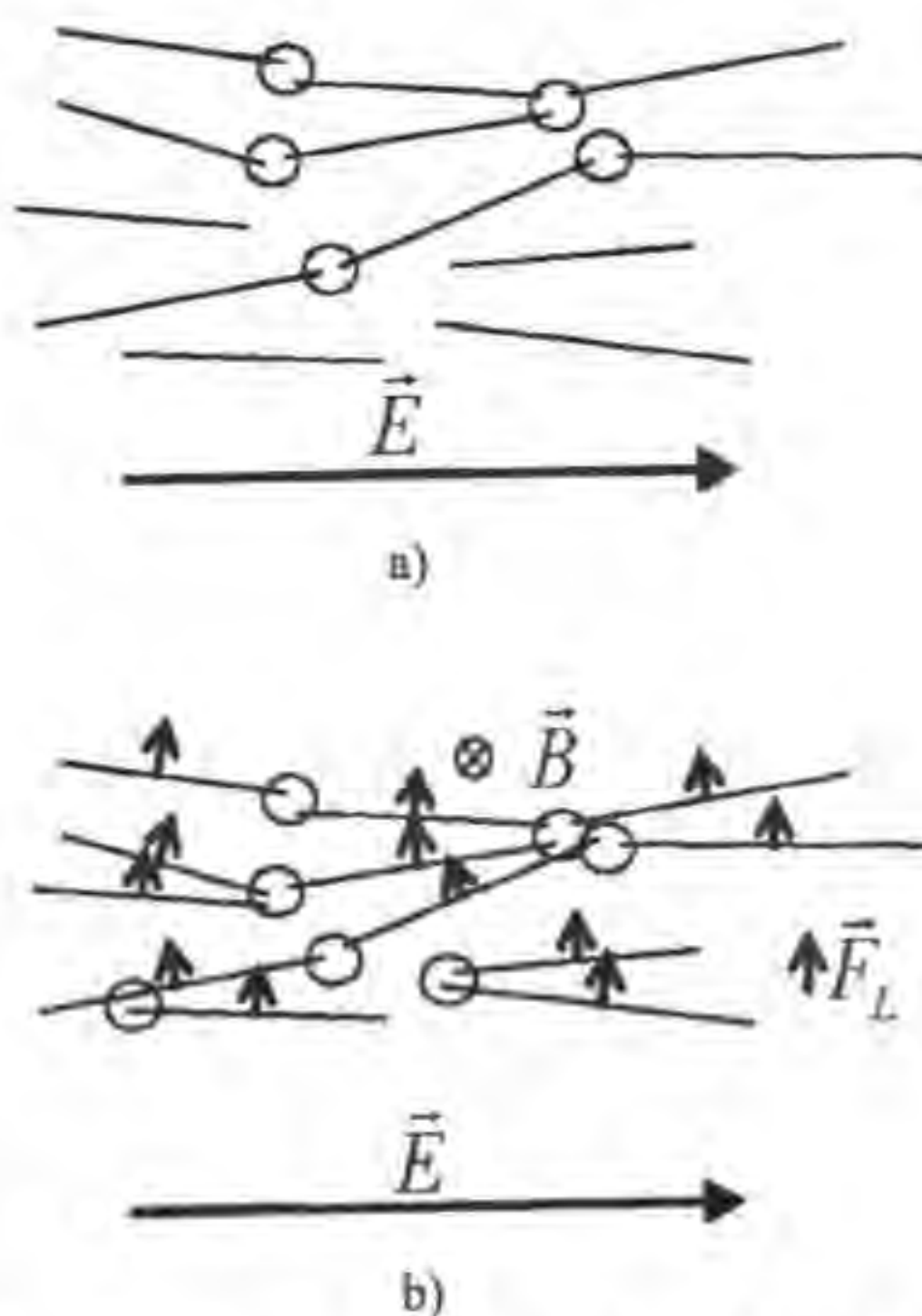


Рис. 7. а) – молекулярні стіки без присутності магнітного поля, б) – молекулярні стіки під дією нормально напрямленого до площини Ленгмюр-Блоджет плівки магнітного поля.

буде діяти ще одна сила, яка буде сприяти зриву стіка з центра пінінгу – сила Лоренца. В результаті провідність вздовж моношару плівки зростає, що й видно з рис. 4. Латеральний напрямок



магнітного поля спричинює появу сили Лоренца, яка діє в напрямку нормальному до площини плівки, і тому зв'язки між молекулярними стіками в окремих моношарах плівки руйнуються (а зростання провідності за рахунок міжмоношарової провідності неможливе внаслідок того, що провідність таких плівок в латеральному напрямку дорівнює  $1 \cdot 10^{-6}$  (Ом\*см)<sup>-1</sup>, а в нормальному напрямку до площини плівки –  $1,7 \cdot 10^{-12}$  (Ом\*см)<sup>-1</sup> [5]), що призводить до зменшення провідності вздовж шару плівки (рис. 4).

На ПЛБ фталоціаніну хрому магнітне поле не має впливу, тому що довгі радикали заважають стікуванню молекул метал-фталоціаніну, а це означає, що в моношарі плівки відсутні нанопровідники, які б поляризувалися електричним полем і могли б бути переміщені дією неоднорідного електричного поля. Тому провідність плівок фталоціаніну хрому з довгими заміщуючими радикалами не можна змінити ані дією неоднорідного електричного поля, ані дією магнітного поля.

Також відсутній вплив магнітного поля на плівки фталоціаніну марганцю, що отримані термічним випаровуванням. Структура таких плівок являє собою молекули, які лежать плазом на латеральній поверхні *p-n* переходу. Провідність такої структури теж не можна змінити ні неоднорідним електричним полем, ні його суперпозицією з магнітним полем.

### Висновки.

Отримано плівки Ленгмюра-Блоджетт чотирізаміщених фталоціанінів марганцю та хрому з різною довжиною заміщуючих вуглеводнів та термічно випарувані плівки фталоціаніну марганцю.

Виявлено залежність провідності плівок фталоціаніну марганцю з короткими заміщуючими радикалами ( $R=C(CH_3)_3$ ) від напрямку магнітного поля. При нормальному напрямку магнітного поля провідність плівок зростає, а при латеральному – зменшується.

Магнітне поле не впливає на провідність Ленгмюр-Блоджетт плівок фталоціаніну хрому з довгими заміщуючими радикалами та на термічно випарувані плівки фталоціаніну марганцю без заміщуючих радикалів.

Така взаємодія магнітного поля з плівками фталоціанінів пояснюється структурою плівок. Якщо в моношарах плівки є молекулярні пакети (стіки), то завдяки тому, що атоми металу, розташовані в центрі молекул, утворюють нанопровідник, по якому може протікати струм, на нього діє магнітне поле (сила Лоренца). Якщо в моно-

шарах плівки немає молекулярних стіків, то магнітне поле не змінює провідність таких плівок.

### Подяка.

Автори широ вдячні З. І. Казанцевій, Д. О. Гриньку, К. В. Покидько, В. З. Лозовському та О. В. Третьяку за допомогу в отриманні плівок, аналізі експериментальних результатів та підтримку роботи.

### Список використаних джерел.

1. C.C.Leznoff, A.B.P.Lever. Phtalocyanines. Properties and Applications. (VCH Publ.,N.Y. 1989)
2. J. M. Tour, Molecular Electronics, World Scientific, London, Singapoore (2003).
3. M. Pfeifer, K. Leo, X. Zhou et al. Doped organic semiconductors: Physics and application in light emitting diodes // Organic Electron. 4, 2003, P. 89-103.
4. Z. I. Kazantseva, N. V. Lavrik, A. V. Nabok, B. A. Nesterenko, Yu. M. Shyrshov. The physical properties of the dielectric Langmuir-Blodgett films on silicic surface // Ukr. Fiz. Zhurn. 34, 1989, P. 1398-1404.
5. Z. I. Kazantseva, N. V. Lavrik, A. V. Nabok. Conductivity of the tetra-substituted vanadyl and copper phthalocyanine Langmuir – Blodgett films // Poverkhnost 8, 1991, P. 87-93.
6. Petty M. C. // Proc. Intern. symp. on future electron devices "Bioelectronic and molecular electronic devices", Tokyo, Nov. 20 – 21 1985, P. 29-33.

Надійшла до редколегії 02.03.2007



УДК 621.37

Лаунець В.Л., к.ф.-м.н., Олійник В.В., к.ф.-м.н.

## Дослідження взаємодії електромагнітної хвилі з довільною структурою діелектричних пластин у хвилеводі

У роботі розв'язано граничну задачу взаємодії електромагнітного випромінювання з довільною структурою діелектричних пластин у хвилеводі. Отримані теоретичні результати експериментально перевірені для конкретних випадків періодичних структур, аналогів 1-D фотонних кристалів в оптиці. Показано, що заборонена зона ефективно змінюється за допомогою зміни геометричних розмірів структури. Це говорить про можливість застосування подібних одновимірних періодичних структур у хвильовідних пристроях та керування їхніми амплітудними та частотними характеристиками. Розв'язок більш загальної задачі, який виконано у даній роботі, дозволяє розраховувати характеристики електромагнітних полів в будь-якій точці хвильовідної діелектричної структури з наперед заданими параметрами.

Ключові слова: діелектричні пластини, довільна структура, заборонена зона, хвильовід.

E-mail: [oliynyk@univ.kiev.ua](mailto:oliynyk@univ.kiev.ua)

### Вступ

Останнім часом актуальною є задача розповсюдження електромагнітної (ЕМ) хвилі через періодичну систему діелектричних пластин. В оптиці подібні структури мають назву фотонних кристалів [1] і характеризуються наявністю так званої забороненої зони. Як правило, розглядається нормальне падіння плоскої хвилі на таку структуру, бо саме при такій постановці задачі з одного боку вдається отримати розв'язок найбільш простим чином, а з другого – отримані результати порівняно просто можуть бути розповсюджені на випадки більш складних сигналів, оскільки вони майже завжди можуть бути представлені суперпозицією плоских хвиль. Крім того, поперечні розміри пластин вважаються безмежними, що також суттєво спрощує розв'язок задачі і дозволяє отримати результати, близькі до реальних.

Періодичність параметрів структури в напрямку розповсюдження сигналу, зводить хвильове рівняння до, наприклад, рівняння Хілла, розв'язки якого відомі, або до рівнянь інших типів, які можуть бути розв'язаними методом

V.L. Launets, PhD, V.V. Oliynyk, PhD.

## The research of the interaction of the electromagnetic wave with arbitrary structure of the dielectric plates in waveguide

In this paper the boundary problem interaction between the electromagnetic radiation and arbitrary the random structure of dielectric plates placed inside in the waveguide has been solved. The theoretical results were checked up experimentally for concrete cases of periodic structures, analogues for 1-D photon crystals in optics. It has been shown that the shape of the band-gap effectively vary with changing of the geometrical sizes of structure. It tells a good deal about the possibility to apply similar 1-D periodic structures in the waveguide devices and to exert control over the amplitude and frequency characteristics. The solution of the general problem which is fulfilled in the given work allows to calculate characteristics of electromagnetic fields in any point of the waveguide dielectric structure with predetermined parameters.

Key Words: dielectric plates, arbitrary structure, band-gap, waveguide.

інтегрального рівняння, методами теорії збурень тощо [2-3]. У цих роботах також розглядається так званий метод зв'язаних хвиль, який пайбільш точно описує суть процесу взаємодії ЕМ хвилі з періодичним середовищем.

З точки зору практичного застосування подібних структур постає необхідність вирішення проблеми ефективного керування положенням та формою заборонених зон, яке можливе при зміні як геометричних, так і електричних чи магнітних параметрів пластин структури [4-6].

Наша робота присвячена дослідженню більш загальної задачі – задачі взаємодії ЕМ хвилі з системою пластин із довільними товщинами та електричними параметрами, що вміщена у стандартний прямокутний хвильовід з перерізом (а, в). Припускаємо, що поперечні розміри пластин співпадають з перерізом хвильоводу (див. Рис.1). Розв'язок такої задачі дозволить розрахувати значення полів у кожній точці структури, визначити амплітудно-частотні характеристики структури в цілому та



прогнозувати їх зміну при зміні параметрів системи пластин.

Оскільки у нашому випадку система пластин не періодична, то жодний з означених вище

методів не є придатним для отримання розв'язку. Тому ми пішли звичайним шляхом – шляхом розв'язання граничної задачі для полів ЕМ хвилі, що взаємодіє з даною структурою.

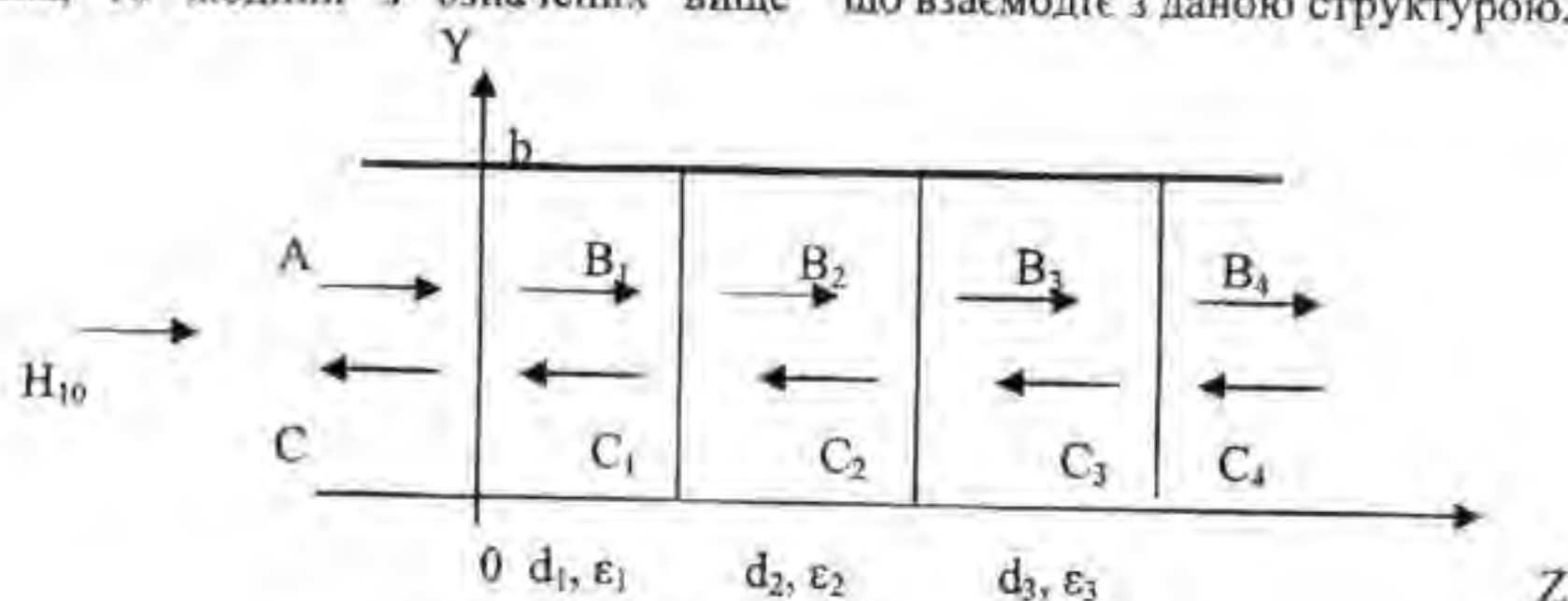


Рис.1 Система пластин з товщиною  $d_k$  та діелектричною сталою  $\epsilon_k$  у хвилеводі.  $B_k$  та  $C_k$  – амплітуди збуджених у  $k$ -тій пластині полів.

Можливість застосування такого підходу коротко обговорювалась у [3], але через технічні складнощі він не був застосований на практиці. У наш час широке розповсюдження сучасних персональних комп'ютерів з потужним математичним забезпеченням дозволяє мінімізувати ці складнощі і робить доцільним розв'язування саме граничної задачі з метою отримання необхідних результатів.

#### Постановка задачі та її розв'язок

Нехай система пластин, про яку говорилось вище, розміщено у стандартному прямокутному хвилеводі без втрат, вздовж якого зліва-на-право вздовж вісі  $Z$  розповсюджується хвиля основного типу  $H_{10}$  (рис.1). Поперечні розміри пластин, як уже говорилось вище, вважаємо рівними поперечним розмірам хвилеводу. Це припущення, відповідно до методу дзеркальних відбиттів, дозволяє вважати відповідні розміри пластин нескінченими, що суттєво спрощує математичні викладки. Початок системи координат  $X, Y, Z$  зручно розмістити на лівій поверхні першої пластини на відстані  $X/2$  від вузької стінки хвилеводу, бо саме там вектори полів  $\mathbf{E}$  та  $\mathbf{H}$  лежать в площині  $X, Y$  хвилеводу і, значить, є дотичними до поверхонь пластин, що, з одного боку, спрощує викладки, тому що означені поля без змін використовуватимуться при запису граничних умов, а з другого – жодним чином не звужує поставленої задачі.

Тепер поля падаючої на систему пластин заданої хвилі  $H_{10}$  можна, не враховуючи залежність від часу  $\text{Exp}(i\omega t)$ , представити у вигляді:

$$E_y = A \text{Exp}(-ik_z z),$$

$$H_x = (A/W) \text{Exp}(-ik_z z), \quad (1)$$

де:  $A$  – відома амплітуда,

$k_z = \omega/V_{ph} = 2\pi/\lambda_g = (2\pi/\lambda)\sqrt{\epsilon - (\lambda/2a)^2}$  – постійна розповсюдження у хвилеводі,  $\omega$  – кругова частота,  $V_{ph}$  – фазова швидкість у хвилеводі, заповненому речовиною з відносною діелектричною сталою  $\epsilon$ , (магнітну сталу вважатимемо рівній одиниці), хвильовий опір  $W = 377/\sqrt{\epsilon - (\lambda/2a)^2}$ ,  $\lambda$  – довжина хвилі ЕМ сигналу у вільному просторі.

Відбиті від передньої поверхні пластини поля матимуть вигляд, подібний до (1):

$$\begin{aligned} E_y^- &= C \text{Exp}(ik_z z), \\ H_x^- &= -(C/W) \text{Exp}(ik_z z), \end{aligned} \quad (2)$$

де  $C$  – невідома амплітуда відбитої хвилі

Слід зауважити, що наведені вище вирази для полів, які у точці  $X/2$  формально мають вигляд однорідної плоскої хвилі, нормально падаючої на границю розділу діелектриків, є результатом суперпозиції двох однорідних плоских хвиль, що падають на цю границю під кутами  $\alpha = \pm \text{Arc sin}(\sqrt{\epsilon - (\lambda/2a)^2})$  до осі хвилеводу. Тому подальші викладки будуть проводитись як для випадку нормального падіння плоскої хвилі на границю розділу діелектриків, тільки хвильовий опір  $W$  та постійна розповсюдження  $k_z$  описуватимуться формулами, наведеними у виразах (1).

Оскільки поперечні розміри пластин вважаємо нескінченими, то поля, що перевипромінені їх граничними поверхнями, шукатимемо у тому ж вигляді, що і в (1). У нашому випадку відсутні причини просторової



деформації силових ліній електричного поля  $E$  при розповсюдженні плоскої хвилі, а, значить, і хвилі  $H_{10}$  через систему пластин. Це в свою чергу означає, що у кожній із пластин буде існувати тільки хвиля  $H_{10}$ , амплітуду і фазу якої визначатимемо при розв'язуванні граничної задачі. Це твердження тим ближче до істини, чим точніше переріз кожної пластини дорівнює перерізові хвильоводу.

Поля, які перевипромінює всередину першої пластини обмежувачими її поверхнями, шукатимемо у вигляді:

перевипромінює лівою поверхнею у пластину 1:

$$E_{1y} = B_1 \exp(-ik_1 z),$$

$$H_{1x} = (B_1/W_1) \exp(-ik_1 z),$$

правою поверхнею у цю ж пластину:

$$A + C = B_1 + C_1,$$

$$(1/W)A - (1/W)C = (1/W_1)B_1 - (1/W_1)C_1,$$

$$B_1 \exp(-ik_1 d_1) + C_1 \exp(ik_1 d_1) = B_2 \exp(-ik_1 d_1) + C_2 \exp(ik_1 d_1),$$

$$(B_1/W_1) \exp(-ik_1 d_1) - (C_1/W_1) \exp(ik_1 d_1) = (B_2/W_2) \exp(-ik_1 d_1) - (C_2/W_2) \exp(ik_1 d_1).$$

Якщо припустити, що пластина 2 нескінченна вздовж осі розповсюдження хвилі  $Z$  або ідеально узгоджена з правою частиною хвильоводу (тобто  $C_2 = 0$ ), то із останньої системи матимемо систему 4-х рівнянь і стільки ж невідомих, із якої легко визначити амплітуди усіх полів.

$$B_2 = 4W_2W_3 / [(W_1 + W_2)(W_3 + W_2) - (W_1 - W_2)(W_3 - W_2) \exp(-2k_1 d_1)].$$

Для коефіцієнта відбиття  $C$  формула буде більш громіздкою і ми її не наводитимемо, оскільки отримати її із вище наведеної системи рівнянь не становить складнощів.

Подібним чином можуть бути записані формули для структури із потрібної кількості пластин довільних товщин та діелектричних сталей.

Якщо структура складається, наприклад, із  $n$  пластин, то матимемо систему із  $2n+2$  лінійних алгебраїчних рівнянь з ненульовою правою частиною і стількома ж невідомими. Такі системи, як правило, розв'язуються за допомогою відомих правил Крамера. На практиці найчастіше використовуються структури із 5...15 пластин. В такому разі слід використовувати машинні методи, які дозволяють успішно чисельно чи в символічній формі розкривати визначники великих порядків з незначними витратами часу. У даній роботі для отримання

$$E_{1y}^- = C_1 \exp(ik_1 z),$$

$$H_{1x}^- = -(C_1/W_1) \exp(ik_1 z). \quad (3)$$

Подібним чином запишуться поля і в пластині 2:

$$E_{2y} = B_2 \exp[-i(k_2 z + k_1 d_1)],$$

$$H_{2x} = (B_2/W_2) \exp[-i(k_2 z + k_1 d_1)],$$

$$E_{2y}^- = C_2 \exp[i(k_2 z + k_1 d_1)],$$

$$H_{2x}^- = -(C_2/W_2) \exp[i(k_2 z + k_1 d_1)]. \quad (4)$$

Формули для  $k_k$  та  $W_k$  можна отримати із наведених вище виразів для  $k_z$  та  $W$  (1), замінивши в них  $\varepsilon$  на  $\varepsilon_k$ ,  $k = 1, 2$ .

Вирази (1...4) дозволяють записати граничні умови на лівій ( $Z=0$ ) та правій ( $Z=d_1$ ) поверхнях першої пластини:

Величини  $C$  та  $B_2$  (при  $A=1$ ) будуть відповідно коефіцієнтами відбиття та передачі однієї пластини, розміщеної у поперечній площині хвильоводу. Коефіцієнт, наприклад, передачі  $B_2$  для однієї пластини має вигляд:

частотної залежності коефіцієнтів передачі була використана Система комп'ютерної алгебри Mathematics 5.

І, нарешті, запишемо поля для довільної  $k$ -тої пластини:

$$E_{ky} = B_k \exp[-i(k_k z + \alpha_{k-1})],$$

$$H_{kx} = (B_k/W_k) \exp[-i(k_k z + \alpha_{k-1})],$$

$$E_{ky}^- = C_k \exp[i(k_k z + \alpha_{k-1})],$$

$$H_{kx}^- = -(C_k/W_k) \exp[i(k_k z + \alpha_{k-1})], \quad (5)$$

У цих формулах координата  $Z$  змінюється тільки в межах відповідної пластини, тобто в межах від  $Z=0$  (на лівій поверхні) до  $Z_k$ , що дорівнює товщині відповідної пластини  $d_k$  – на правій. Величина  $\alpha$  – фаза, якої набула хвиля на шляху від першої пластини до пластини, у якій поля цієї хвилі розглядаються:



$$\alpha_n = k_1 d_1 + k_2 d_2 + k_3 d_3 + \dots$$

Для отримання необхідних формул для полів у попередніх та наступних пластинах необхідно у (5) провести очевидну заміну індексів  $k = k \mp 1, k \mp 2, \dots$  відповідно.

Наведені вище вирази дозволяють записати поля, а, значить, і граничні умови для кожної із заданої кількості пластин.

### Порівняння з експериментом

Для порівняння теоретичних результатів з експериментом були розраховані і виготовлені різні періодичні структури та проведені їх експериментальні дослідження у міліметровому діапазоні хвиль.

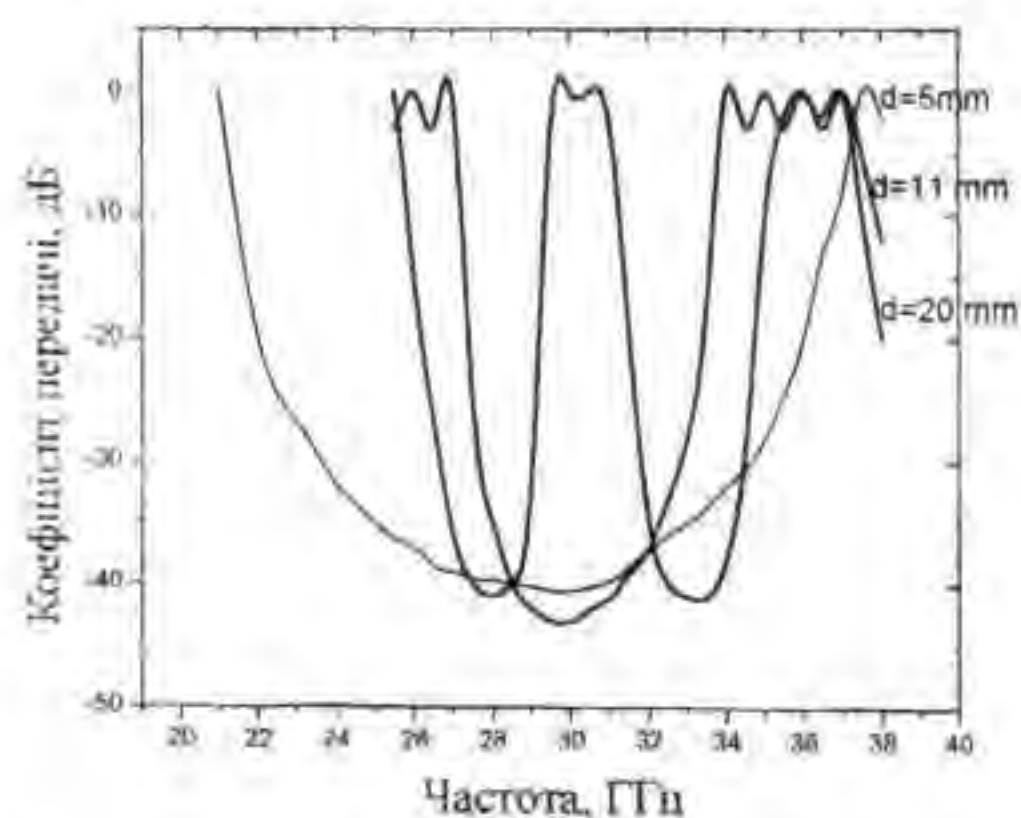


Рис. 2 Результати розрахунку залежності коефіцієнта передачі від частоти для періодичних структур з періодом  $d = d_{\text{шн}} + d_{\text{пол}} = 5 \text{ мм}, 11 \text{ мм}, 20 \text{ мм}$ .

Розрахунки було проведено для трьох структур, які представляли собою систему з п'яти пар шарів діелектриків: пінопласту з  $\epsilon = 1,2$  та товщиною  $d_{\text{шн}} = 4,5; 10,5; 19,5 \text{ мм}$  для кожної із структур відповідно і полікору ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) з  $\epsilon = 9,8$  та товщиною  $d_{\text{пол}} = 0,5 \text{ мм}$  для всіх випадків структур. Поперечні розміри пластин дорівнювали перерізові хвильоводу  $7,2 \times 3,4 \text{ мм}^2$ .

Результати розрахунків наведені на рис. 2.

На рис.3 наведені результати експерименту для подібних трьох структур, товщини пластин в яких були такими ж, як і в тих, що розраховувались, тільки поперечні розміри їх були меншими – по  $6 \times 3 \text{ мм}^2$ .

Порівняння даних експерименту та розрахунків, приведених на рис. 2 та 3, свідчить про задовільний збіг теоретичних та експериментальних результатів. Певні

розбіжності між частотними та амплітудними залежностями, особливо щодо глибини заборонених зон, можуть бути пояснені відмінністю поперечних розмірів пластин реальних структур від розрахункових.

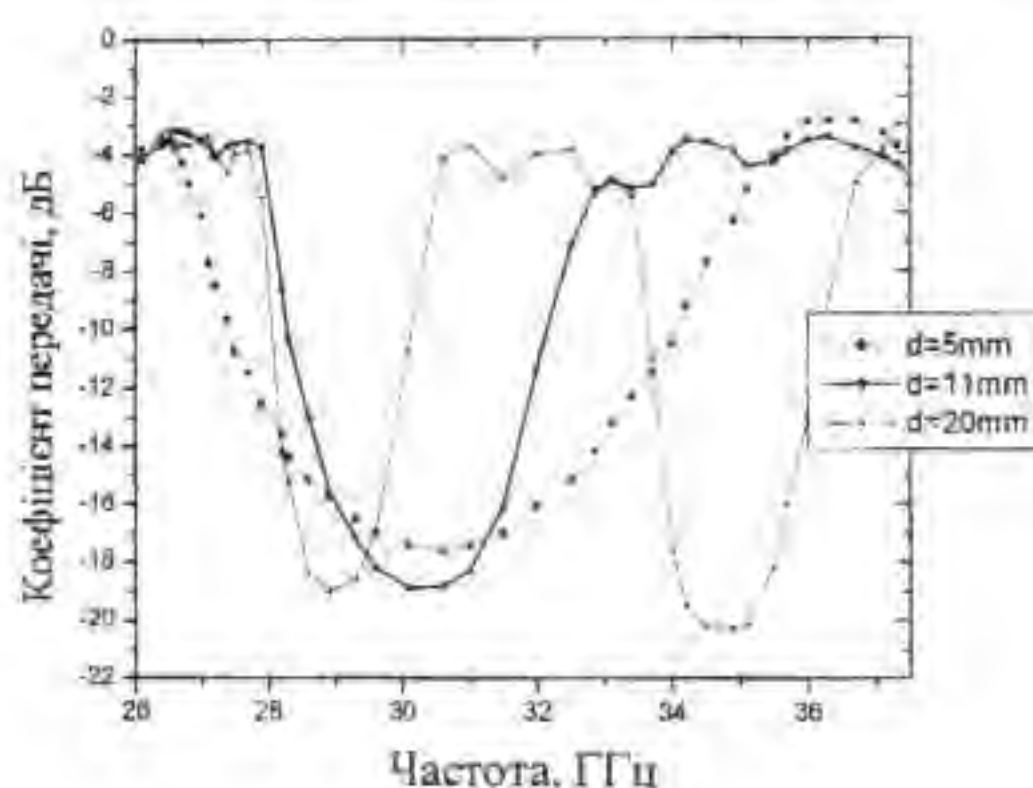


Рис. 3 Експериментальні залежності коефіцієнта передачі від частоти для періодичних структур з періодом  $d = 5 \text{ мм}, 11 \text{ мм}, 20 \text{ мм}$ .

### Висновки

Отримані формули для розрахунку взаємодії ЕМ хвилі з довільною діелектричною структурою в хвильоводі дозволяють визначити параметри ЕМ хвилі в кожній точці такої структури в необхідному діапазоні частот. Порівняння даних розрахунків з експериментальними дослідженнями показали задовільне співпадання результатів.

Теоретичні результати та експериментальні дані дозволяють зробити висновки, що отримані співвідношення можуть бути використані для розрахунків та аналізу реальних як періодичних, так і довільних структур з метою оптимізації та управління забороненими зонами для потреб високочастотної техніки.

### Список використаних джерел

1. Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics// Phys. Rev. Lett. – 1987. – 58. – P. 2059.
2. Карпов С.Ю., Столяров С.Н. Распространение и преобразование волн в средах с одномерной периодичностью// УФН, М. - 1993. - 163, - №1. - С. 63-89.
3. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973.



УДК 539.12

Максюта М.В., канд. ф.-м. наук, доцент

## Розрахунок спектра мас лептонів на основі моделі кристалоподібного простору

У роботі вперше в рамках моделі кристалоподібного простору розраховується оператор Гамільтона, власні значення якого відповідають масам лептонів. Показується, що часи життя частинок є близькими до обернених величин імовірностей спонтанних переходів між енергетичними рівнями цього спектра.

Ключові слова: спектр мас лептонів, кристалоподібний простір, полярон.

E-mail: maksyuta@mail.univ.kiev.ua

### Вступ

На даний час відомо всього шість ферміонів, які не беруть участі у сильній взаємодії. Це так звані лептони – електрон  $e^-$ , мюон  $\mu^-$  і тау-лептон  $\tau^-$ , а також відповідні їм нейтрино  $\nu_e$ ,  $\nu_\mu$  і  $\nu_\tau$  [1]. При цьому мюон і тау-лептон розпадаються за рахунок слабкої взаємодії (експериментальні дані для часів життя цих частинок такі:  $t_\mu \approx 2,197 \cdot 10^{-6} \text{ c}$ ,  $t_\tau \approx 0,303 \cdot 10^{-12} \text{ c}$  [2]), а електрон є стабільним. Маси цих частинок, а саме  $m_e \approx 0,511 \text{ MeV}$ ,  $m_\mu \approx 105,659 \text{ MeV}$ ,  $m_\tau \approx 1777 \pm 3 \text{ MeV}$ , різко відрізняються одна від одної, і, на перший погляд, їх важко впорядкувати. Покажемо, що це не так.

Розглянемо наступне рівняння Шредінгера:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{U_0}{ch^2(x/b)} \right] \psi_n(x) = \varepsilon_n \psi_n(x), \quad (1)$$

де  $m_p = \sqrt{\hbar c/G}$  – планківська маса (частинка з такою масою названа в роботі [3] максимоном). Спектр енергетичних рівнів з таким оператором Гамільтона записується у вигляді

$$\varepsilon_n = -\frac{\hbar^2 (s-n)^2}{2m_p b^2}, \quad n = 0, 1, \dots, [s], \quad (2)$$

де  $s = \left( -1 + \sqrt{1 + 8m_p b^2 U_0 / \hbar^2} \right) / 2$  (див., наприклад, [4]). Із формули (2) легко бачити, що енергетичні рівні  $\varepsilon_{[s]}$ ,  $\varepsilon_{[s]-1}$  і  $\varepsilon_{[s]-4}$  відповідають

M.V. Maksyuta, PhD, Assoc. Prof.

## The calculation of leptons mass spectrum on the basis of crystal-like space model

In the work for the first time in the framework of a crystal-like space model, it is calculated Hamilton operator which own values correspond to lepton masses. It is shown, that particles life times are close to reciprocal probability values of spontaneous transitions between the spectrum power levels.

Key Words: lepton mass spectrum, crystal-like space, polaron.

масам  $m_e$ ,  $m_\mu$  і  $m_\tau$ . Дійсно, із рівняння

$$\frac{\varepsilon_{[s]-4}}{\varepsilon_{[s]}} = \frac{m_\tau}{m_e} = \left( 1 + \frac{4}{[s]} \right)^2 \quad (3)$$

знаходимо  $[s]$  (дробова частина величини  $s$ ), а потім, підставляючи у відношення  $\varepsilon_{[s]-1}/\varepsilon_{[s]}$ , знаходимо масу мюона

$$m_\mu = \frac{m_e}{16} \left( 3 + \sqrt{\frac{m_\tau}{m_e}} \right)^2. \quad (4)$$

Легко перевірити, що це значення близьке до експериментальної величини для маси мюона. Необхідно відзначити, що при зіставленні мас лептонів з енергетичними рівнями (2), навіть, не було потреби визначати параметри  $U_0$  і  $b$  потенціальної ями  $U(x) = -U_0/ch^2(x/b)$ . У вирази (3), (4) не входить і маса  $m_p$ . Звичайно, при більш точних розрахунках всі ці величини є важливими. Також відзначимо, що зіставлення маси тау-лептона із п'ятим зверху енергетичним рівнем  $\varepsilon_{[s]-4}$  не є випадковим. По-перше, за допомогою виразу (4) можна розрахувати масу тау-лептона за допомогою експериментальних значень мас електрона і мюона; і це значення буде також близьким до експериментального значення тау-лептона. Другим вагомим аргументом на користь вибору енергетичного рівня  $\varepsilon_{[s]-4}$  для маси тау-лептона є існування багатьох мод його розпаду (див. [2]). Перейдемо тепер до розрахунку потенціальної ями, в якій виникають всі ці енергетичні рівні, що і є основною метою даної роботи.



## Розрахунок поляризованої потенціальної ями при русі максимона в кристалоподібному просторі

Як показано в роботах [5 - 7], простір фізичного вакууму можна уявляти у вигляді кристалоподібної кубічної структури типу NaCl, просторовий період якої близький до планківської довжини  $l_p = \sqrt{\hbar G/c^3}$ . У вузлах такої ґратки знаходяться максимони і антимаксимони (з точки зору теорії вузлів – це праві і ліві трилисники (див., наприклад, [8]). Нехай тепер у просторі розміщений, як домішка, максимон (або антимаксимон). В результаті взаємодії з вузлами кристалічного простору (однотипні вузли відштовхуються, а різнотипні притягуються) виникає сферично-симетрична поляризаційна потенціальна яма. Слід відмітити, що аналогічна потенціальна яма має місце для електрона, який знаходиться в ідеальному іонному кристалі. Як показано в роботах [9, 10], статичний  $|\psi|^2$ -розподіл електрона утворює статичну поляризаційну потенціальну яму, яка, у свою чергу, стаціонарно підтримує електрон у цьому  $\psi$ -стані. Такі стани кристала з поляризаційною потенціальною ямою, в якій локалізований електрон, названі в [9, 10] поляронами.

Спіратимемося на цю аналогію, а також здійснюватимемо розрахунок енергії взаємодії між максимоном і оточуючим кристалічним простором за допомогою модифікованого закону всесвітнього тяжіння  $\vec{F}(\vec{r}) = \pm Gm_p^2 \vec{r}/r^3$  (див. аргументацію в [7]). Максимон, який знаходиться в стаціонарному стані, розподілений у просторі із середньою густиною

$$n(x, y, z) = m_p |\psi(x, y, z)|^2. \quad (5)$$

Цей розподіл маси викликає гравітаційну поляризацію кристалічного вакууму, що еквівалентно появі фіктивної (не скомпенсованої) маси кристалоподібного простору, густина якої пропорційна  $n(x, y, z)$ :

$$n'(x, y, z) = \xi n(x, y, z). \quad (6)$$

Потенціальна енергія взаємодії максимона з цією фіктивною масою подається наступним виразом:

$$V(r) = -Gm_p^2 \xi \int \frac{|\psi(\vec{r}_1)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\tau_1, \quad (7)$$

Для подальших розрахунків необхідно вибрати апроксимацію для хвильової функції  $\psi(\vec{r})$ . Оскільки в даній роботі лише ілюструється поява поляризаційної ями, можна зупинитися на достатньо простій (уже нормованій)  $\psi$ -функції вигляду

$$\psi(r) = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-\alpha r), \quad (8)$$

де параметр  $\alpha$  можна пов'язати з величиною  $\xi$ , якщо виконати процедуру мінімізації наступного функціонала:

$$J(\psi) = \frac{\hbar^2}{2m_p} \int \left(\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)^2 d\tau + \frac{1}{2} \int V(r) |\psi(r)|^2 d\tau. \quad (9)$$

Підставляючи (8) у (7), знаходимо

$$V(r) = 2Gm_p^2 \xi \alpha \left[ \frac{1}{\kappa} - \exp(-\kappa) \left( \frac{1}{\kappa} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (10)$$

де  $\kappa = 2\alpha r$ . Далі, підставляючи (8) і (10) у (9), із рівняння  $\partial J / \partial \alpha = 0$  знаходимо значення  $\alpha_0 = 5\xi/16l_p$ , при якому функціонал (9) досягає мінімального значення  $J(\alpha_0) = -25m_p c^2 \xi^2 / 512$ . Далі у співвідношеннях, де зустрічається  $\alpha$ , пишемо  $\alpha_0$ .

Перейдемо тепер від тривимірної ями (10) до одновимірної  $V(x)$ , яка виникає при рівномірному прямолінійному русі максимона в кристалоподібному просторі. Для цього, як це виконується в теорії каналювання (див., наприклад, [11]), необхідно усереднити потенціал  $V(r)$  за координатами  $y$  і  $z$ . Але спочатку необхідно знайти густину розподілу  $n'(\rho)$  ( $\rho$  - полярний радіус) фіктивної маси в площині  $yz$ . Інтегруючи в (6) за змінною  $x$ , знаходимо

$$n'(\rho) = \frac{2\xi\alpha_0^3}{\pi} \rho K_1(2\alpha_0\rho), \quad (11)$$

де  $K_1(x)$  - функція Макдональда. На основі (10), (11) одновимірний потенціал взаємодії  $V(x)$  максимона з оточуючим кристалоподібним простором тепер обчислюємо наступним чином:



$$V(x) = -8Gm_p^2 \alpha_0^4 \xi^2 \int_0^\infty \rho^2 K_1(2\alpha_0 \rho) \left[ \frac{1}{\alpha_0 \sqrt{x^2 + \rho^2}} - \exp(-2\alpha_0 \sqrt{x^2 + \rho^2}) \left( \frac{1}{\alpha_0 \sqrt{x^2 + \rho^2}} + 1 \right) \right] d\rho \rightarrow$$

$$V(x) = -V_0 \left\{ \frac{1}{8} [\sin(2|x|) \operatorname{ci}(2|x|) - \cos(2|x|) \operatorname{si}(2|x|)] - \frac{|x|}{4} [\cos(2|x|) \operatorname{ci}(2|x|) + \sin(2|x|) \operatorname{si}(2|x|)] + \right. \quad (12)$$

$$\left. + \frac{\exp(-2|x|)}{15} \left( 2x^4 - \frac{1}{2}|x|^3 - 2x^2 + \frac{19}{8}|x| - \frac{19}{8} \right) + \frac{1}{3}|x|^3 \left( \frac{2}{3}x^2 - 1 \right) \operatorname{Ei}(-2|x|) \right\},$$

де  $V_0 = 5m_p c^2 \xi^3 / 2$ ,  $\alpha_0 x \rightarrow x$ , величину  $\xi$  необхідно вибрати таку, щоб основний стан у потенціальній ямі  $V(x)$  дорівнював  $\varepsilon_0 = -m_p c^2$ . На рис. 1 цей потенціал зображений у безрозмірних одиницях  $v(x) = V(x)/V(0)$  та  $x$ .

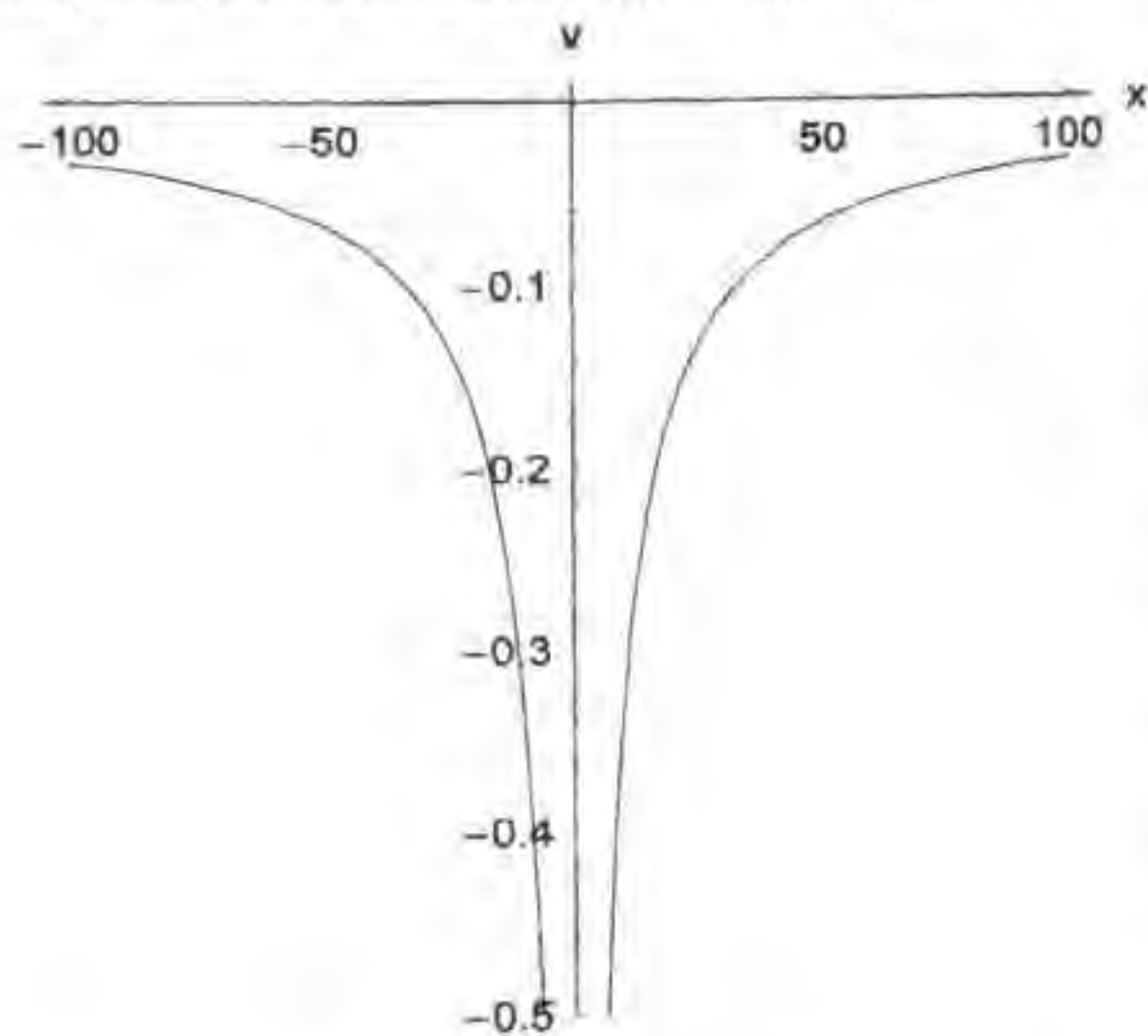


Рис.1. Поляризаційний потенціал взаємодії максимона з кристалоподібним простором, розрахований у безрозмірних одиницях  $v = V(x)/V(0)$  та  $x$ .

З цього рисунка видно, що апроксимація у вигляді функції  $U(x) = -U_0 / ch^2(x/b)$  для станів, які зіставляються з масами існуючих лептонів, досить точно наближається до розрахованого поляризаційного потенціалу (12).

За допомогою потенціалу  $W(x) = V(x) - U(x)$  можна в рамках стаціонарної теорії збурень розрахувати поправки до енергетичних рівнів незбуреної задачі (2) і знайти відповідні їм хвильові функції. Очевидно, щоб знайти величину  $\xi$  і розв'язати рівняння Шредінгера з оператором Гамільтона  $(-\hbar^2/2m_p)d^2/dx^2 + V(x)$ , необхідно виконати великий об'єм обчислень. Ця робота буде виправданою, якщо з самого

початку, як це обґрунтовується в [9, 10], буде вибрана найточніша апроксимація для пробної функції  $\psi$ , а саме  $\psi = A(1 + \alpha r + \beta r^2) \exp(-\alpha r)$ , де  $A$  виражається через параметри  $\alpha$  і  $\beta$  із умови нормування, а  $\alpha$  і  $\beta$  є незалежними параметрами і вибираються із умови мінімуму функціонала  $J$ .

#### Часи життя міюона та тау-лептона

Продовжимо аналіз енергетичних рівнів (2), розраховуючи при цьому часи життя міюона і тау-лептона. На основі відношення  $\varepsilon_{[s]}/\varepsilon_0 = m_e/m_p = \{s\}^2/s^2$  визначається параметр  $s = \{s\}\sqrt{m_p/m_e}$ , а, отже, можлива кількість лептонів  $N = [s]$ . Допускаємо, що переходи між енергетичними рівнями  $m$  і  $n$  відбуваються за рахунок спонтанного механізму з імовірністю

$$A_{mn} = \frac{4Gm_p^2 \omega_{mn}^3 x_{mn}^2}{3\hbar c^3}, \quad (13)$$

де у формулі (13) замість квадрата заряду електрона  $e^2$  стоїть вираз  $Gm_p^2$ ,

$\omega_{mn} = \hbar(m-n)(2s-m-n)/2m_p b^2$  - частота переходу між енергетичними рівнями  $m$  і  $n$ ,  $x_{mn}$  - матричний елемент дипольного переходу між цими ж рівнями. Оскільки в нашому випадку  $(m-n)/n \ll 1$ , то обчислення величин  $x_{mn}$  можна проводити в рамках квазікласичного наближення наступним чином [12]:

$$x_{mn} = \frac{2m_p}{T_m} \int_{-x_m}^{x_m} \frac{x}{p_m(x)} \cos \left( 2m_p \Omega_{mn} \int_{-x_m}^x \frac{dx'}{p_m(x')} \right) dx,$$

де  $p_m(x) = \{2m_p [\varepsilon_m] - U_0 / ch^2(x/b)\}^{1/2}$ ,

$T_m = 2m_p \int_{-x_m}^{x_m} dx'/p_m(x') = \pi b \sqrt{2m_p/|\varepsilon_m|}$  - період



руху максимона, який знаходиться у стані  $\psi_m$ ,  
 $\Omega_{mn} = 2\pi(m-n)/T_m$ ,  $x_m = b \text{Arch} \sqrt{U_0/|\varepsilon_m|}$  - точка  
повороту, яка знаходиться із рівняння  $U(x) = \varepsilon_m$ .  
Для знаходження часу життя  $t_\mu$  мюона потрібно  
знати наступний матричний елемент:

$$x_{[s],[s+1]} = \frac{2b}{\pi k} [F(k) - E(k)],$$

де  $F(k)$  і  $E(k)$  - повні еліптичні інтеграли  
відповідно першого і другого роду,  
 $k = \sqrt{1 - |\varepsilon_m|/U_0}$ . Оскільки  $k \approx 1$ , то при  
розрахунку цих еліптичних інтегралів необхідно  
користуватися наближеними формулами  
 $F \approx \ln(4\sqrt{U_0/|\varepsilon_m|})$  і  $E \approx 1$  (див., наприклад, [13]).  
Враховуючи цей виклад, знаходимо  
 $t_\mu = A_{[s],[s+1]}^{-1} \approx 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ с}$ , що достатньо добре  
узгоджується із експериментальним значенням. З  
іншого боку, розрахунок часу життя тау-лептона  
за допомогою спонтанного механізму приводить  
до величини  $t_\tau \approx 10^{-8} \text{ с}$ , що різко відрізняється  
від наведеного вище експериментального  
значення. Цей результат є очікуваним, оскільки,  
як відмічалось вище, у тау-лептона існує багато  
каналів розпаду.

### Висновки

В даній роботі проведено теоретичне  
дослідження з впорядкування мас трьох уже  
існуючих лептонів (електрона, мюона і тау-  
лептона), а також передбачається існування  
великого сімейства нових лептонів, для яких  
можна вказати їхні маси і часи життя. Такі  
результати одержані на основі розрахованого в  
роботі поляризаційного потенціалу, аналогічного  
тому, що виникає для електрона при його русі в  
ідеальному іонному кристалі.

Крім цього в статті, в рамках квазікласичного  
наближення, розраховуються часи життя мюона і  
тау-лептона. Враховуючи близькість  
розрахованої величини для часу життя мюона з  
його експериментальним значенням, а також  
розрахунки у попередніх статтях автора (див. [5 –  
7]), можна зробити незаперечний висновок:  
модель кристалографічного простору об'єктивно  
відображає реальність.

У роботі передбачається існування двох  
лептонів, маси яких знаходяться між масами  
мюона і тау-лептона (вони відповідають енергіям  
 $\varepsilon_{[s]-2}$  і  $\varepsilon_{[s]-3}$  спектра (2)). Те, що вони ще не

відкриті, більше за все, пов'язано з близькістю їх  
мас до мас тих частинок, які з'являються в  
процесі розпаду (див. [2]). Це приводить до дуже  
незначних часів життя цих частинок. Крім того, з  
великою точністю вказуються маси нових  
лептонів, які перевищують масу тау-лептона.

### Список використаних джерел

1. Окунь Л.Б. Физика элементарных частиц. – М.: Наука, 1988. – 272 с.
2. Физическая энциклопедия, Под ред. Прохорова А.М. – Т. 5. – М.: Научное изд. "Большая Российская энциклопедия", 1998. – 691 с.
3. Марков М.А. Элементарные частицы максимально больших масс (кварки, максимоны) // ЖЭТФ. – 1966. – Т. 51, Вып. 3(9). – С. 878-889.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, - Т. 3, 1989. – 768 с.
5. Максютя Н.В. Каналирование электронов в  $\mu$ -вакууме // Поверхность. – 2005. – № 4. – С. 72-76.
6. Максютя М.В. Фрактальність фізичного вакууму // Вісник Київського університету. Радіофізика та електроніка. – 2005. – 8. – С. 32-36.
7. Максютя М.В. Фрактальний сценарій виникнення різних форм матерії // Вісник Київського університету. Радіофізика та електроніка. – 2006. – 9. – С. 39-42.
8. Мантуров В.О. Теория узлов. – Москва – Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2005. – 512 с.
9. Пекар С. Автолокализация электрона в диэлектрической инерционно поляризующейся среде // ЖЭТФ. – 1946. – Т. 16, Вып. 4. – С. 335-339.
10. Пекар С. Локальные квантовые состояния в идеальном ионном кристалле // ЖЭТФ. – 1946. – Т. 16, Вып. 4. – С. 341-347.
11. Базылев В.А., Жеваго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. – М.: Наука, 1987. – 272 с.
12. Барышевский В.Г. Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях. – Мн.: Изд-во БГУ, 1982. – 256 с.
13. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции. – М.: Наука, 1968. – 344 с.

Надійшла до редакції 27.03.2007



УДК 537.86/.87

Мелков Г.А., д. ф.-м. н., проф., Чумак А.В.,  
аспірант, Васючка В.І., інженер-дослідник,  
Мойсеєнко В.А., студент

### Обернення хвильового фронту з конверсією частоти в анізотропних середовищах

Виявлено явище обернення хвильового фронту з перетворенням частоти оберненої хвилі вниз або відносно частоти падаючої хвилі в анізотропних середовищах. Це явище досліджено при параметричному оберненні невзаємних поверхневих магнітостатичних хвиль в односторонньо-металізованій плівці залізо-ітрієвого гранату (ЗІГ). Експеримент проведено на плівках ЗІГ у трисантиметровому діапазоні довжин хвиль накачки, конверсія частоти досягала 800 МГц.

Ключові слова: параметрична накачка, обернення хвильового фронту, частотна конверсія.

\*E-mail: chumak@univ.kiev.ua

Явище обернення хвильового фронту (ОХФ) було відкрито й досліджено в ізотропних середовищах. У такому випадку обернена хвиля є копією прямої (сигнальної) хвилі, але рухається в зворотньому напрямку. Тому це явище часто називають фазовим-спряженням, іноді використовується термін часове обернення [1]. Але, в загальному випадку анізотропних середовищ, рівняння Максвелла не є інваріантними при зміні знаку часу і координат. Це проявляється, в частковому випадку, в невзаємному поширенні хвиль у феритах. При цьому обернена хвиля може сильно відрізнятися від прямої хвилі, і говорити в цьому випадку про фазове спряження або обернення часу не має сенсу.

Вперше можливість обернення хвильового фронту в анізотропному середовищі була показана в [3]. Тут досліджувалось ОХФ невзаємних поверхневих хвиль під дією параметричної накачки у вільній феритовій плівці. При цьому сигнальна (пряма) і обернена (зворотня) хвилі, як і в ізотропному середовищі, мали однакові величини хвильових векторів  $|k_s| = |k_r|$  і однакові частоти  $\omega_s = \omega_r$ , але відрізнялись розподілом намагніченості по

Melkov G.A., prof., Chumak A.V., post. grad. student, Vasyuchka V.I., researcher, Moyseenko V.A., student

### Wave front reversal with frequency conversion in an anisotropic medium

The phenomenon of wave front reversal with reversal wave frequency conversion (either up-conversion or down-conversion) in anisotropic medium has been discovered. The phenomenon has been investigated on the example of parametric wave front reversal of non-reciprocal surface spin waves in an yttrium-iron garnet (YIG) film with asymmetric surface metallization. The experiment was performed on YIG film in three centimeters pumping wave-length range, the frequency conversion could exceed 800 MHz.

Key Words: parametric pumping, wave front reversal, frequency conversion

товщині плівки – одна з хвиль притискалась до однієї поверхні плівки, а протилежно напрямлена хвиля – до іншої. Тут і надалі  $\omega_s, \omega_r, k_s, k_r$  – відповідно частоти й хвильові вектори сигнальної (s) й оберненої (r) хвилі.

В даній роботі ми досліджуємо загальний випадок ОХФ в анізотропному середовищі, при якому зворотна хвиля відрізняється від прямої не тільки розподілом намагніченості, а й законом дисперсії  $\omega(\vec{k})$ , а саме  $\omega(-\vec{k}) \neq \omega(\vec{k})$ . Подібна ситуація має місце для поверхневих магнітостатичних хвиль (ПМСХ), які розповсюджуються в феритовій плівці, одна з поверхонь якої металізована, а інша – вільна. Нееквівалентність граничних умов для хвиль, що розповсюджуються в протилежних напрямках, призводить до відмінності законів дисперсії для цих хвиль [2]. В частковому випадку хвиля, що притискається до металу має більшу частоту, ніж хвиля з тим же хвильовим вектором, що розповсюджується в протилежному напрямку. Більш того, існує інтервал частот, в якому поверхневі магнітостатичні хвилі можуть розповсюджуватися тільки в одному напрямку вздовж металізованої поверхні. Типовий вигляд дисперсійних залежностей для односторонньо-



металізованої феритової плівки показано на рис.1, постійна намагніченість  $\bar{M}_0$  (див. рис.2) лежить в площині плівки, хвилі біжать перпендикулярно  $\bar{M}_0$ . На рис.1 додатнім значенням хвильового вектора  $\bar{k} > 0$  відповідає пряма хвиля, яка розповсюджується поблизу металізованої поверхні, від'ємним хвильовим векторам  $\bar{k} < 0$  відповідає зворотня хвиля, яка біжить у протилежному напрямку, і притискається до вільної сторони плівки.

З рис.1 передусім видно, що спектр ПМСХ у дотично-намагніченій односторонньо-металізованій плівці анізотропний, тобто закони дисперсії для прямої  $\omega(\bar{k})$  й зворотної  $\omega(-\bar{k})$  хвиль відрізняються один від одного при всіх значеннях  $k \neq 0$ :  $\omega(-\bar{k}) \neq \omega(\bar{k})$ . Ці хвилі розповсюджуються з різними груповими швидкостями  $v_+ = d\omega(k)/dk \neq v_- = d\omega(-k)/dk$  та існують в різних частотних інтервалах. Нижня границя існування  $\omega_{\min}$  для обох хвиль, прямої та оберненої, співпадає, вона визначається величиною постійного магнітного поля  $H_0$  та намагніченістю насичення  $M_0$ :

$$\omega_{\min}^2 = \omega_H(\omega_H + \omega_M), \text{ де } \omega_H = \gamma H_0, \quad \omega_M = 4\pi\gamma M_0, \\ \gamma - \text{гіромагнітне відношення.}$$

Запам'яймо, що  $\omega_{\min}$  є частота однорідного

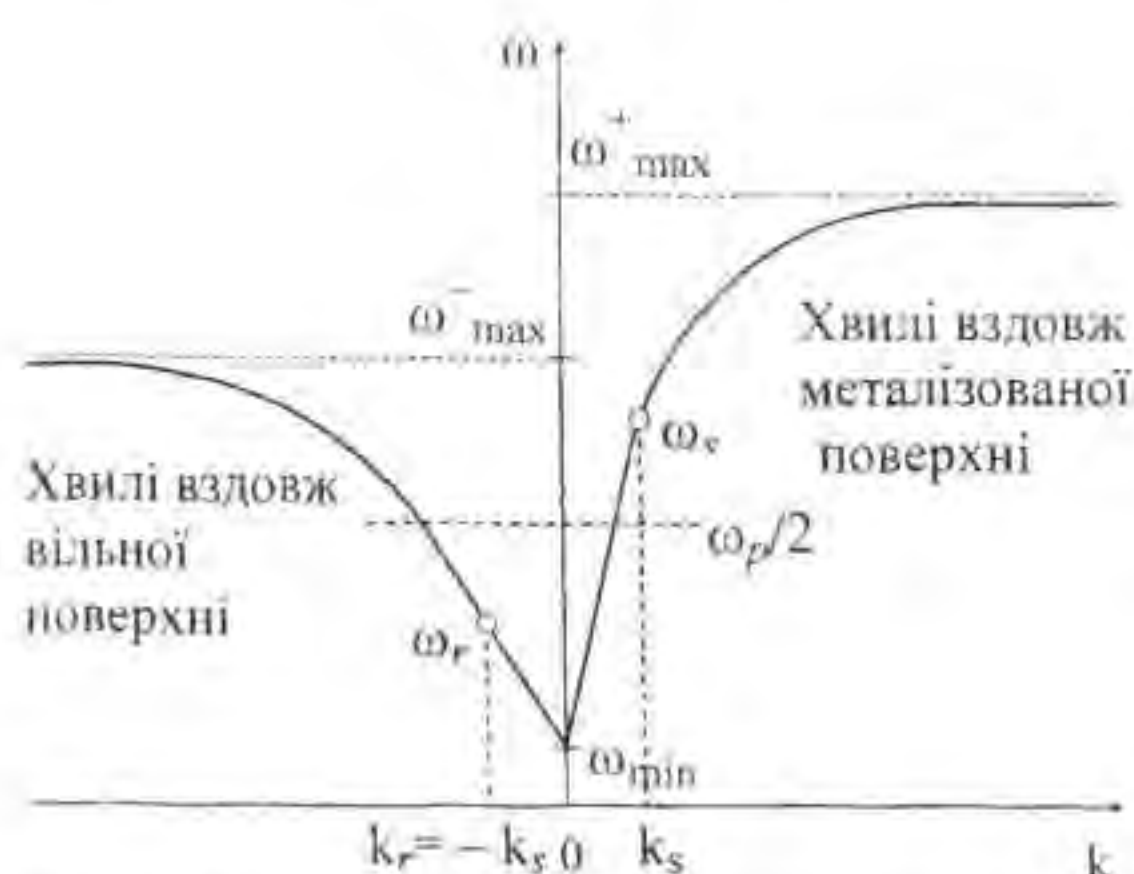


Рис. 1. Дисперсійна залежність поверхневих магнітостатичних хвиль для односторонньо-металізованої дотично - намагніченої феритової плівки. Частота  $\omega_{\min}$  – нижня границя існування

ПМСХ;  $\omega_{\max}^+ - \omega_{\max}^-$  – верхні границі для прямої та зворотної хвиль, які поширюються відповідно вздовж металізованої та вільної поверхонь;  $\omega$  – частота накачки.

( $k = 0$ ) феромагнітного резонансу дотично-намагніченої плівки.

Верхня частотна межа прямої хвилі  $\omega_{\max}^+$  перевищує верхню межу зворотної хвилі  $\omega_{\max}^-$ :  $\omega_{\max}^+ = \omega_H + \omega_M > \omega_{\max}^- = \omega_H - \omega_M$ . Це означає, що в частотному інтервалі  $\omega_H + \omega_M/2 < \omega < \omega_H + \omega_M$  шириною  $\omega_M/2$  може розповсюджуватися лише пряма хвиля, зворотної поверхневої хвилі не існує. Тому для сигнальної частоти  $\omega_s$ , яка лежить у цьому частотному інтервалі в принципі не можливе обернення хвильового фронту із збереженням частоти, оскільки в спектрі немає обернених хвиль з частотою  $\omega_r = \omega_s$ .

Чи можливо взагалі ОХФ у середовищах з анізотропним спектром й якими особливостями він володіє? На це питання можливо відповісти, користуючись загальними принципами, заснованими на законах збереження енергії та імпульсу. Для ОХФ під дією параметричної накачки ці закони можуть бути записані у вигляді:

$$\omega_p = \omega_s + \omega_r, \\ \bar{k}_p = \bar{k}_s + \bar{k}_r, \quad (1)$$

де  $\omega_p, \bar{k}_p$  – відповідно частота та хвильовий вектор накачки;  $\omega_s = \omega(k_s)$ ,  $\omega_r = \omega(k_r)$ .

Обмежимося надалі одновимірним випадком, для якого хвильові вектори можна вважати числами. Для однорідної накачки ( $k_p = 0$ ) хвильові вектори сигнальної та оберненої хвиль, згідно (1), рівні і направлені в протилежні сторони:  $k_s = -k_r$ . Це означає, що для анізотропного спектра, через нерівність  $\omega(-\bar{k}) \neq \omega(\bar{k})$ , ОХФ завжди, окрім неможливого в експерименті випадку  $k = 0$ , відбувається з зсувом частоти  $\Delta\omega = \omega_r - \omega_s = \omega(k_r) - \omega(k_s) = -\omega(-k_s) - \omega(k_s) \neq 0$ . Для показаного на рис.1 випадку, при якому сигнальна хвиля притиснута до металізованої сторони плівки,  $\Delta\omega < 0$ , тобто відбувається конверсія частоти вниз. Якщо ж сигнальну хвилю збуджувати поблизу вільної сторони плівки, то буде мати місце конверсія частоти вгору:  $\omega_r - \omega_s = \Delta\omega > 0$ .

В наступній частині роботи буде дано теоретичне обґрунтування процесу обернення хвильового фронту у випадку анізотропного





Рис.2. Геометрія задачі.

спектра, потім будуть наведені результати експерименту.

### Теоретичні основи

Розглянемо випадок обернення хвильового фронту поверхневої магнітостатичної хвилі під дією однорідної поздовжньої параметричної накачки, змінне поле якої  $\bar{h}_p$  напрямлене вздовж напрямків  $\bar{H}_0, \bar{M}_0$  [2,3].

Для опису параметричної взаємодії невзаємних поверхневих магнітостатичних хвиль (ПМСХ) з поздовжньою параметричною накачкою в геометрії, яка наведена на рис.2, почнемо з рівняння Ландау-Ліфшица для намагніченої феромагнітної плівки [2]:

$$\frac{\partial \bar{M}}{\partial t} = \gamma [\bar{H} \times \bar{M}], \quad (2)$$

де магнітне поле  $H \equiv H(t, x, y, z)$  дано:

$$\bar{H} = \bar{H}_0 + \frac{1}{2} \left( \bar{h}_p e^{-i\omega_p t + k.c.} \right) + \bar{h}_d, \quad (3)$$

тут  $\bar{h}_p$  - змінне поле параметричної накачки,  $\bar{h}_d$  - магніто-дипольне поле, визначене з рівнянь Максвелла в магнітостатичному наближенні [2].

Розглянемо випадок ПМСХ, які розповсюджуються (див. рис.2) перпендикулярно  $\bar{H}_0, \bar{M}_0$  вздовж осі  $y$  (пряма хвиля, хвильовий вектор:  $+k$ ) і в протилежному напрямку (зворотня хвиля, хвильовий вектор:  $-k$ ). В такому випадку намагніченість  $\bar{M}$  можна записати у вигляді:

$$\bar{M} = \bar{M}_0 + \frac{1}{2} \left( a_+ m_+ e^{-i\omega(k)t + iky} + \text{к.с.} \right) + \frac{1}{2} \left( a_- m_- e^{-i\omega(-k)t - iky} + \text{к.с.} \right), \quad (4)$$

де  $a_{\pm}, \bar{m}_{\pm} = \bar{m}_{\pm}(x)$  відповідно повільно змінні амплітуди й профілі намагніченості [2] прямої (+) та оберненої (-) ПМСХ. З рівнянь (2) - (4) можна знайти дисперсійні співвідношення для прямої  $\omega(k)$  та зворотної  $\omega(-k)$  ПМСХ [2]. Запишемо їх в зручному для подальшого аналізу вигляді:

$$\omega(\pm k) = \Omega_k \pm \delta\omega_k, \quad (5)$$

$$\Omega_k^2 = \left( \omega_{\text{max}} + \delta\omega_k \right)^2 - \left( \frac{\omega_M}{2} \right)^2 e^{-|k|d}, \quad (6)$$

$$\delta\omega_k = \frac{\omega_M}{4} \left( 1 - e^{-|k|d} \right)$$

Тут  $d$  - товщина феромагнітної плівки (див. рис.2). Дисперсійні криві (5) якісно зображені на рис.1. З (5) видно, що умова точного параметричного резонансу має вигляд:

$$\omega(k) + \omega(-k) = \omega_p = 2\Omega_k. \quad (7)$$

Розподіл намагніченості ПМСХ у розглянутому випадку можна записати так:

$$m_+(x) = m_-(-x) = \alpha e^{kx} (\hat{x} + i\hat{y}) - e^{-kx} (\hat{x} - i\hat{y}) \quad (8)$$

де  $\hat{x}, \hat{y}$  - одиничні орти осей  $x, y$  відповідно, та

$$\alpha = \sqrt{\frac{\omega_{\text{max}}^+ + \delta\omega_k + \Omega_k}{\omega_{\text{max}}^+ + \delta\omega_k - \Omega_k}}. \quad (9)$$

Підставимо загальний розв'язок (4) у рівняння Ландау-Ліфшица (2) та, користуючись умовою ортогональності для  $m_{\pm}(x)$  [2,3], отримуємо рівняння для параметрично-зв'язаних повільних амплітуд  $a_{\pm}$ :

$$\frac{\partial a_{\pm}}{\partial t} \pm v_{\pm} \frac{\partial a_{\pm}}{\partial y} + \Gamma a_{\pm} = iVh_p a_{\pm}^*, \quad (9.a)$$

де, як і раніше,  $v_{\pm} \equiv \partial\omega(\pm k)/\partial k$  - групові швидкості прямої і оберненої ПМСХ (обраховані в точках  $\pm|k|$ , відповідно),  $\Gamma \equiv \gamma\Delta H/2$  - феноменологічний показник релаксації, а коефіцієнт параметричного зв'язку ПМСХ  $V$  з поздовжньою накачкою визначається:

$$V = -\frac{\gamma}{4D} \int_{-d/2}^{d/2} m_+^* \cdot m_-^* dx = \gamma \frac{\alpha}{\alpha^2 - 1} = \frac{\gamma \omega_M}{2 \omega_p} e^{-kd} \quad (10)$$

Проаналізуємо вираз (10) для коефіцієнту параметричного зв'язку  $V$ , оскільки саме цей коефіцієнт визначає ефективність всіх взаємодіючих хвиль з накачкою, в тому числі й ефективність перетворення прямої сигнальної хвилі в обернену  $K = a^-/a^+$ . Наприклад, для сильних накачок ( $h_p \tau_p \gg \Gamma$ )  $K \equiv \exp(h_p \tau_p)$ , де  $\tau_p$  - тривалість імпульсу накачки [4].

Виявлено, що вираз (10) у точності співпадає з виразом для коефіцієнта зв'язку при оберненні



ПМСХ зі збереженням частоти:  $\omega_s = \omega_r = \omega_p / 2$  [2]. Це означає, що вивчене в даній роботі ОХФ в анізотропних середовищах з частотною конверсією не поступається за ефективністю ОХФ зі збереженням частоти. Більш того, для малих хвильових векторів ( $kd \ll 1, \exp(-kd) \sim 1$ ) вираз (10) співпадає з коефіцієнтом параметричного зв'язку для плоских спінових хвиль, для яких цей коефіцієнт максимальний.

Множник  $\exp(-kd)$  в (10) описує локалізацію прямої й зворотної ПМСХ біля протилежних поверхонь плівки, ясно, що для  $kd \gg 1$  параметрична взаємодія ПМСХ неможлива.

Приведемо тепер вирази для конверсії (зсуву) частоти. З рис.1 видно, що для фіксованої частоти накачки  $\omega_p$  при кожному значенні поля  $H_0$  існує лише одне значення частоти сигналу  $\omega_s$ , при якому можливе одночасне виконання необхідних умов:  $\omega_s + \omega_r = \omega_p$  й  $k_s = -k_r$ .

Відношення між частотами й полем можна знайти з дисперсійного відношення (5), (6):

$$\omega_s = \frac{\omega_p}{2} - \omega_{\max}^+ + \left( \frac{\omega_p^2}{4} + \omega_M \omega_{\max}^+ \right)^{1/2}; \quad (11)$$

$$\Delta\omega = \omega_r - \omega_s = 2\omega_{\max}^+ - 2 \left( \frac{\omega_p^2}{4} + \omega_M \omega_{\max}^+ \right)^{1/2}. \quad (12)$$

Максимальне поле, при якому можливе ОХФ,

$$H_c = \left[ (2\pi M_0)^2 + \left( \frac{\omega_p}{2\gamma} \right)^2 \right]^{1/2} - 2\pi M_0, \text{ тут має місце}$$

вироджений випадок, аналогічний ізотропному середовищу ( $\omega_s = \omega_r = \omega_p / 2$ ). При зменшенні поля  $H_0 < H_c$  значення  $\omega_s$  буде збільшуватися, а  $\omega_r$  - зменшуватися, тобто зсув частоти буде зростати. Мінімальне поле, при якому можливе ОХФ  $H_{\min} = \left( \omega_p / 2\gamma \right) - 3\pi M_0$ , зсув частоти при цьому максимальний  $|\Delta\omega| = \omega_M / 2$ .

### Експеримент та обговорення результатів

Експериментальне дослідження анізотропної дисперсії ОХФ було виконано з використанням ПМСХ, які розповсюджуються в плівці залізо-гірського гранату (ЗГ) товщиною  $d = 8,5$  мкм. Середня частина плівки була металізована з однієї сторони. Пряма сигнальна хвиля

розповсюджувалася біля покритої металом поверхні плівки. Плівка ЗГ була розташована у відкритому діелектричному резонаторі (ВДР) використаному для подачі імпульсів накачки на фіксованій частоті  $\omega_p / 2\pi = 9420$  МГц.

Детальний опис експериментальної установки наведено в [3]. У процесі експерименту, спочатку входною мікросмужковою антеною в плівці зовнішнім генератором збуджувалась пряма сигнальна хвиля на частоті  $\omega_s \approx \omega_p / 2$ , тривалість імпульсу -  $\tau_s$ . Потім у момент існування прямої хвилі, збудженої сигнальним імпульсом, всередині ВДР, через час  $t_p$  на резонатор подавався імпульс накачки тривалістю  $\tau_p$ . В результаті ОХФ в плівці виникала обернена хвиля, яка розповсюджувалася в зворотньому напрямку по вільній стороні плівки й потрапляла на входну антену. Через час  $t_{rev}$  обернена хвиля реєструвалась вимірною схемою, яка складається з циркулятора, смугового фільтра, НВЧ підсилювача та детектора.

Передусім було експериментально встановлено, що частота зворотної хвилі  $\omega_r$  не співпадала з  $\omega_s$  й була завжди нижче  $\omega_s$ . Таким чином, мало місце ОХФ з конверсією частоти вниз.

На рис.3 прямокутниками та трикутниками відповідно представлені експериментальні залежності частот сигнальної й оберненої хвиль, які беруть участь у процесі ОХФ, від постійного магнітного поля; тут же суцільними лініями зображені теоретичні криві, побудовані за допомогою формул (11), (12). З рис.3 видно хороше співпадіння теорії і експерименту, що свідчить про правильність запропонованого вище теоретичного опису ОХФ в середовищах з анізотропною дисперсією. Крім цього виявилось, що в даному випадку в межах точності експерименту ( $\pm 5$  МГц) для взаємодіючих частот виконується резонансна умова  $\omega_p = \omega_s + \omega_r$ .

Як і очікувалось, абсолютний зсув частоти  $|\Delta\omega| = \omega_s - \omega_r$  збільшується зі зменшенням поля  $H_0$  нижче критичного значення  $H_c = 1042$  Е, де згідно з теорією він дорівнює 0. Цікаво відмітити, що в зображеному на рис.3 діапазоні магнітних полів експериментальні залежності  $\Delta\omega = f(H_0)$  можуть бути з високим ступенем точності



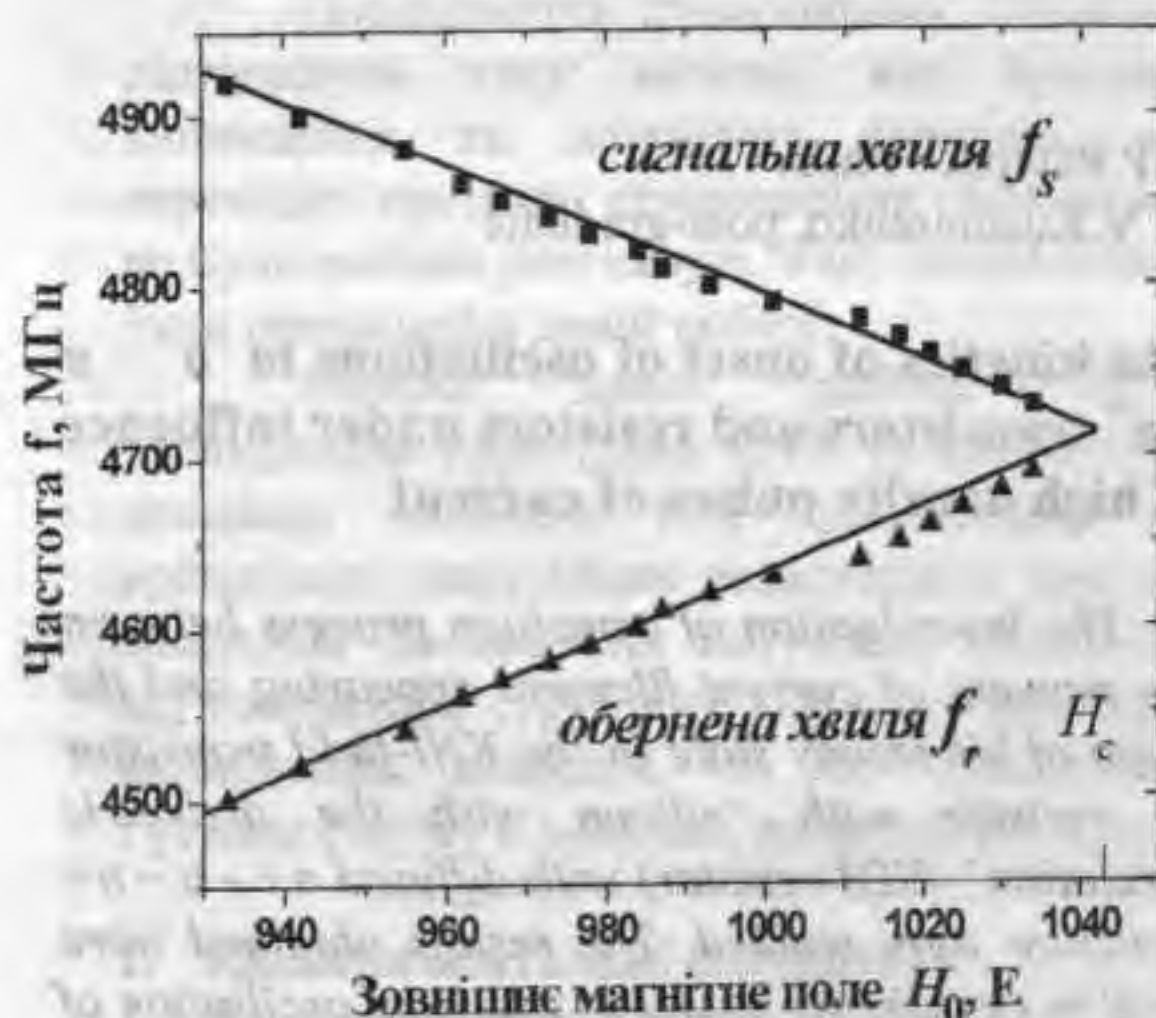


Рис.3 Польові залежності частот прямої  $f_s = \omega_s / (2\pi)$  та оберненої  $f_r = \omega_r / (2\pi)$  хвиль; квадрати й трикутники – експериментальні точки, суцільні лінії – теорія побудована за допомогою формул (11) й (12).

описані лінійною функцією  $|\Delta\omega| = a(H_c - H_0)$  з коефіцієнтом пропорційності  $a = 3,8$  МГц/Е. Максимальний зареєстрований зсув частоти складає  $\sim 800$  МГц при  $H_c - H_0 = 200$  Е.

Специфіка ОХФ в анізотропному середовищі полягає в тому, що час затримки оберненого сигналу  $t_{rev} \neq 2t_p$  ( $t_p$  – час затримки імпульса накачки відносно сигналу один), як це має місце у взаємних ОХФ і в усіх відомих процесах луни. Цей ефект визвано різними груповими швидкостями сигнальної  $v_s$  і оберненої  $v_r$  хвилі: в нашому випадку групова швидкість оберненої хвилі менша (див. рис.1), і час затримки  $t_{rev}$  більший ніж  $2t_p$ . Максимальний час затримки, отриманий в наших експериментах, складав 170 нс при  $t_p = 70$  нс.

В даній роботі ми детально описали випадок, коли сигнальна хвиля розповсюджується біля покритої металом поверхні плівки і частота оберненої хвилі  $\omega_r$  завжди нижча ніж сигнальна частота  $\omega_s$ .

Конверсія частоти вгору також реалізувалась експериментально, коли ми використовували як сигнальну хвилю, що локалізована біля вільної поверхні плівки.

## Висновки

Вперше теоретично і експериментально досліджено обернення хвильового фронту параметричною накачкою в умовах анізотропної дисперсії, при якій закон дисперсії для прямої й зворотної хвиль відрізняються один від одного. В роботі вивчено конкретний випадок невзаємних поверхневих магнітостатичних хвиль, які розповсюджуються в односторонньо-металізованій поздовжньо-намагніченій феритовій плівці. Виявлено, що в цьому випадку ОХФ можливо лише з перетворенням частоти вниз, якщо пряма хвиля розповсюджується поблизу металізованої поверхні плівки. Експеримент було проведено на плівках залізо-ітрієвого гранату в трисантиметровому діапазоні довжин хвиль накачки.

Ефективність ОХФ з конверсією частоти виявилася того ж порядку, що й при ОХФ зі збереженням частоти, максимальний зареєстрований зсув частоти досягав 800 МГц.

## Література:

1. Зельдович Б.Я., Пилипецкий Р.Ф., Шкунов В.В. Обращение волнового фронта. – Москва: Наука, 1985.
2. Гуревич А.Г., Мелков Г.А. Магнитные колебания и волны. – Москва: Наука, 1994.
3. Melkov G.A., Vasyuchka V.I., Chumak A.V., Tiberkevich V.S., Slavin A.N. Wave front reversal of nonreciprocal surface dipolar spin waves // Journal of Applied Physics. – 2006. – V.99. – P.08P513.
4. Melkov G.A., Serga A.A., Slavin A.N., Tiberkevich V.S., Oleinik A.N., Bagada // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1999. – V.89 – pp. 1189-1199.

Надійшла до редакції 22.03.2007 р.



УДК 621.315.592

С.П. Павлюк\*, канд. ф.-м., с.н.с.  
В.В.Кушніренко, аспірант

**Кінетика виникнення коливань у  $n^+ - n - n^+$  структурах при проходженні через них потужних імпульсів струму з екстремальною густиною**

*Проведені дослідження перехідного процесу між моментом утворення шнура струму та його стаціонарним існуванням у польовому КНІ транзисторі та КСДІ кремнієвому дифузійному резисторі із  $n^+ - n - n^+$  структурою. Отримані результати пояснені моделлю нестаціонарного виникнення та зникнення шнура струму*

*Ключові слова: транзистор, резистор, напруга, струм, коливання, шнур, саморозігрів*

\*E-mail: pps@univ.kiev.ua

#### Вступ

В останні роки широко почали досліджуватись напівпровідникові прилади, виготовлені за технологією "кремній на ізоляторі (КНІ)" та "кремній з діелектричною ізоляцією (КСДІ)".

Нами в роботі [3] на польових КНІ транзисторах були виявлені стаціонарні коливання напруги та протікаючого струму. Густина струму при цьому досягала значень  $10^5 \text{ A/cm}^2$ .

У роботі [4] подібні коливання напруги та струму були виявлені в електричному колі з кремнієвим дифузійним резистором (КДР), виготовленим за технологією КСДІ.

Живлення польових КНІ транзисторів та КДР було у режимі, близькому до генератора струму. При цьому, згідно з визначенням, струм не повинен коливатись при живленні структур від ідеального генератора струму. Наявність коливань струму свідчить про кінцеве значення вихідного опору використаного джерела живлення та дуже швидкою зміною (менше  $1 \text{ мкс}$ ) опору досліджуваної структури.

У роботах [3,4] були досліджені стаціонарні вольт-амперні характеристики (ВАХ) КНІ транзисторів та КДР і виявлені S-подібні ділянки, на яких виникали коливання напруги та струму. Були досліджені параметри коливань: залежність частоти  $f$ ,

S. P.Pavljuk\*, Ph.D.  
V. V.Kushnirenko, post-graduate

**The kinetics of onset of oscillations in  $n^+ - n - n^+$  transistors and resistors under influence of high density pulses of current**

*The investigation of transition process between the moment of current filament appearing and the stage of his steady state in the KNI-field transistor or resistor with "silicon with the dielectric insulation" (SDI-resistor) with diffused  $n^+ - n - n^+$  structure were studied. The results obtained were used to explain the model of transient oscillation of current filaments.*

*Key words: transistor, resistor, voltage oscillations, current filaments, backheating.*

амплітуди  $U_0$ , коефіцієнта модуляції  $K$  від величини протікаючого стаціонарного струму  $I$ .

Було виявлено, що на початку S-подібної ділянки ВАХ коливання напруги мали релаксаційний характер. При збільшенні струму вони плавно змінювали свою форму від релаксаційних до квазісинусоїдальних і знову — до релаксаційних, але з іншою шпаруватістю [3].

Подібні зміни форми коливань спостерігалися також при подачі на затвор польового КНІ транзистора потенціалу різного знаку.

Для пояснення отриманих у [3,4] результатів була запропонована наступна модель. При проходженні струму через польовий КНІ транзистор або КДР структуру біля позитивного контакту утворювалась високопольова область, яку можна уявити, як конденсатор. Такому відображенню відповідає ділянка стрибка падіння напруги на ВАХ при невеликому збільшенні протікаючого струму. При достатній величині падіння напруги на вузькій високопольовій області в ній виникає шнур струму [1]. Такий шнур закорочує високопольову область, що призводить до падіння напруги. Мала напруга ліквідує умови існування шнура струму, і він зникає. Починається нова зарядка смістності високопольової області, і цикл коливань повторюється.



Дослідження стаціонарних коливань підтвердили таку модель, але процеси виникнення та зникнення коливань, як перехідні процеси стаціонарних положень, не були раніше розглянуті. Такі дослідження були проведені в даній роботі.

Метою даної роботи було дослідження перехідних ВАХ та параметрів коливань польових КНІ транзисторів та кремнієвих дифузійних резисторів в режимі живлення поодиноким потужним імпульсом від генератора струму та вивчення кінетики виникнення коливань та їх зникнення. Густина струму в імпульсі досягала  $10^6 \text{ A/cm}^2$ .

## 1. Експериментальні результати

### 1.1. Експериментальні зразки

Вигляд та докладні параметри досліджуваних структур дані у роботах [3,4]. Наведемо основні їх характеристики. У КНІ транзисторах довжина плівки кремнію  $n$ -типу складала 2, 3, 10, мкм, ширина цієї плівки була 50 мкм, а товщина – 0.4 мкм. Товщини вбудованого оксиду, кремнієвої підкладки, полікремнієвого затвору та підзатворного окислу складали відповідно 1, 400, 1 та 0.1 мкм.

Частина використаних транзисторів не мала затвору. В них шар фосфоросилікатного скла завтовшки 1 мкм захищав верхню поверхню плівки кремнію. Під час вимірів ми залишали затвор під плаваючим потенціалом, а підкладку з'єднували з витоком, причому могли прикладати між ними напругу зміщення  $V$ . В деяких транзисторах плівки кремнію мали два бічні зонди для вимірів у них е.р.с. Холла. Концентрація електронів та їх рухомість у цих плівках становили  $5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  і  $1400 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ , відповідно.

Кремнієві дифузійні резистори, як і КНІ транзистори, є кремнієвими  $n^+ - n - n^+$  структурами з електричними контактами із алюмінію (Al) до  $n^+$ -областей. Вони розташовані в "кишенях", що відокремлені шаром  $\text{SiO}_2$  завтовшки  $\approx 2 \text{ мкм}$  від підкладки із полікремнію товщиною 300 мкм. "Кишені" мають різну глибину  $h_1$  (від 2,8 мкм до 10,5 мкм).

Усі досліджувані  $n^+ - n - n^+$  структури виготовлені із монокристалічного  $n$ -кремнію.  $n^+$ -області отримані іонним легуванням  $n$ -кремнію фосфором до концентрації фосфору  $P \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  з його подальшою термічною розгонкою на

глибину  $h \approx 5 \text{ мкм}$ . У залежності від глибини  $h_1$  "кишені",  $n^+$ -область має таку ж глибину, як і "кишеня" ( $h_1/h=1$ ), або меншу за неї ( $h_1/h>1$ ).

Експериментальна установка пропускала через досліджувані структури поодинокі імпульси струму з тривалістю 5 – 100 мкс, амплітудою 1-300 мА. За даними осцилограм падіння напруги на структурах будувалися імпульсні ВАХ для різних моментів часу.

### 1.2. Імпульсні ВАХ

ВАХ усіх досліджуваних структур з різними значеннями довжини були за характером подібні і відрізнялися тільки абсолютними значеннями. Тому на рис.1 показана характерна імпульсна ВАХ КСДІ резистора. ВАХ КНІ транзистора була подібна за характером до зображеної. Крива

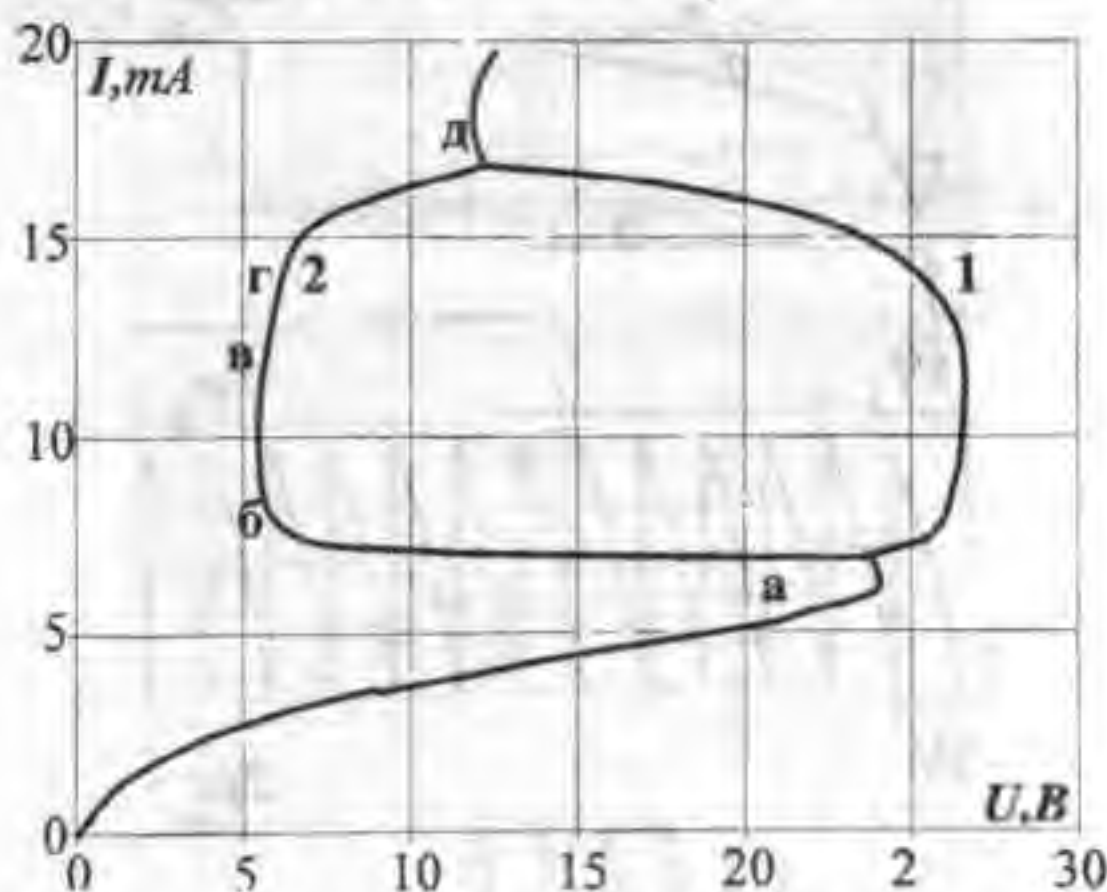


Рис.1.Схема імпульсної ВАХ КСДІ резистора.

1 показує ВАХ максимального значення напруги коливань  $U_{max}$ , а крива 2 – мінімального  $U_{min}$ . Як видно з ВАХ, як і в стаціонарному випадку після лінійної ділянки на ВАХ, спостерігається стрибок напруги на структурі, за яким починається  $S$ -подібна ділянка. Причому  $U_{max}$  не має чітко вираженої  $S$ -подібної ділянки майже у всьому діапазоні коливань, а  $U_{min}$  має велику  $S$ -подібну ділянку.

Розрахунки виділеної питомої потужності показали, що стрибок напруги та виникнення її коливань починаються приблизно при однакових по порядку величинах.



При струмі, за межами  $S$ -подібної ділянки, коливання зникають. Такі ВАХ подібні стаціонарним.

При більших довжинах каналу КДР коливання напруги виникають при більших значеннях напруги і менших значеннях струму.

### 1. 3. Осцилограми коливань напруги

Осцилограми напруги показані на рис. 2.

У лінійній області ВАХ форма падіння напруги на структурі повторює прямокутну форму імпульсу струму (рис. 2.а, осц.1). При збільшенні амплітуди імпульсу струму починається різке збільшення падіння

напруги в кінці імпульсу (рис. 2.а, осц. 2,3), яке змінювалось початком коливань (рис. 2.б). Коливання спочатку були близькі до релаксаційних, потім – квазісинусоїдальних, як і в роботах [3,4]. Подальше збільшення амплітуди струму призводило до початкового виникнення коливань і через певний проміжок часу – до їх зникнення. Цей проміжок був тим коротшим, чим більшим було значення амплітуди імпульсу струму (рис. 2.в,г). Після переходу за  $S$ -подібну ділянку на ВАХ коливання напруги зникали. Спостерігався тільки поодинокий початковий пік напруги, і відбувався перехід на стаціонарне значення (рис. 2.д).

### 2. Обговорення отриманих результатів

Отримані результати дозволили конкретизувати модель перехідного процесу утворення шнура струму в  $n-n-n$  КНІ та КСДІ структурах. Як було показано у роботах [3,1], біля позитивного контакту структур утворюється високопольова область за рахунок польового ефекту [2] та наступним виникненням високопольового домену [5]. Це добре видно з осцилограм падіння напруги (рис. 2.а, криві 2,3) та з виникнення стрибка напруги на ВАХ. Ця область починає активно розігріватися і досягає температури власної провідності. В цих умовах, відповідно до [1], утворюється шнур струму, який періодично виникає та зникає [3].

Розігрів шнура призводить до того, що кожний наступний цикл коливань “пам’ятає” попередній розігрів. Канал шнура не встигає остигнути за період розрядки ємності, і час існування шнура збільшується. Перехідний період коливань, тобто час утворення та зникнення шнура струму, що призводить до коливань у електричному колі, зменшується. Це і підтверджує експеримент (рис. 2.в,г,д).

При величині струму, що виходить за межу  $S$ -подібної ділянки, існування шнура стає стаціонарним. Виникнувши на початку імпульсу струму (рис. 2.д), шнур існує за рахунок протікаючого струму. Чим більше амплітуда протікаючого струму, тим швидше утворюється шнур, тим більша потужність виділяється у ньому, і тим швидше він розігріває структуру до температури плавлення кремнію. При цьому структура руйнується. Дослідження експериментальних

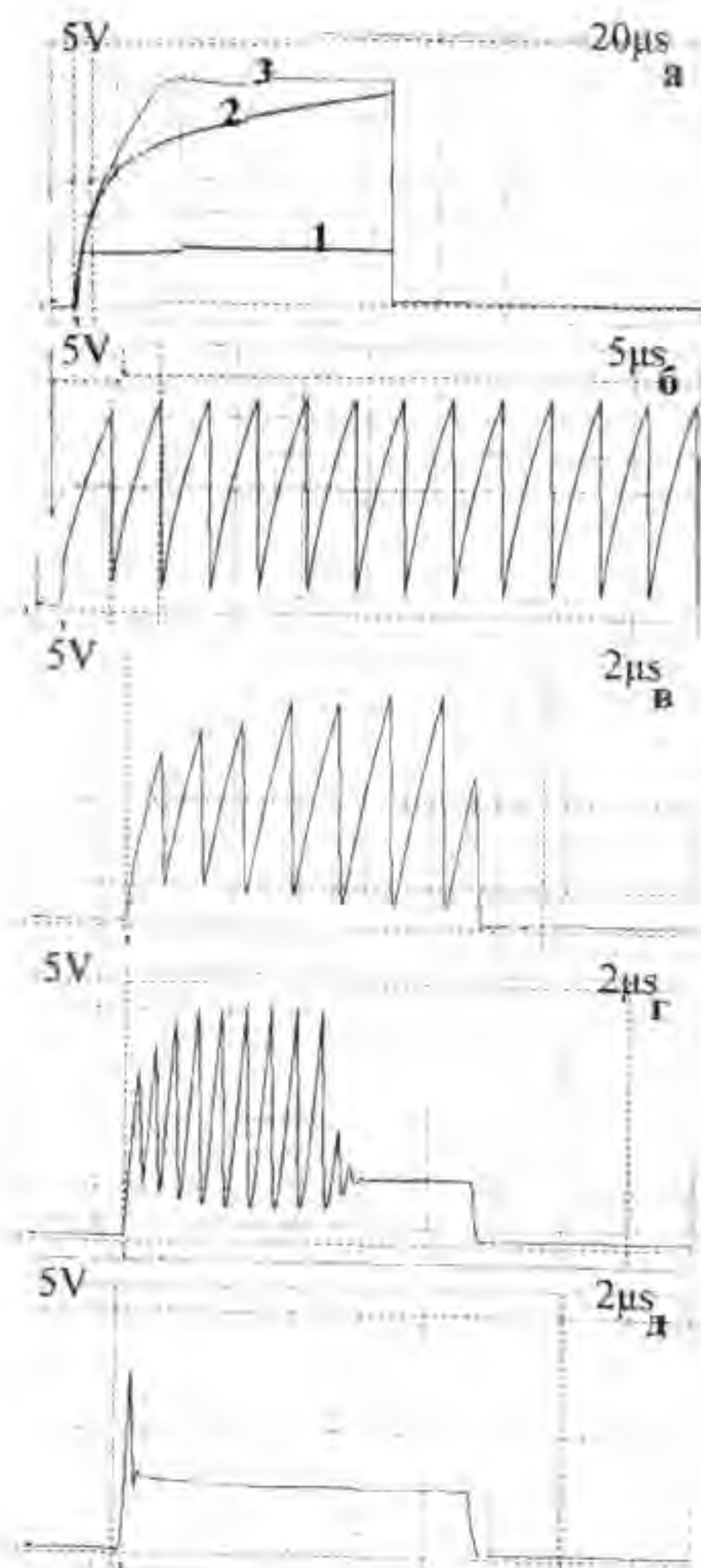


Рис. 2. Осцилограми напруги на КСДІ резисторі відповідно до точок на ВАХ.



структур за допомогою оптичного мікроскопу підтвердили це положення.

# Висновки

1. Дослідження  $n^+ - n - n^+$  структур, виготовлених на базі технологій КНІ та КСД, дозволили вивчити закономірності перехідного процесу, який базується на моделі виникнення та зникнення шнура струму.
2. Досліджені імпульсні ВАХ та осцилограми падіння напруги на структурах.
3. Візуальні дослідження підтвердили існування шнура струму.

# Список використаних джерел

1. Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Миронов А.Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. М.: Наука, с.412, 1972.
2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Пер. с англ.-М.: Мир. с.80-91, 1984.
3. В.В. Кушніренко, Г.К. Нинидзе, С.П. Павлюк. Использование КНИ-транзистора в качестве генератора колебаний напряжения. // ТКЕА, №3(57), 2005, с.54-57.
4. Павлюк С.П., Кушніренко В.В. Коливання напруги та струму в електричному колі з кремнієвим дифузійним резистором. // Вісник КНУ, серія: Ф-МН, випуск №3, 2006.
5. Добровольский В.Н., Павлюк С.П. Термический градиентно-дрейфовый домен в электронно-дырочной плазме полупроводников ФТП. -1981, -Т.15, №1.- С.120-129.

Надійшла до редакції 16.01.2007 р.

Актуальність теми дослідження зумовлена необхідністю розуміння фізичних процесів, що відбуваються в напівпровідникових структурах з гетероструктурою. Зокрема, вивчення динаміки виникнення та зникнення шнура струму в таких структурах має важливе значення для розробки нових типів електронних пристроїв. У даній статті представлено результати дослідження імпульсних ВАХ та осцилограм падіння напруги на структурах  $n^+ - n - n^+$ . Також наведено візуальні дані, що підтверджують існування шнура струму. Результати дослідження порівняно з теоретичними розрахунками та висновками, зробленими в попередніх роботах. Додатково наведено список використаних джерел.



УДК 681.325.5

Фелінський\* Г.С., канд. фіз-мат. наук.

## Експериментальні дослідження напівпровідникових лазерних діодів для акустооптичних процесорів НВЧ радіосигналів.

Для використання в складі акустооптичних процесорів лазерні випромінювачі повинні задовольняти специфічним вимогам. У роботі наводяться оригінальні результати комплексних експериментальних досліджень напівпровідникових лазерних діодів, що містять спектральні дослідження в широкому діапазоні температур, вимірювання електрофізичних параметрів, а також просторового розподілу поля випромінювання. Встановлені кореляції вимірних характеристик дозволяють виробити практичні рекомендації з вибору лазерних джерел для розробки акустооптичних процесорів, що обробляють НВЧ радіосигнали.

Ключові слова: напівпровідникові лазери, акустооптика, спектроскопія.

\*E-mail: [felinskyi@yahoo.com](mailto:felinskyi@yahoo.com)

### 1. Вступ

Акустооптична взаємодія електромагнітних та ультразвукових полів є надзвичайно продуктивною для створення широкого кола пристроїв функціональної електроніки – від найпростіших дефлекторів та оптичних фільтрів, що перебудовуються [1], і до складних систем обробки надвисокочастотних (НВЧ) сигналів [2], ефективність яких в інтегральному виконанні [3-5] важко перевершити будь-якими іншими методами. Сполучення технології збудження акустичних хвиль на частотах в кілька гігагерц з унікальною ефективністю генерації світла в лазерних діодах (ЛД) складає основу цілого класу пристроїв НВЧ електроніки – акустооптичних процесорів.

Швидкодія акустооптичних процесорів оцінюється добутком  $B^2T$ , де  $B$  – ширина смуги,  $T$  – час затримки для брегівської ґратки. Для типових значень  $B \sim 2\div 3$  ГГц,  $T \sim 10$  нс, параметр  $B^2T \sim 4\div 9 \cdot 10^{13}$  операцій/с, що набагато перевищує можливості чисто цифрових систем обробки НВЧ сигналів з аналогічними масо-габаритними характеристиками. Але простота схеми процесора, що містить крім брегівської ґратки та багатоелементного фотоприймача, один напівпровідниковий (н/п) лазер або лінійку кількох лазерів, висуває підвищені вимоги до спектральних і елект-

G. S. Felinskyi\*, Ph. D.

## The experimental study of semiconductor laser diodes for acousto-optic signal processors of microwave radio-signals

Laser transmitter should satisfy to specific requirements when it is used in the structure of acousto-optic processors. The complex results of our experimental study of the semiconductor laser diodes, including spectral researches in a wide temperature range, measurements of electrophysical parameters, and also spatial distribution of the radiation field are given in this work. The established correlations of the measured characteristics allow to work out the practical recommendations on laser source choice for development the acousto-optic devices for the microwaves radio signals processing.

Key words: semiconductor lasers, acousto-optics, spectroscopy.

рофізичних параметрів випромінювачів.

Дійсно, дифракція світла на акустичній хвилі є процесом розсіяння фотонів на акустичних фонах, який виникає в умовах збереження енергії та імпульсу. Тому хвильовий вектор дифрагованої хвилі  $\vec{k}_d$  повинен дорівнювати сумі або різниці хвильових векторів  $\vec{k}_i$  падаючої оптичної хвилі та вектора  $\vec{K}$  акустичної хвилі. Причому  $k_i = 2\pi n / \lambda_0$ ,  $k_d = 2\pi n_d / \lambda_0$ , де  $n$ ,  $n_d$  – показники заломлення падаючої та дифрагованої хвиль,  $\lambda_0$  – довжина хвилі лазера у вакуумі. У випадку ізотропної дифракції  $n_i = n_d = n$ ,  $k_i = k_d = k$ , а умова синхронізму брегівського розсіяння має вигляд:

$$\sin \theta = K / 2k = \lambda_0 / 2n\Lambda, \quad (1)$$

де  $\Lambda$  – довжина акустичної хвилі, кут  $\theta = \theta_i = \theta_d$ , де  $\theta_i$ ,  $\theta_d$  – відповідно кути між  $k_i$ ,  $k_d$  та площиною акустичного хвильового фронту.

У конструкції брегівської ґратки з фазованими багатоелементними випромінювачами акустичної хвилі, що розташовані на поверхні кристалу з періодом  $s$  забезпечується широкосмуговий синхронізм брегівської взаємодії з центральною частотою  $f_0$ , що дорівнює [6]:

$$f_0 = v \sqrt{n / (\lambda_0 s)}, \quad (2)$$







регулювалася блоком живлення ТЕС 41 (5) та контролювалася терморпарою (3), що була підключена до вольтметра В7-27А/1 (6). Продуктивність ТЕМО-8 дозволяє змінювати температуру активної області лазерного діоду в межах від мінус  $10^{\circ}\text{C}$  до  $+50^{\circ}\text{C}$ . Це надає можливість досліджувати температурну залежність параметрів випромінювача та промодельовати всі найбільш типові умови його експлуатації. Схема управління струмом інжекції (4) забезпечує номінальний рівень вихідної потужності лазерного діода як у неперервному режимі, так і при імпульсній модуляції з частотою повторювання до 5 МГц. Струм інжекції лазерного випромінювача при вимірюваннях фіксувався на номінальному значенні і встановлювався в межах 40 – 180 мА відповідно до його ват – амперної характеристики. Для запобігання надмірного засвітлення фотоелектронного перемножувача ФЕУ-62 (9) потужність випромінювання ЛД регулювалася в межах 0÷мінус 60 дБ за допомогою сірого фільтра (7), що встановлювався між випромінювачем і вхідною щільною монохроматора.

Вимірювання проводились наступним чином. Кожна спектральна складова лазерного випромінювання, що виділялася вихідною щільною монохроматора (8) надходить до ФЕУ. Після нього вихідний електричний сигнал подається на вхід узгоджуючого підсилювача (10), а потім перетворюється у цифровий код у блоці аналогового вводу (17) управляючої системи нижнього рівня – програмованого пристрою управління спектральними приладами (УУП СП). УУП СП являє собою мікропроцесорну управляючу систему типу "Електроніка МС2101". Виділені у пристрої УУП СП дискрети спектральної інформації накопичуються у робочому файлі ОЗП ЕОМ верхнього рівня. Шаг дискретизації спектра може бути заданий в межах 0,0033 – 5 нм і обирається оператором у діалоговому режимі. Спектри вимірювалися у діапазоні 600..900 нм, а швидкість сканування обиралася з інтервалу від 0,333 до 333 нм/хв. Базове програмне забезпечення УУП СП дозволяє через блок автоматики управляти роботою крокових двигунів у механізмі сканування спектра, реле елементів автоматики установки і цифро-аналоговим перетворювачем ЦАП (13), що управляється від високовольтного джерела живлення ФЕУ, а також через блок аналогового вводу здійснювати прийом та цифрове перетворення сигналів фотоприймачів.

Програмне забезпечення ЕОМ верхнього рівня дозволяє задати потрібний режим роботи комплексу, забезпечує збір, обробку, тимчасове чи

постійне збереження спектральної інформації, а також її вивід у графічній або табличній формі на екран монітора, друк або зовнішній запам'ятовуючий пристрій.

## 2.2. Вимірювання спектрів лазерів у діапазоні 0,85..0.79 мкм.

Дослідження динаміки встановлення лазерної генерації залежно від струму інжекції та температури має першочергове значення для відбору лазерних діодів та встановлення оптимальних режимів їх експлуатації. Апробація експериментальних методик проводилась при дослідженні спектрів випромінювання ЛД, які генерують на довжині хвилі 0,85 мкм. Спектри записувались у діапазоні температур від  $-5^{\circ}\text{C}$  до  $+45^{\circ}\text{C}$  для струмів інжекції 0,1; 0,15 та 0,2 А. Випромінювачі виготовлялися за технологією, що застосовувалась при виготовленні серійних виробів 32ДЛ105, але мали потужність випромінювання у багатомодовому режимі, що досягала 25 мВт за оптимальних умов експлуатації. Проведені тестові вимірювання на багатомодових зразках ЛД дозволяють дослідити найбільш характерні особливості динаміки формування лазерної генерації при різних температурних режимах. Отримані спектрограми представлені на рис.2.

На рис. 2 експериментальні спектри випромінювання систематизовані таким чином, що рядки I–IV відповідають робочим температурам  $-5^{\circ}\text{C}$  (I);  $+5^{\circ}\text{C}$  (II);  $+25^{\circ}\text{C}$  (III) та  $+45^{\circ}\text{C}$  (IV). Позиції а, б, в, розташовані у стовчиках на цьому рисунку, відповідають струмам накачки 100 мА (а); 150 мА (б) та 200 мА (в).

Як бачимо, при струмах інжекції 100 мА і менше лазерна генерація не спостерігається у всьому температурному діапазоні. Структура спектра у допороговому режимі відповідає випромінюванню світлодіода, оскільки практично відсутній модовий склад. З підвищенням струму накачки до 150 мА (рис.2б) лазерна генерація з'являється при низьких температурах і зникає при нагріванні робочої області.

Яскраво виражений лазерний режим випромінювання спостерігається при струмах інжекції у 200 мА за температур менших, ніж  $+45^{\circ}\text{C}$ . У генерацію виходить кілька десятків мод з міжмодовою відстанню порядку 0,5 нм. При температурі понад  $40^{\circ}\text{C}$  спостерігається різке згасання до повного зникнення лазерної генерації. Таким чином, оптимальний температурний режим генерації відповідає діапазону  $25 \pm 10^{\circ}\text{C}$ .



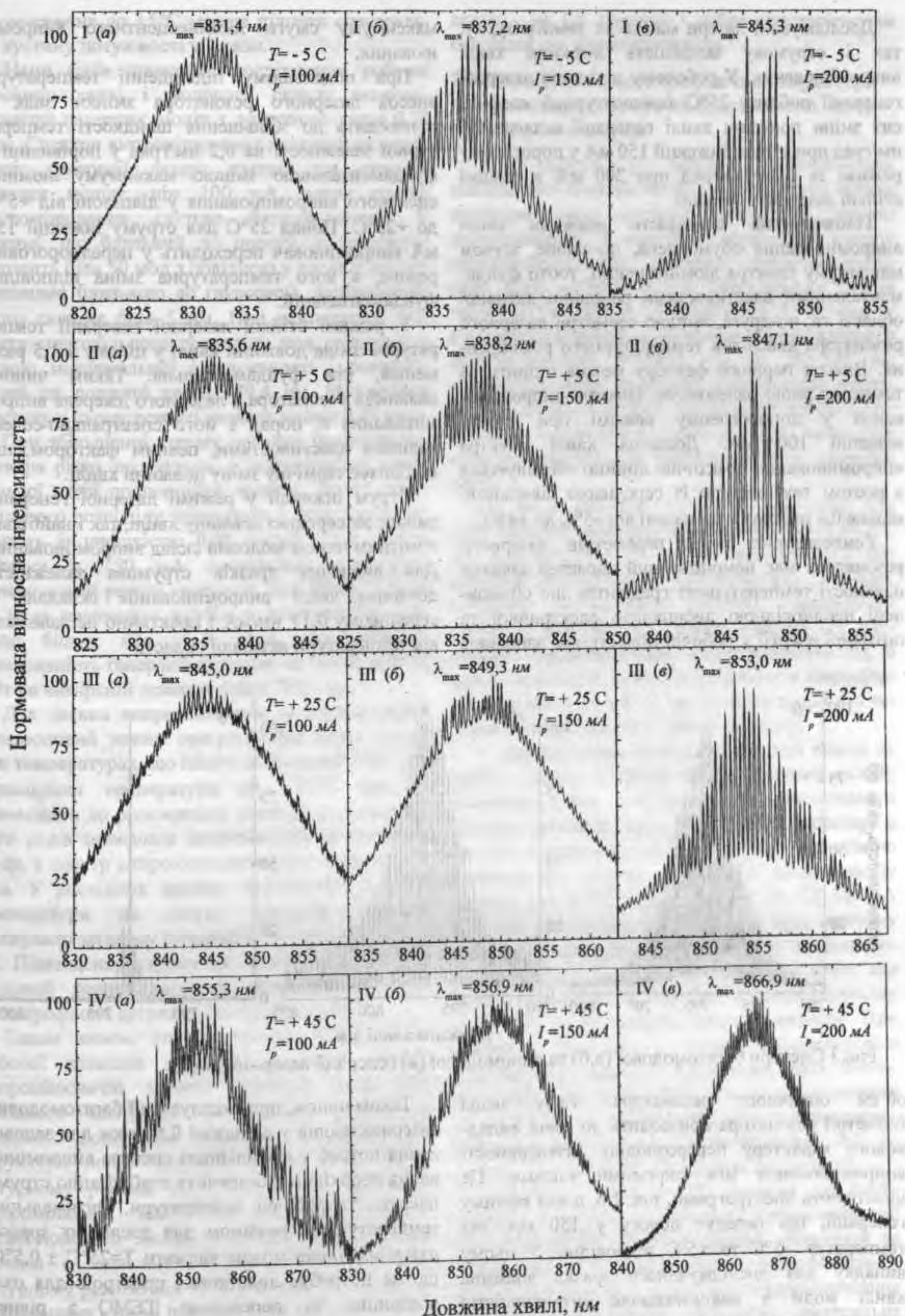


Рис.2 Нормовані спектри лазерних діодів для різних температур та струмів pompування, впорядковані за температурами у рядках I-IV:  $-5^{\circ}\text{C}$  (I);  $+5^{\circ}\text{C}$  (II);  $+25^{\circ}\text{C}$  (III) та  $+45^{\circ}\text{C}$  (IV) та за струмом накачки у стовбчиках а, б, в: 100 мА (а); 150 мА (б) та 200 мА (в).



Досліджувані лазери мають як температурну, так і струмову залежність довжини хвилі випромінювання. У робочому діапазоні лазерної генерації поблизу  $25^{\circ}\text{C}$  температурний коефіцієнт зміни довжини хвилі генерації складає  $0,6\text{ нм/град}$  при струмі інжекції  $150\text{ мА}$  у пороговому режимі та  $0,25\text{ нм/град}$  при  $200\text{ мА}$  в режимі стійкої лазерної генерації.

Температурна залежність довжини хвилі випромінювання обумовлена, по-перше, зсувом максимуму спектра люмінесценції, тобто фундаментальними властивостями речовини активної області та, по-друге, зміною геометрії лазерного резонатора внаслідок температурного розширення. Внесок першого фактору можна оцінити за температурною залежністю спектра випромінювання у допороговому режимі при струмі інжекції  $100\text{ мА}$ . Довжина хвилі спектра випромінювання практично лінійно збільшується з ростом температури із середньою швидкістю майже  $0,4\text{ нм/град}$  у діапазоні від  $-5^{\circ}\text{C}$  до  $+45^{\circ}\text{C}$ .

Температурна зміна параметрів лазерного резонатора має немонотонний характер завдяки наявності температурних градієнтів, що обумовлені неоднорідною дисипацією електричної та оптичної енергії у робочій області, яка заповнює

максимуму смуги люмінесцентного випромінювання.

При подальшому підвищенні температури внесок лазерного резонатора змінює знак и призводить до збільшення швидкості температурної залежності на  $0,2\text{ нм/град}$  у порівнянні з фундаментальною зміною максимуму люмінесцентного випромінювання у діапазоні від  $+5^{\circ}\text{C}$  до  $+25^{\circ}\text{C}$ . Понад  $25^{\circ}\text{C}$  для струму інжекції  $150\text{ мА}$  випромінювач переходить у передпороговий режим, а його температурна зміна відповідає фундаментальній.

У режимі стійкої лазерної генерації температурна зміна довжини хвилі у цілому в  $1,5$  рази менша, ніж фундаментальна. Таким чином, наявність резонатора у лазерного джерела випромінювання є, поряд з його спектрально-селективними властивостями, певним фактором, що стабілізує термічну зміну довжини хвилі.

Струм інжекції у режимі лазерної генерації змінює як середню довжину хвилі, так і найбільш помітним чином модовий склад випромінювання. Для вивчених зразків струмова залежність довжини хвилі випромінювання складала у середньому  $0,17\text{ нм/мА}$  і практично не залежала від температури активної області.

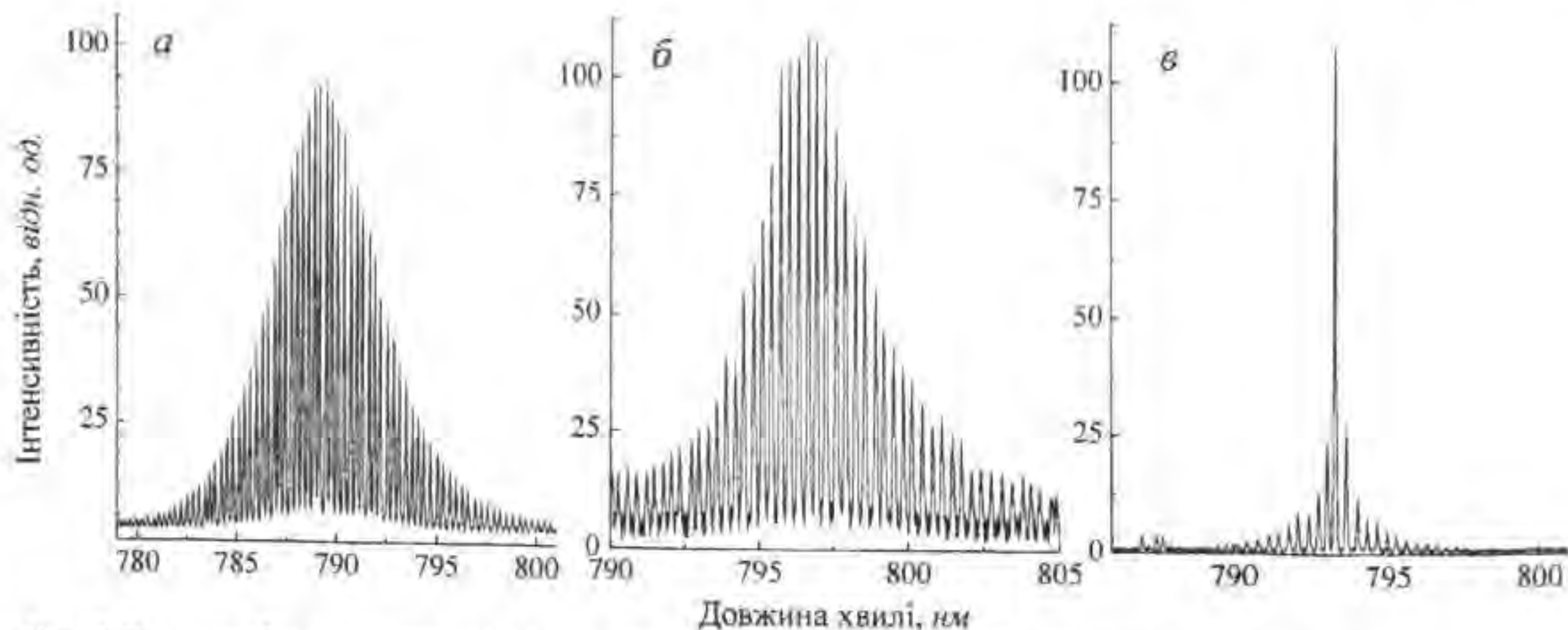


Рис.3 Спектри багатомодової (а,б) та одномодової (в) генерації лазерних діодів.

об'єм оптичного резонатора. Тому зміна геометрії резонатора призводить до зовні випадкового характеру перерозподілу інтенсивності випромінювання між окремими модами. Це ілюструють спектрограми, рис.2 б, д для режиму генерації, що передуює порогу у  $150\text{ мА}$  для температур  $-5^{\circ}\text{C}$  та  $+5^{\circ}\text{C}$  відповідно. У цьому випадку для досліджуваного зразка довжина хвилі моди з максимальною інтенсивністю зсунута у протилежну сторону до зміни

Таким чином, при експлуатації багатомодових лазерних діодів у діапазоні  $0,85\text{ мкм}$  для задоволення потреб у стабільності спектра випромінювання необхідно забезпечити стабілізацію струму накачки та робочої температури. Оптимальним температурним режимом для дослідних зразків лазерних діодів можна вважати  $T=25^{\circ}\text{C} \pm 0,5^{\circ}\text{C}$ , що не потребує додаткових пристроїв для охолодження. За допомогою ТЕМО з рівнем



охолодження до  $+5^{\circ}\text{C}$  можна підняти спектральну густину потужності у 2 рази.

Нами були проведені дослідження робочої довжини хвилі і модового складу випромінювання лазерних діодів з довжиною хвилі 0,79 мкм. Спектри випромінювання наведені на рис.3. Поріг генерації лазера настає при струмах накачки менше, ніж 100 мА, однак спектр випромінювання суттєво багатомодовий. У режимі, що близький до порогу, у генерацію виходить біля 50 мод з обвідною у вигляді дзвона (очевидно близькою до гауссової), напівширина якого складає біля 5 нм. При температурі  $5^{\circ}\text{C}$  центр спектрального розподілу мод співпадає з модою максимальної інтенсивності і розташований на довжині хвилі 789,4 нм. Міжмодова відстань у цьому режимі складає майже 0,05 нм.

При збільшенні струму накачки напівширина спектра різко звужується, а інтенсивність центральної моди пропорційно зростає. Центр спектрального розподілу зміщується у довгохвильову область із швидкістю 0,08 нм/мА. При струмі накачки у 150 мА досягається практично одномодовий режим генерації, при якому основна мода перевищує найбільш інтенсивні бокові моди більш, ніж у 3 рази (див. рис.3в). Інтенсивність генерації складала не менш, ніж 15 мВт на виміряній довжині хвилі 793,1 нм.

Для деяких випромінювачів із першої партії одномодовий режим генерації має місце тільки при температурах, що нижчі за кімнатну. Для них підвищення температури до  $+25^{\circ}\text{C}$  (рис.3б) призводить до розширення спектра, в результаті чого різко знижалася інтенсивність центральної моди, а спектр випромінювання стає багатомодовим. У дослідних зразках підвищення робочої температури на кілька градусів помітно знижувало загальну інтенсивність випромінювання. Підвищення струму не відновлювало одномодовий режим генерації впритул до умов катастрофічної деградації випромінювача.

Таким чином, спектроскопічні вимірювання робочої довжини хвилі та модового складу випромінювачів грають основну роль для вихідного контролю та відбору придатних лазерних діодів при підвищених вимогах до структури поля генерації. Причому у температурному режимі від  $+5^{\circ}\text{C}$  до  $+45^{\circ}\text{C}$  лазерний випромінювач має спектральний розподіл багатомодового лазера і потужність випромінювача є невисокою. При роботі у температурному режимі від  $+5^{\circ}\text{C}$  і нижче при деякому визначеному струмі інжекції (для кожного зразка свій), різко зростає потужність випроміню-

вання – на 1-2 порядки і добре спостерігається основний пік випромінювання.

### 2.3. Дослідження електрофізичних характеристик напівпровідникових одномодових лазерних випромінювачів.

Для роботи у складі акустооптичних аналізаторів спектра на базі бреггівських ґраток необхідно мати суттєво одномодові лазерні випромінювачі. У якості досліджуваних зразків напівпровідникових лазерних випромінювачів були взяті випромінювачі інжекційного лазера типу ІЛПН-210-1 А та ІЛПН-205 А, що мають одномодовий режим з довжиною хвилі лазерного випромінювання 800-810 нм та 780-790 нм відповідно. Були проведені дослідження залежності модового складу, потужності випромінювання та індикатрис, тобто діаграм напрямків випромінювання, від режимів роботи лазерних діодів.

На рис.4 наведені виміряні параметри для двох типових лазерних випромінювачів (І та ІІ), які відповідають (І) та не відповідають (ІІ) вимогам для роботи з бреггівськими ґратками. Показане формування спектра одномодової генерації залежно від струму накачки (а), ват-амперні характеристики випромінювачів (б), а також індикатрис випромінювання у паралельній (суцільна лінія) та перпендикулярній (пунктирна лінія) площинах гетеро-переходу.

У лазерних випромінювачах високої якості, як видно з рис.4 І, формування модового складу випромінювання і встановлення одномодового режиму генерації має рівномірний характер, а вихідна потужність випромінювачів монотонно залежить від струму інжекції. У допороговому режимі генерації при струмах  $I = 28\text{--}38$  мА відбувається генерація від 2 до 6 мод, причому зростання максимальної потужності випромінювання проходить за рахунок головної моди, але супроводжується її зсувом у довгохвильову область з підвищенням струму накачки. При струмі  $I = 38$  мА і вище спостерігається одномодовий режим з довжиною хвилі максимуму випромінювання 807,3 нм. У цьому режимі як спектр, так і індикатриса мають симетричну форму, а ват-амперна характеристика ЛД на далянці СЕ (рис.4 Іб) є близькою до лінійної.

Для деяких зразків ЛД, зокрема для показаного на рис.4 ІІ, у пороговому режимі генерації при струмах  $I = 30\text{--}44$  мА можна слідкувати за нерівномірним зародженням багатомодового режиму генерації, а максимум випромінювання зміщується хаотично, причому спектральне



положення основної моди змінюється стрибко-подібним чином у досить широких межах 808–810 нм. Лише при  $I > 46$  мА настає стаціонарний одномодовий режим з довжиною хвилі максимуму  $\lambda = 810$  нм.

Рівень стаціонарності динаміки формування лазерної генерації однозначно позначається на характері ват-амперних характеристик випромінювання, що безпосередньо демонструє рис.4. Нелінійність ват-амперних характеристик лазерів має місце у багатомодовому режимі генерації, особливо за стрибкоподібного перерозподілу мод випромінювання, а в стаціонарному одно-

генерації з максимумом  $\lambda_{\max} = 808,8$  нм у режим генерації п'яти мод з максимумом 808,0 нм. На відрізку при  $I = 42-44$  мА проходить перехід у одномодовий режим з максимумом  $\lambda_{\max} = 810$  нм.

Потужність випромінювання в одномодовому режимі для лазерів типу ИЛПН-205А лежить у межах 5-7 мВт, а для ИЛПН-201-1А – 2-6 мВт. Динаміка формування спектрів генерації ЛД накладає свій відбиток на індикатрису випромінювання лазерів.

Як видно з рис.4, індикатриси випромінювання у досліджуваних лазерних діодах мають практично рівні кути розходження як у площині,

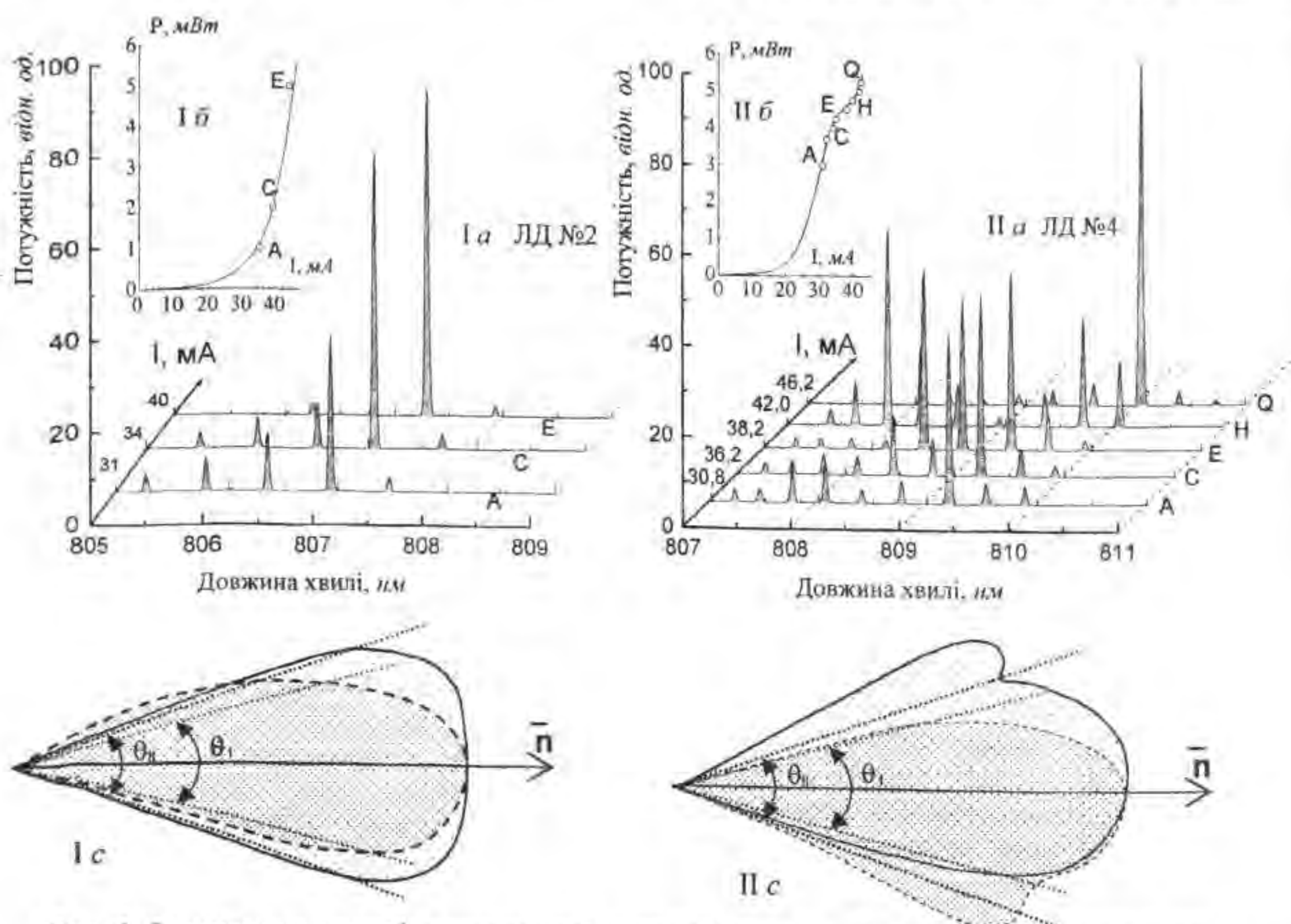


Рис. 4. Формування спектрів одномодової генерації (а) для двох лазерних діодів I та II. На вставках показані відповідні ват-амперні характеристики (б). Форма тіла випромінювання (с) є симетричною (Ic) за стійкої одномодової генерації, але має бокові пелюстки при наявності „сходинок” на ват-амперній характеристиці (Iic).

додому режимі залежність потужності випромінювання від струму pompування є лінійною. Стрибкоподібний характер зміни модового складу під дією струму інжекції безпосередньо проявляється на ват-амперній характеристиці генерації, яка набуває характерного нелінійного вигляду типу сходинок. Це добре видно на рис. 4 II, де при  $I = 38-42$  мА спектр випромінювання лазера переходить від трьохмодового режиму

що паралельна до площини гетеропереходу, так і в перпендикулярній площині. Тіло випромінювання лазерів має форму, що близька до симетричної лише в режимі стаціонарної одномодової генерації. Рис.4 Iic ілюструє вплив на індикатрису нелінійної динаміки формування спектра ЛД. При наявності „сходинок” на ват-амперній характеристиці на індикатрисі з'являються характерні бокові пелюстки, що є



небажаними для формуючої оптики, оскільки вони знижують ефективність використання потужності випромінювача.

Таким чином, контроль лінійності ват-амперної характеристики випромінювача може бути зручним засобом для надійного та швидкого визначення якості напівпровідникового лазерного діода, що дозволяє провести попередній відбір випромінювачів з точки зору їх придатності для застосування у пристроях акустооптики.

### 3. Висновки

В роботі досліджено формування спектрів випромінювання напівпровідникових лазерів в широкому діапазоні температур, проведено вимірювання електрофізичних параметрів, а також просторового розподілу поля випромінювання. Оптимальним температурним режимом для дослідних зразків лазерних діодів можна вважати  $T=25^{\circ}\text{C} \pm 0,5^{\circ}\text{C}$ , що не потребує додаткових пристроїв для охолодження. Попередня оцінка лазерного діоду встановлюється шляхом вимірювання ват-амперної характеристики, а її нелінійність є достатньою ознакою непридатності цього елементу для акустооптичних застосувань. Кореляція між формою ват-амперної характеристики та симетрією тіла випромінювання є зручним критерієм відбору лазерних діодів для розробки акусто-оптичних процесорів, що оброблюють НВЧ радіосигнали.

### Подяка

Автор виражає свою щиру подяку проф. Осінському В.І. за методичну та організаційну підтримку науково-дослідних робіт, що виконувались протягом довгого часу під час спільної роботи. Відповідальність за створення ряду акустооптичних зразків та їх елементів автор поділяє з численним колективом НДІ „Сатурн” (м. Київ), кваліфікацію і талант якого важко переоцінити і, не маючи можливості подя-

кувати кожному окремо, вважаю за необхідне виразити подяку інженерам Ульянову О.О. та Макарову В.А. за сумлінне виконання робіт по створенню експериментальних установок і проведенню великого обсягу поточних вимірювань за темою даної статті.

### Список використаних джерел

1. *Kashyap R. Fiber Bragg Gratings.*—Academic Press, San Diego, USA, 1999.—458p.
2. Акустооптическая обработка сигналов: тематический выпуск, под ред. Вандерлюгта Э. // ТИИЭР — 1981 — 69, №1 — С.3-137.
3. Вознесенский В.А., Гассанов Л.Г., Фелинский Г.С. Интегральные оптические компоненты на основе акустооптической дифракции в микроволноводах // Известия вузов МВ ССО СССР. Радиоэлектроника — 1984 — 27, №8 — с.9-16.
4. Андрушко Л.М., Вознесенский В. А., Фелинский Г.С. Дифракция поверхностных оптических волн на термостимулированной фазовой решетке в титан-диффузном волноводе в ниобате лития. // ЖТФ — 1987 — 57, №1 — С.176-177.
5. Андрушко Л.М. Вознесенский В. А., Тариелашвили Г.Т., Фелинский Г.С. Исследование дифракции оптического излучения на термостимулированной решетке в планарных микроволноводах. // УФЖ — 1987 — 32, №9 — С.1345-1349.
6. Балакиев В.И., Парыгин В.Н., Чирков Л.Е. Физические основы акустооптики. — М.: Радио и связь, 1985.— 429с.

Надійшла до редколегії 2.03.07



УДК 533.9

Черняк В.Я., д.ф.-м.н., проф., Юхименко В.В.,  
аспірант, Слюсаренко Ю.І., інженер

## Конверсія етанолу в плазмі газового розряду з рідкими стінками

В роботі представлені результати досліджень конверсії етанолу в електричному розряді з рідкою стінкою. Для дослідження плазми розряду використовувався емісійний аналіз. Для визначення стабільних газо-фазних продуктів конверсії використовувалась мас-спектрометрична методика. Вимірювались енерговитрати на конверсію етанолу в синтез-газ.

Ключові слова: розряд, газовий канал, синтез-газ.

\*E-mail: chern@univ.kiev.ua, yvitaliy@ukr.net

### Introduction

Modern interesting applications of low-power ( $\sim 100$  W) gas discharges are their use for plasma conversion of liquid fuels on vehicles for enrichment fuels by free hydrogen [1,2]. The conversion of ethanol in scantily investigated electrical discharges in the gas channel with a liquid wall is considered in this work.

Different researches were spent in the work: the analysis of gas-phase products of ethanol conversion, calorimetric researches and the power inputs on conversion of ethanol in synthesis – gas were measured. A few experimental set-ups were used for these researches.

### Experimental set-up

Experimental set-up for investigation of stable gas-phase conversion products is shown on Fig.1. It consists of a quartz tube from above tightly closed by a cover. The inner diameter of a quartz tube was 50 mm. Height of a tube was 100 mm. The discharge burned between the cylindrical copper cathode ( $\varnothing$  5 mm, length 5 mm) and cylindrical molybdenum anode ( $\varnothing$  1 mm, length 5 mm). The cathode was located in end-wall glass tube with an inner diameter – 6 mm. The end-wall had an aperture with diameter – 3 mm. The volume of liquid was hold constant with the help of informed vessels system. The level of a liquid in a tube was 50 mm. The axis of electrode

Chernyak V.Ya., doctor of science, Yukhymenko V.V., graduate student, Slyusarenko Y.I., engineer

## Conversion of ethanol in plasma of the gas discharge with liquid walls

The results of researches of ethanol conversion in the electrical discharge with a liquid wall are presented in work. The emission analysis for investigation of discharge plasma was used. The mass-spectrometric technique for investigation of stable gas-core conversion products was used. The power inputs on conversion of ethanol in synthesis – gas were measured.

Key Words: discharge, gas channel, synthesis – gas.

gap was on depth – 30 mm. On a tube with the cathode inlet the gas which formed the gas channel between the cathode and anode.

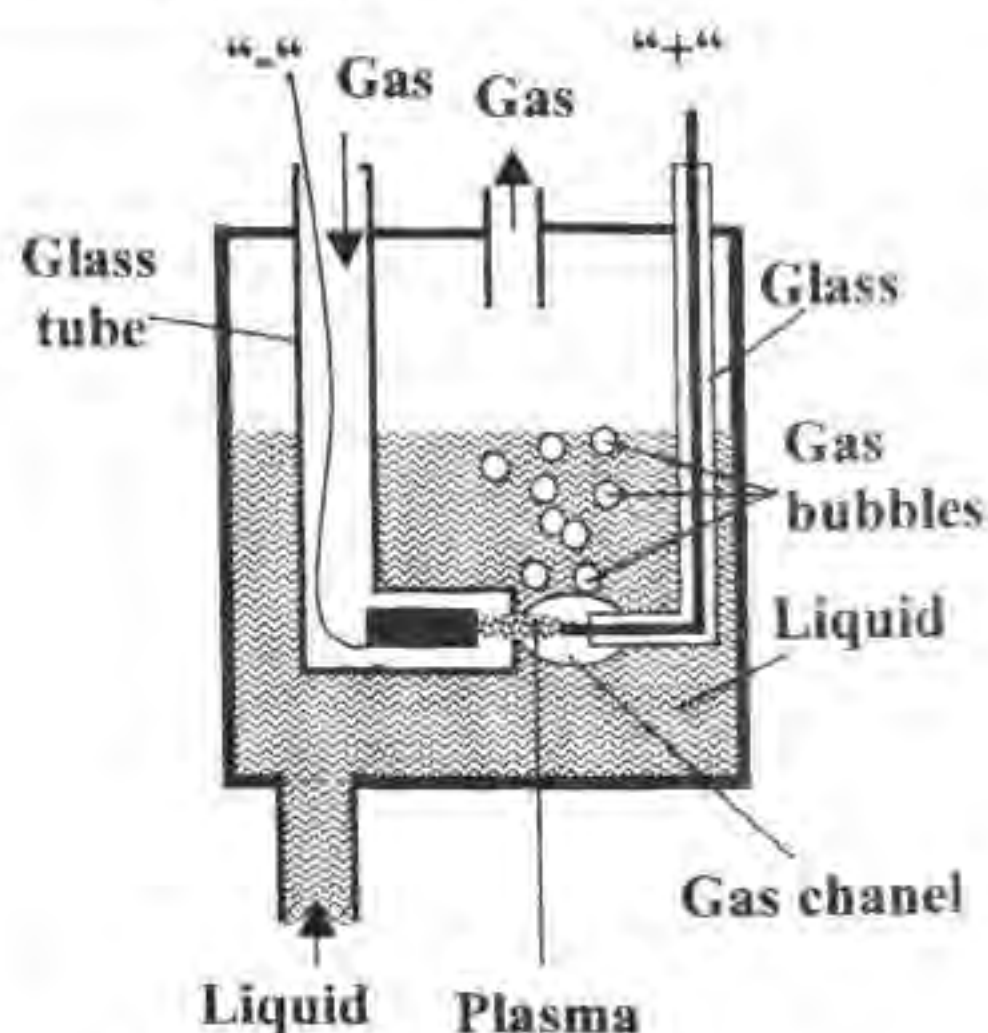


Fig. 1 Experimental set-up for investigation of stable gas-phase conversion products.

The exhaust gas on polyethylene tube (inner diameter – 8 mm) was outlet in two consecutive condensers. The exhaust gases for the mass-spectrometric analysis were taken from the polyethylene channel through piezoelectric gate after cooling in condensers. Whole length of the outlet channel between an output from reactor and input in the mass – analyser was – 1 m.



Experimental set-up for measurement of liquid temperature and the power inputs on conversion of ethanol in synthesis – gas is shown on Fig. 2. It consists of quartz cylinder 1 with diameter 50 mm and length 170 mm. Top and bottom of the cylinder were hermetically sealed by duralumin flanges 2, in

constant by means of tube 8 built in top flange. Tube 9 built into the top flange was used for outputting gaseous products produced during the plasma treatment of solution.

DC source was used to supply the discharge 5, which burns inside gas channel with liquid wall. The

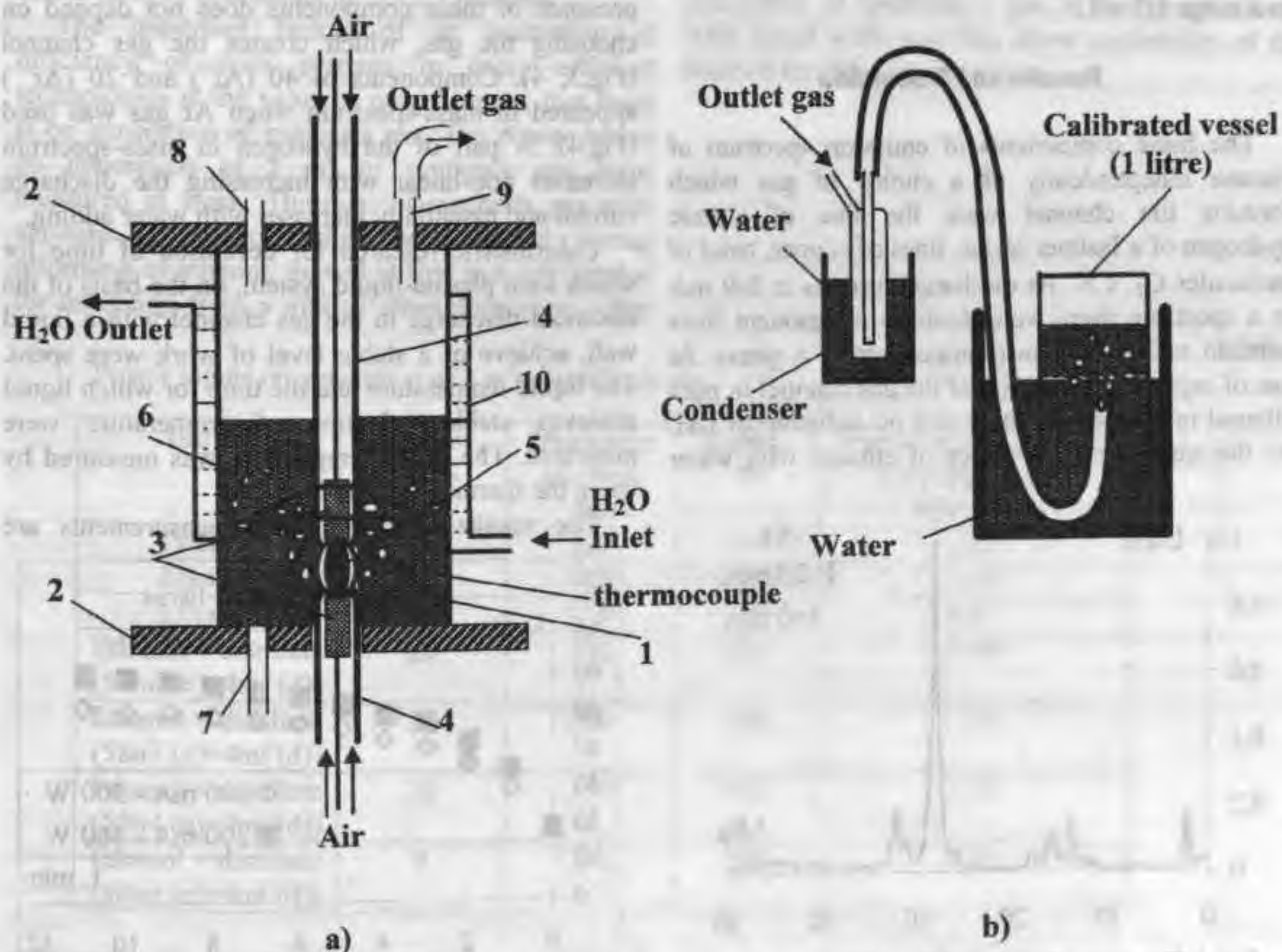


Fig. 2 Experimental set-up for measurement of liquid temperature (a) and the power inputs on conversion of ethanol in synthesis – gas (b).

which the system of electrodes was built in. Cylindrical metal electrodes 3 were placed inside glass tubes 4. Electrodes of 3-mm diameter and of 40-mm length inside glass tube, which was narrowed on the end and its outlet was of 4-mm diameter, were used. Flows of air directed into these glass tubes along to the top and to the bottom electrodes were colliding and forming stable gas channel, which connects two electrodes. The distance between electrodes was 10 mm. Air flow rate was controlled by rotameter. The liquid 6 was input to the reactor through the tube 7 built into the bottom flange. The level of liquid was kept constant by using the system of communicating vessels. Pressure inside the reactor and communicating vessels was maintained

intensive heat release occurs during discharge burning and leads to the rapid heating of the liquid and walls of the reactor. Therefore the water-cooling system was used. Cold water permanently flows through the casing 10, which covered the quartz cylinder, and cools walls of the reactor. Flanges were cooled by water-cooling system.

Plasma radiation was measured by portable rapid PC-operated CCD-based multi-channel optical spectra analyser (MOSA), which has a wide wavelength survey (200-1100 nm) with spectral resolution ( $\sim 0.75$  nm).

The monopolar mass-spectrometer MX 7301 was used for the mass analysis. The pressure of residual gas in the analyser was not higher  $5 \cdot 10^{-6}$  torr. The



pressure of gas in mass-spectrometer at the analysis of exhaust gases was  $5 \cdot 10^{-5}$  torr.

The argon and dry air were the gases which form the channel in a liquid. The flow of gas was 20 ml/s. The ethanol and mix of ethanol with water were treated liquids. The part of ethanol in a mix changed in a range  $1/3 \div 1$ .

## Results and Discussion

The basic components of emission spectrum of plasma independently of a choice of gas which forming the channel were the line of atomic hydrogen of a Balmer series, lines of copper, band of molecules  $C_2$ , CN. At discharge currents  $\geq 200$  mA in a spectrum there were doublets of resonant lines sodium and potassium (components of a glass). At use of argon for formation of the gas channel in pure ethanol in a spectrum there was no radiation of OH. At the same time for mixes of ethanol with water

independently of a choice of gas (Ar, air) and pure ethanol with the air channel there was a presence of radiation of OH.

The main stable components of the exhaust gas of reactor were  $M/e = 2(H_2^+)$ , 12 ( $C^+$ ), 14, 16, 18 and 28 ( $CO^+$  and  $N_2^+$ ) under ethanol conversion. The presence of these components does not depend on choosing the gas, which creates the gas channel (Fig.3, 4). Components of 40 (Ar) and 20 (Ar) appeared in mass-spectrum when Ar gas was used (Fig.4). A part of the hydrogen in mass-spectrum increases non-linear with increasing the discharge current and essentially increases with water adding.

Calorimetric research for definition of time for which such plasma-liquid system, on the basis of the electrical discharge in the gas channel with a liquid wall, achieve of a stable level of work were spent. The liquid temperature and the time for which liquid achieves stable valuation of temperature were measured. The liquid temperature was measured by using the thermocouple (Fig. 2 (a)).

The results of temperature measurements are

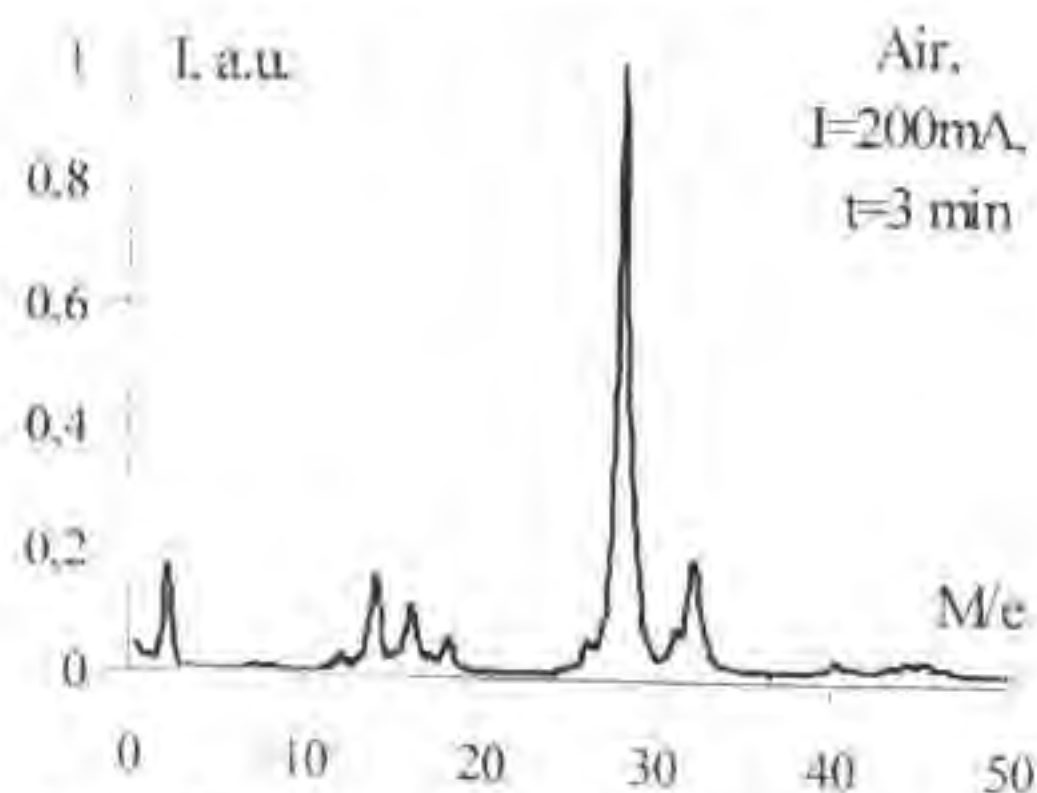


Fig. 3 The mass-spectrum of the exhaust gas of reactor when the air was the gases which form the channel in a liquid.

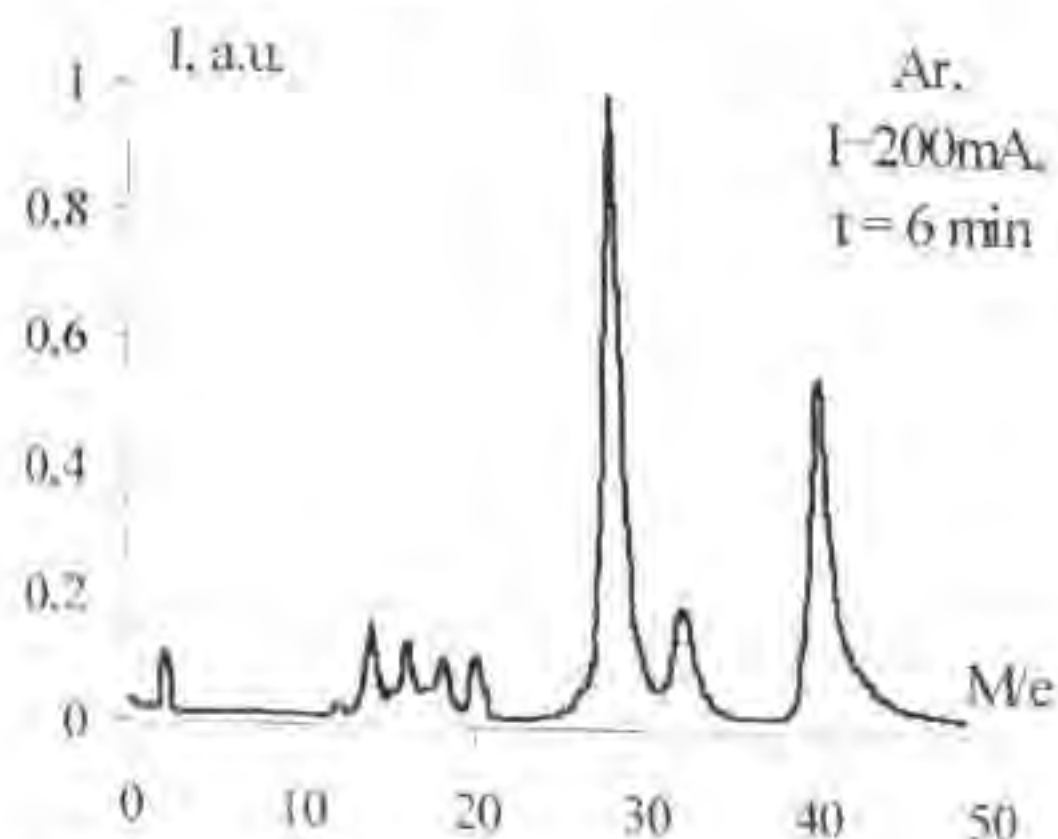


Fig. 4 The mass-spectrum of the exhaust gas of reactor when the Ar was the gases which form the channel in a liquid.

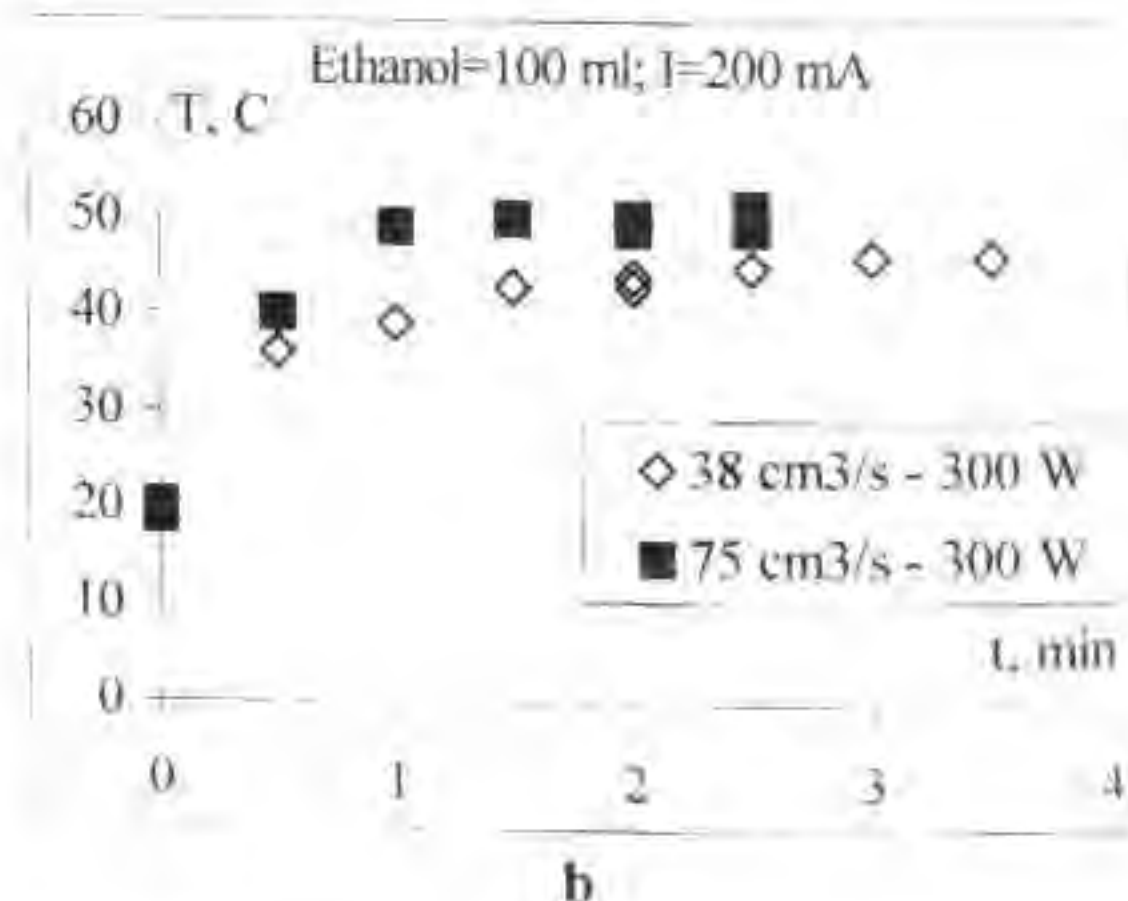
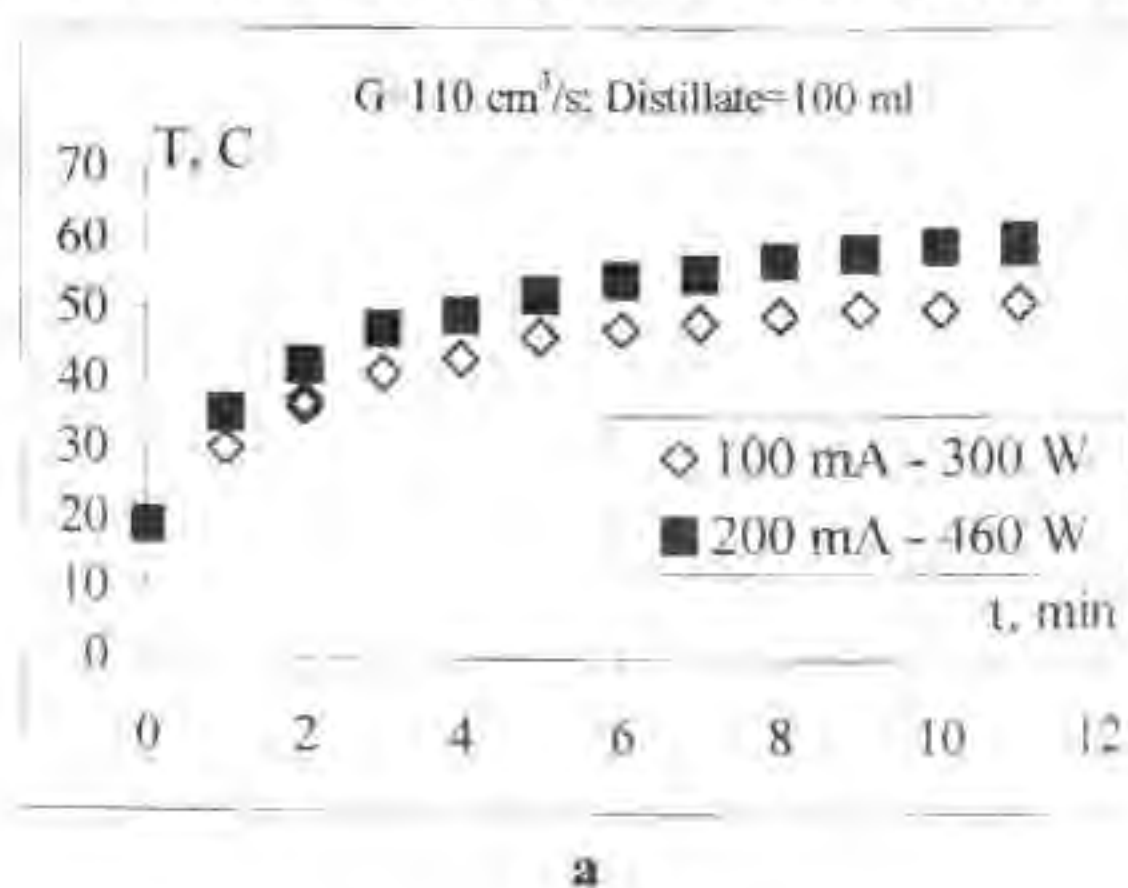


Fig. 5 Dependences of liquid temperature from discharge burning time: a – water (distillate); b – ethanol.



shown on Fig. 5. On Fig. 5 (a) represented results for a case when distillate was used as a liquid, and on Fig. 5 (b) represented results for a case when ethanol was used as a liquid. For a case of work with distillate the system achieves a stable level for 8 - 9 minutes. And at work with ethanol system achieve a stable level of operations for 2 - 2,5 minutes.

The important factors of an estimation of efficiency of such systems in energy-efficient technologies is the value of power inputs, that there is on generation of synthesis gas. The power inputs on generation of 1 m<sup>3</sup> of synthesis gas were measured in work. The mix, of synthesis gas with vapours of ethanol, which was formed during reforming of ethanol, moved at first in a refrigerator for removing from a mix of ethanol vapours. After

The part of hydrogen is essentially increases under discharge current increasing.

2. Water adding into the ethanol leads to the increasing of hydrogen amount produced in the discharge.

3. The amount of energy expenditures on generation of synthesis – gas in the gas discharge with liquid walls specifies about availability of this method for ethanol conversion.

Table

Power inputs on generation of 1 m<sup>3</sup> of synthesis gas.

| Liquid                                  | Gas flow, cm <sup>3</sup> /s | Discharge current, mA | Power, W | Power inputs on 1 m <sup>3</sup> of synthesis gas, kW*h/m <sup>3</sup> |
|-----------------------------------------|------------------------------|-----------------------|----------|------------------------------------------------------------------------|
| Ethanol                                 | 20                           | 300                   | 117      | 2,2                                                                    |
| Ethanol                                 | 0                            | 300                   | 300      | 5,67                                                                   |
| Ethanol                                 | 0                            | 400                   | 240      | 3,07                                                                   |
| Ethanol + distillate (58ml (e)+4ml (d)) | 20                           | 150                   | 225      | 1,98                                                                   |
| Ethanol + distillate (58ml (e)+4ml (d)) | 20                           | 200                   | 140      | 1,9                                                                    |
| Ethanol + distillate (58ml (e)+4ml (d)) | 20                           | 250                   | 175      | 1,54                                                                   |
| Ethanol + distillate (58ml (e)+4ml (d)) | 0                            | 200                   | 300      | 3,33                                                                   |

refrigerator the synthesis gas moved in calibrated volume (Fig. 2 (b)). The time for which volume is filled by gas was fixed. Knowing parameters of the discharge and the time for which are filled volume the power inputs on generation of 1 m<sup>3</sup> of synthesis gas was calculated. The results are submitted in the table.

The power inputs on conversion of ethanol in synthesis - gas in the electrical discharge in the gas channel with a liquid wall depend on gas, which forms the channel, decrease at addition of water in ethanol. The minimal valuation of power inputs in the investigated modes was 1,5 kW\*h/m<sup>3</sup>, that indicate on great availability of the considered approach [3].

### Conclusions

1. The main stable gas components in the outlet of the reactor are H<sub>2</sub>, CO under ethanol conversion.

### References

1. Bromberg L., Cohn D.R., Rabinovich A., Heywood J. Emissions reductions using hydrogen from plasmatron fuel converters // Int. Journal of Hydrogen Energy. – 2001. - v 26. - P. 1115-1121.
2. Bromberg L., Cohn D.R., Rabinovich A., Alexeev N., Samokhin A., Hadidi K., Palaia J., Margarit-Bel N. Onboard plasmatron hydrogen production for improved vehicles // MIT Plasma Science and Fusion Center. – 2006. – 173 P. / <http://www.psfc.mit.edu/library1/catalog/reports/2000/>.
3. Djakov A.F., Rusanov V.D. Hydrogen in energy in long-term prospect / <http://www.worldenergy.org/wec-geis/publications/>.

Received 06.03.07



УДК 519.9

Шаповал В.О., ст., Черняк\* В.Я., д-р фіз.-мат. наук., проф., Юхименко В.В., асп., Наумов В.В., канд. фіз.-мат. наук, Мізерачек Й., д-р, проф., Дорс\* М., д-р.

### Особливості плазмової обробки водних розчинів фенолу в плазмово-рідинній системі з вторинним розрядом

В роботі досліджено плазмову обробку водних розчинів фенолу в газорідинному плазмо-хімічному реакторі з вторинним розрядом в режимах "рідкого" аноду та "рідкого" катоду. Методами оптичної УФ спектрофотометрії проаналізовано продукти та сам процес деструкції фенолу після обробки. Знайдено, що деградація фенолу йде і після припинення дії плазми, що еквівалентно зменшенню витрат енергії та збільшенню загальної ефективності обробки. Вивчено дію малих доз УФ опромінення на стабілізацію водних розчинів після плазмової обробки. Показано, що властивості вихідного продукту в процесі його старіння після обробки залежать від концентрації фенолу.

Ключові слова: плазмохімія, вторинний розряд, фенол, деструкція.

V. O. Shapoval, st., V. Ya. Chernyak\*, Prof., V. V. Yukhymenko, asp., V. V. Naumov, Dr.Sci., J. Mizeraczyk, Prof., M. Dors\*, Dr.Sci.

### The features of plasma treatment of aqueous phenol solutions in a plasma-liquid system with a secondary discharge

The technology of plasma processing of aqueous phenol solutions in a gas-liquid plasma-chemical reactor with a secondary discharge in regimes of "liquid" anode and "liquid" cathode is studied. The products and the process of the phenol destruction after the treatment are analyzed by means of optical UV spectrophotometry. The effect of prolonged phenol degradation after the end of the plasma action lowering the energy consumption and raising the total efficiency of the treatment is demonstrated. The action of low-dose UV irradiation on the stabilization of plasma-treated phenol solutions is also investigated. It is shown that the properties of the output product during its aging after the treatment depend on the phenol concentration

Key Words: plasma-chemistry, secondary discharge, phenol, destruction.

\*E-mail: [chern@univ.kiev.ua](mailto:chern@univ.kiev.ua), [dors@ipm.gda.pl](mailto:dors@ipm.gda.pl)

### Introduction

Phenol ( $C_6H_5OH$ ) and its products in aqueous solutions are harmful organic pollution in human environment. Phenol molecules in water and liquids are stable and not degrade itself in natural conditions. Therefore, removal of these pollutants from waste water is an actual issue of science and technology worldwide [1].

One of most efficient approaches is the use of non-equilibrium gas discharge plasma processing of polluted water in plasma-liquid systems at atmospheric pressure. Several types of electric discharges (corona, glow, gliding arc, etc) were tested, and some of them were demonstrated to be effective in phenols destruction [2-7].

In most works the efficiency of the plasma treatment is estimated by the measurements of the phenol content in water during the treatment and just after that. But in most cases the lability of plasma-treated solutions in the long-term period after the treatment is out of control, and this issue is still not investigated well [8].

This work presents first results of our study of the efficiency of plasma processing of phenol solutions in a plasma-liquid system with a secondary discharge, including research into the process of phenol degradation through the whole period of stabilization of plasma-treated solutions after the treatment, and also the influence of low-dose UV irradiation on that process.

### Experiment

Experiments were conducted in a plasma-liquid reactor with a secondary discharge according to the scheme presented in Fig. 1. The primary transverse arc discharge was burned between two copper rod electrodes (1) in the flow of compressed atmospheric air that was blowing between the electrodes through the stainless steel nozzle. This arc was served as an auxiliary discharge for the secondary (non-self-sustained) discharge that was burned between the arc and the aluminum tube electrode (2) which was used for supply of the treatable water solutions into the reactor. So the voltage of the secondary discharge was applied between the electrodes (1) and (2).



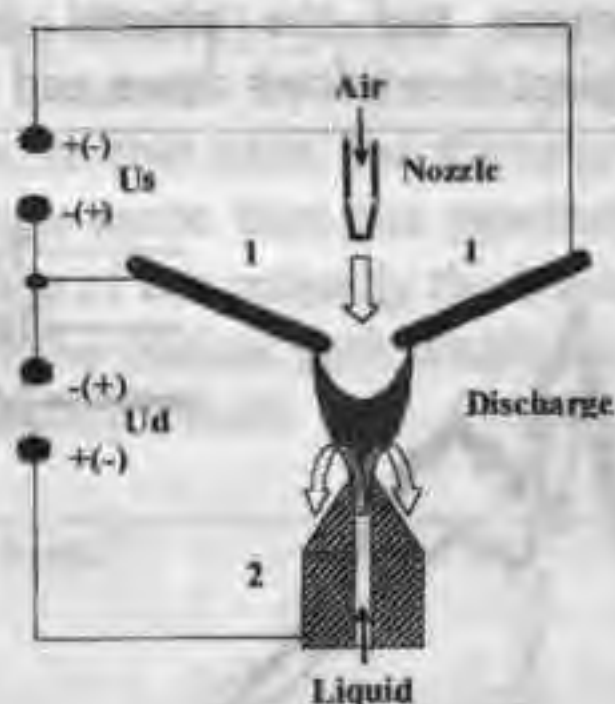


Fig. 1 Scheme of the electric discharge plasma-liquid reactor

The reference 1 mM phenol solution was prepared by dissolving an analytical-grade phenol in distilled water of crystal quality. The test solutions were prepared by further water diluting. In some test solutions, a small amount of iron sulfate (0.08 mM  $\text{FeSO}_4$ ) was added as a catalyst to enhance the phenol decomposition for study of influence of Fenton reaction ( $\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{OH}^- + \text{OH}$ ) on phenol destruction [9].

The test solutions were processed in the plasma-liquid reactor under various operational modes: with and without secondary discharge, with positive (+) and negative (-) potential of the "liquid" electrode in respect of the arc as is shown in Fig. 1.

The discharge system was powered by the HV source with dropping output characteristics through the ballast resistance in the circuit. The auxiliary discharge had typical voltage  $U = 2$  kV and current  $I = 400$  mA. The secondary discharge had voltage  $\sim 1.5$  kV, and its current  $I_d$  varied from 100 to 200 mA. The air flow rate was 75 ml/s, the water flow rate was 50 ml/min. The processing time varied from 2 to 10 min.

### Diagnostics

The content of phenol and its products in water was analyzed by the optical UV spectrophotometry using the scanning monochromator LOMO KSVU23 with the spectral resolution  $\sim 0.1$  nm in the range of 200-400 nm, and spectrometer SOLAR CCD SL-40-2-3648 with the spectral resolution  $\sim 0.7$  nm in the range of 200-1100 nm. The standard deuterium lamp DDC-30 served as the spectral reference lamp.

All test solutions after the plasma processing were incubated at room temperature for the stabilization, and their properties were measured routinely every day during several days.

In a number of cases, the influence of low-dose UV irradiation on the process of stabilization of plasma-treated solutions was studied. For that, some

test solutions were put into the quartz optical cell of 1 cm depth where they were irradiated by the deuterium lamp DDC-30 with the brightness of  $6 \times 10^{-9}$  Wt/m<sup>2</sup>sr at the wavelength of 300 nm, radiating at the spatial angle of  $8 \times 10^{-3}$  sr.

## Results and discussions

### Properties of distilled water after plasma treatment

The spectral analysis of distilled water just after the plasma processing has shown that the main output products are the hydrogen peroxide ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ), nitrous and nitric acids ( $\text{HNO}_2$ ,  $\text{HNO}_3$ ) and nitrate ions  $\text{NO}_3^-$ . According to our measurements, these oxidizing agents in water are produced more efficiently in the secondary discharge with the "liquid" anode.

During the stabilization of plasma-treated water and their ageing, the content of  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{HNO}_2$  and  $\text{NO}_2^-$  dropped down while the content of  $\text{NO}_3^-$  grown up. It means that the after-oxidation of dissolved trivalent nitrogen in plasma-treated water continues some time after the plasma treatment too. The typical optical absorption spectra of plasma-treated distilled water are shown in Fig. 2.

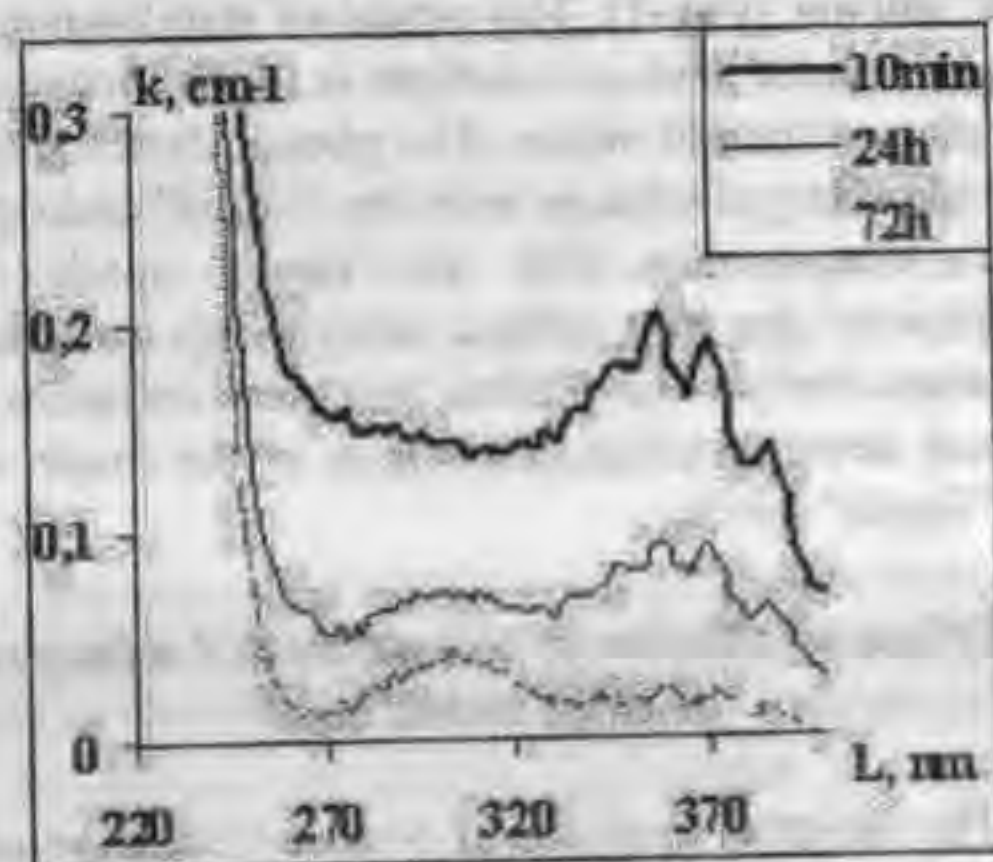


Fig. 2 Optical absorption spectra of distilled water after the plasma treatment in the secondary discharge at different time moments: 10 min, 24 hours, and 72 hours. "Liquid" cathode. Current  $I_d = +200$  mA.

### Properties of aqueous phenol solutions after plasma treatment

The spectral analysis of test phenol solutions after the plasma processing has shown that the efficiency of phenol destruction just after the treatment is not exceeded of 30%. Then, during the stabilization of



plasma-treated solutions and their ageing the phenol decomposition in water reaches 100%.

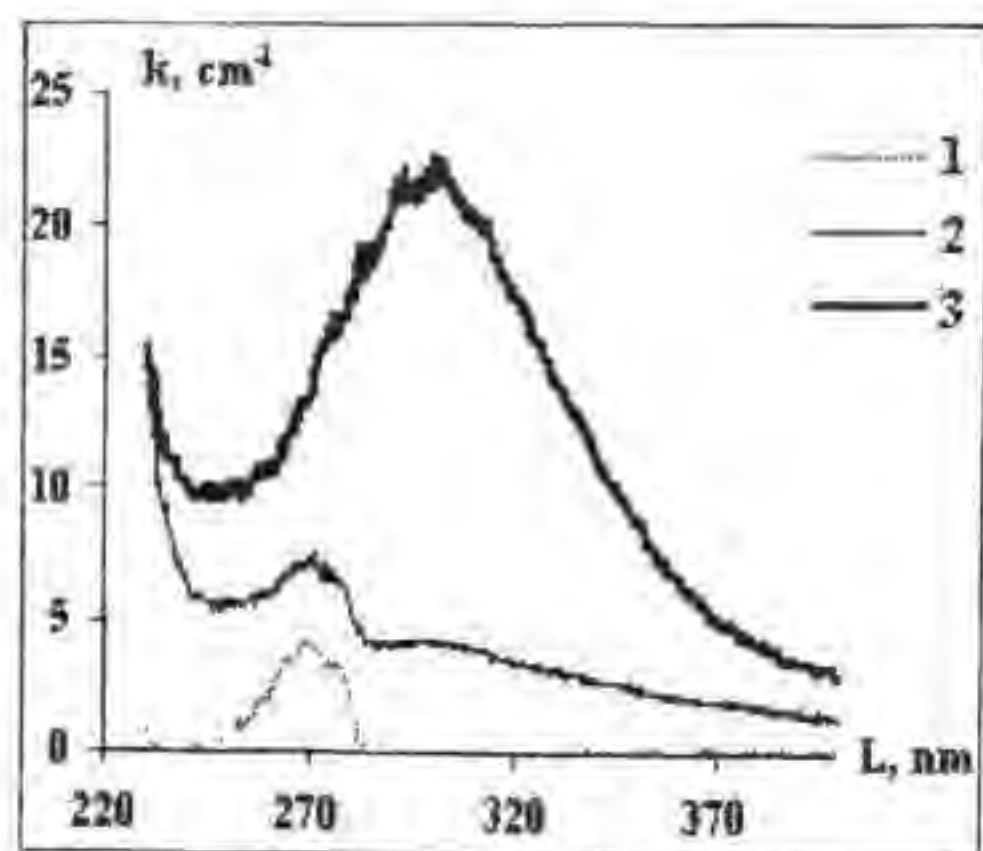


Fig. 3 Optical absorption spectra of 1 mM phenol solutions with 0.08 mM iron sulfate catalyst before (curve 1) and after (curve 2, 3) plasma treatment at different time moments: 10 min (curve 2) and 6 days (curve 3). "Liquid" cathode. Current  $I_d = +200$  mA.

Noticeable changes in spectral properties of test solutions occur several days. The pure phenol had a spectral band of UV absorption at 275 nm. But the final products in water have a wide spectral band near 300 nm (Fig. 3). The period of stabilization for plasma-treated phenol solutions is much longer than for plasma-treated water. The phenol destruction in the secondary discharge with the "liquid" cathode is much deeper than with the "liquid" anode. The addition of the iron sulfate catalyst into the phenol solutions before the plasma treatment enhances the phenol decomposition, especially in the mode with the "liquid" anode.

#### Effects of dilution of plasma-treated solutions on their stabilization

The spectral analysis of plasma-treated aqueous phenol solutions has shown that the process of stabilization of test solutions after the plasma processing depends on the phenol concentration, i.e. on the degree of its dilution with water. Thus, the undiluted phenol solutions have changed their properties rather quickly (see Fig. 4) whereas the test solutions that are diluted with distilled water have no visible changes for a long time (see Fig. 5). It means that the process dramatically depends on the concentration of chemically active agents which are responsible for the chemical reactions in water media. In case of the strong dilution the concentration of oxidants in plasma-treated solutions

becomes insufficient for the continuation of oxidation reactions and the phenol degradation becomes inefficient then (slows down and stops).

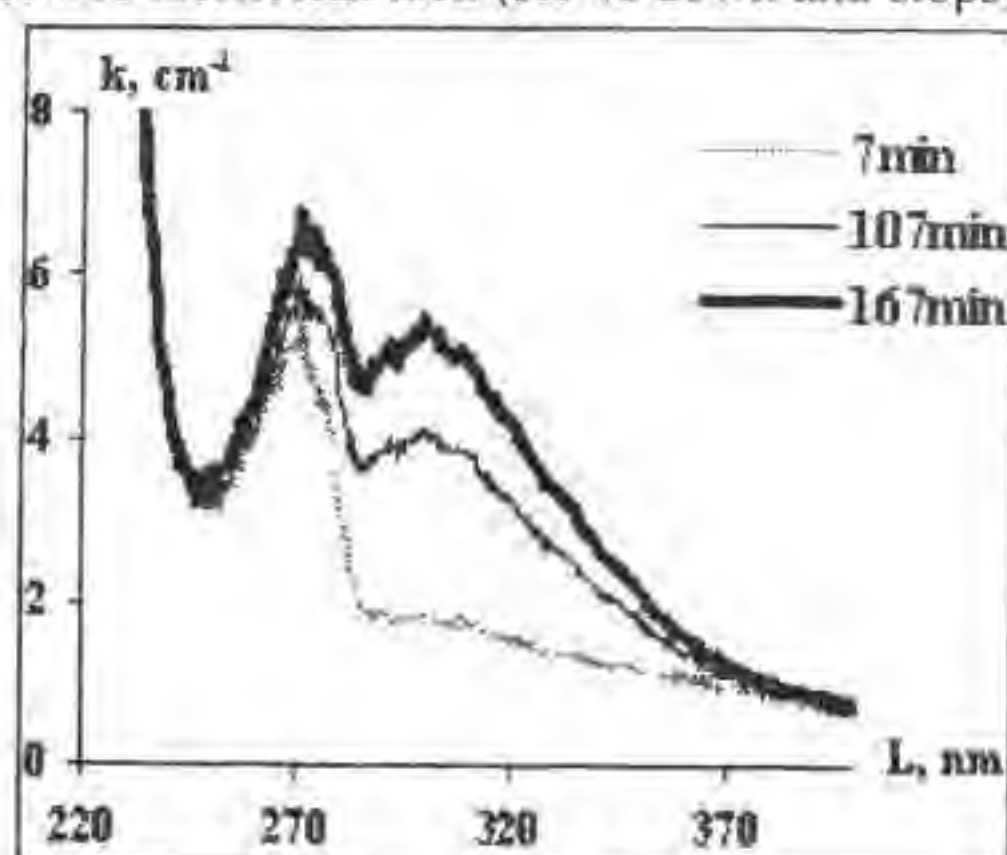


Fig. 4 Optical absorption spectra of plasma-treated 1 mM phenol solutions at different time moments after the plasma treatment: from 7 to 167 min. "Liquid" cathode. Current  $I_d = +200$  mA.

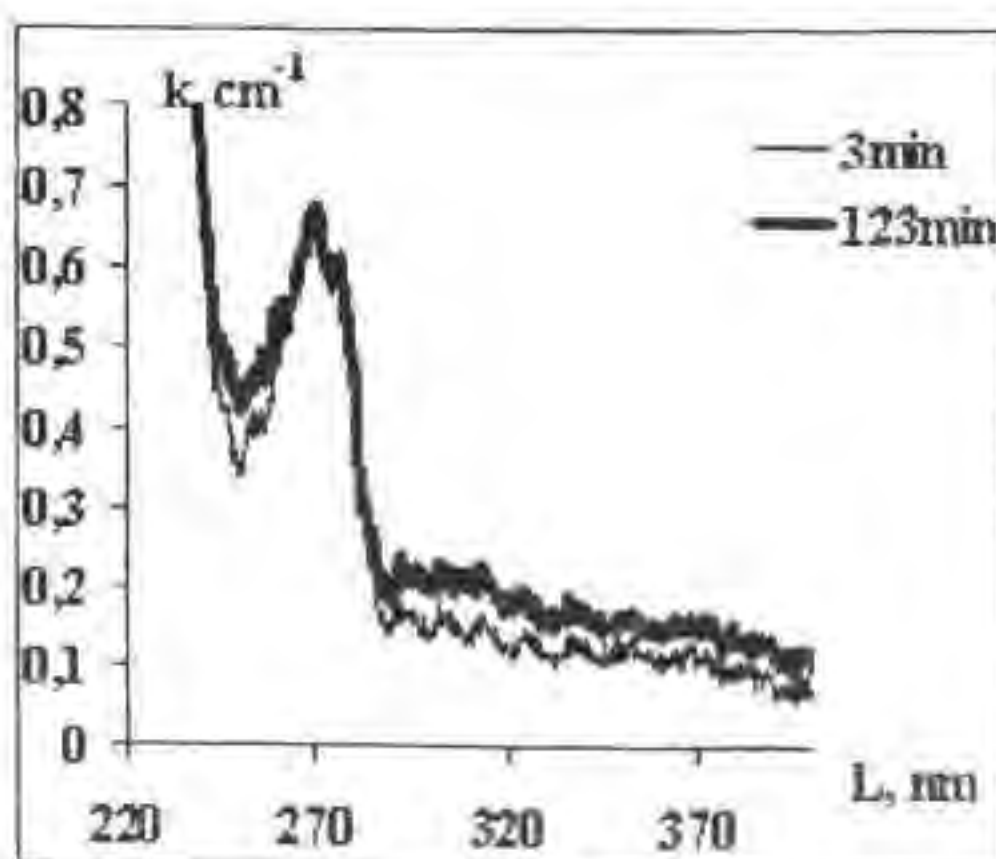


Fig. 5 Optical absorption spectra of plasma-treated 1 mM phenol solutions, diluted with distilled water by 10 times, measured at different time moments after the dilution: from 3 to 167 min. "Liquid" cathode. Current  $I_d = +200$  mA.

#### Effects of low-dose UV irradiation on the stabilization of plasma-treated solutions

The spectral analysis of plasma-treated aqueous phenol solutions after the additional UV irradiation has shown that the process of stabilization of test solutions depends on their initial conditions.

The low-dose UV irradiation has no practical influence on the initially non-treated 1 mM phenol solutions with the iron sulfate catalyst additions even in case of the long-term UV exposure (Fig. 6). Also, the low-dose UV irradiation does not alter the



plasma-treated phenol solutions in case of their actual (non-diluted) phenol concentration. It is obviously caused by the strong optical UV absorption. In that case, the thickness of the optical cell is much more than the penetration of the UV light (in case of the optically thick medium,  $d \gg k_0^{-1}$ , where  $d$  is the optical path length, and  $k_0$  is the UV absorption coefficient).

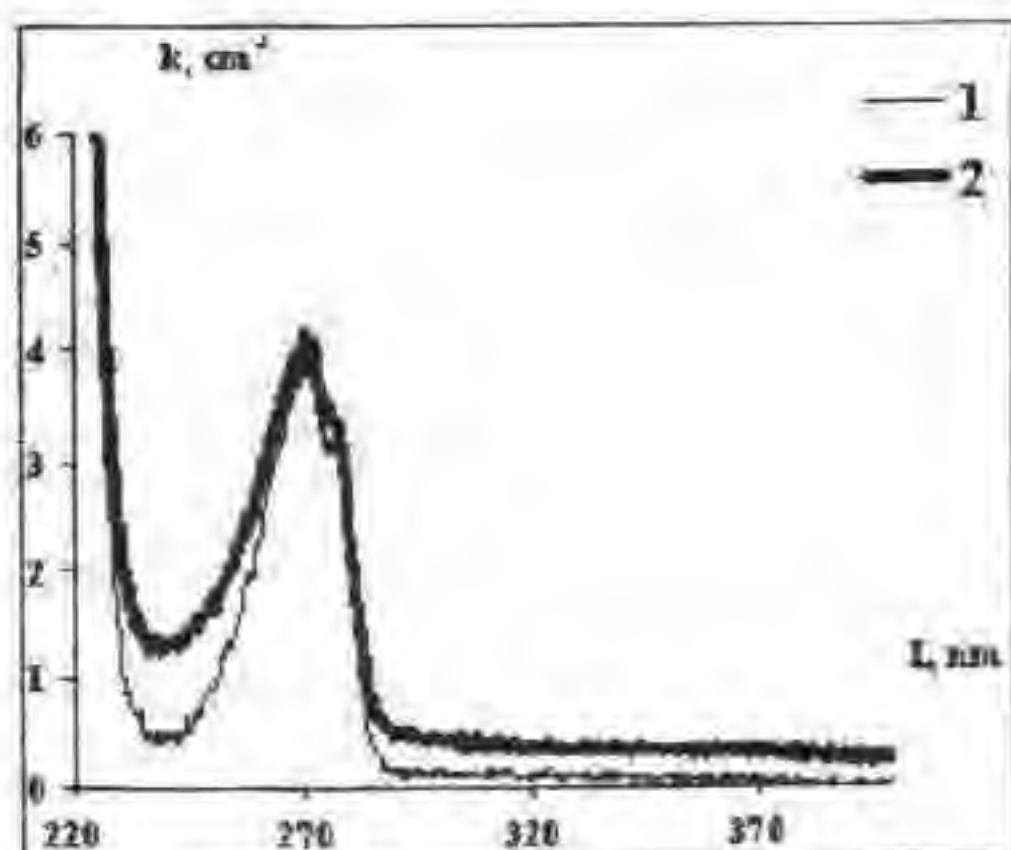


Fig. 6 Optical absorption spectra of the non-treated 1 mM phenol solution with 0.08 mM iron sulfate catalyst after the low-dose UV irradiation during 50 min (curve 1) and 18 hours (curves 2).

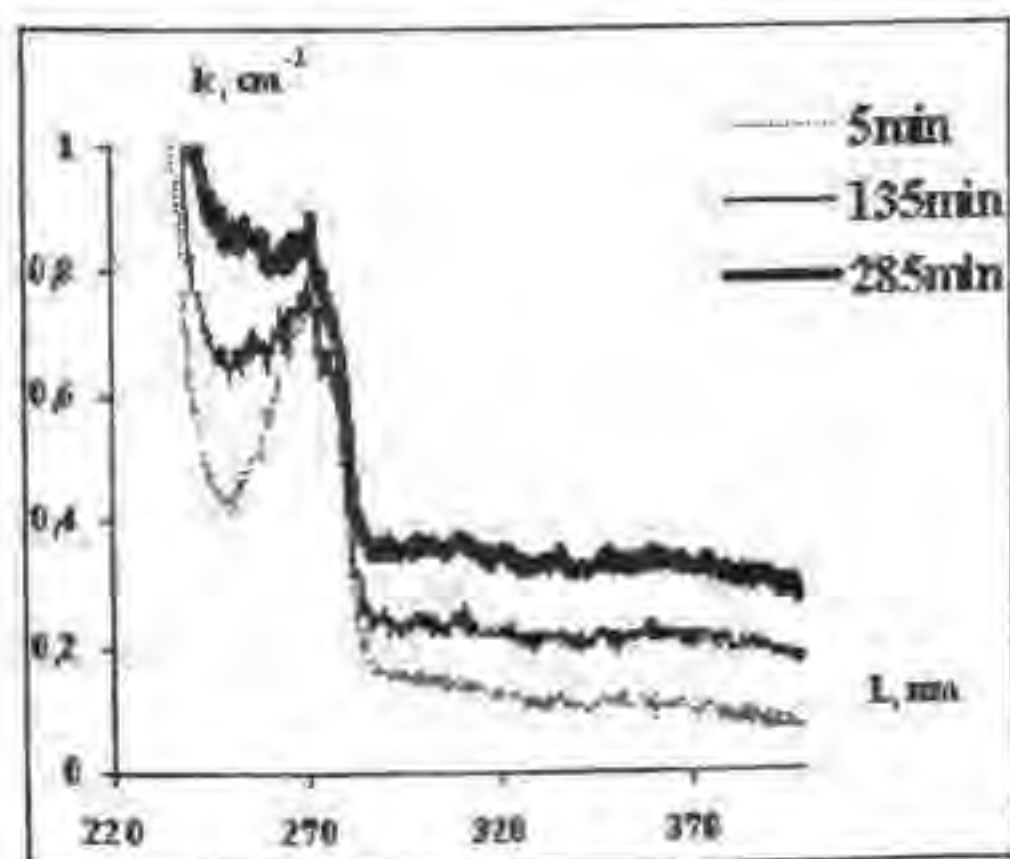


Fig. 7 Optical absorption spectra of the plasma-treated 1 mM phenol solution with 0.08 mM iron sulfate catalyst, diluted with distilled water by 6 times, after the low-dose UV irradiation at different time moments: from 5 to 285 min.

At the same time, the same low-doses of UV irradiation have a strong influence on the plasma-treated phenol solutions diluted with water after the plasma treatment due to the optical UV transparency (in case of optically thin medium,  $d < k_0^{-1}$ ). It

changes not only the rate of the phenol degradation but also the spectrum of output products, if it takes directly after the plasma processing. But if it takes 1 day later after the initial plasma treatment, UV irradiation has no such effects at all.

We also studied the influence of UV irradiation in case when plasma-treated phenol solutions were hold (stabilized) during 1 day at their actual output concentration, then they were diluted with distilled water and after that they were irradiated by UV light. We found that it caused only minor changes in the spectrum, particularly, optical absorption became less at 300 nm and more at 250 nm (Fig. 8). However, this fact needs further studies.

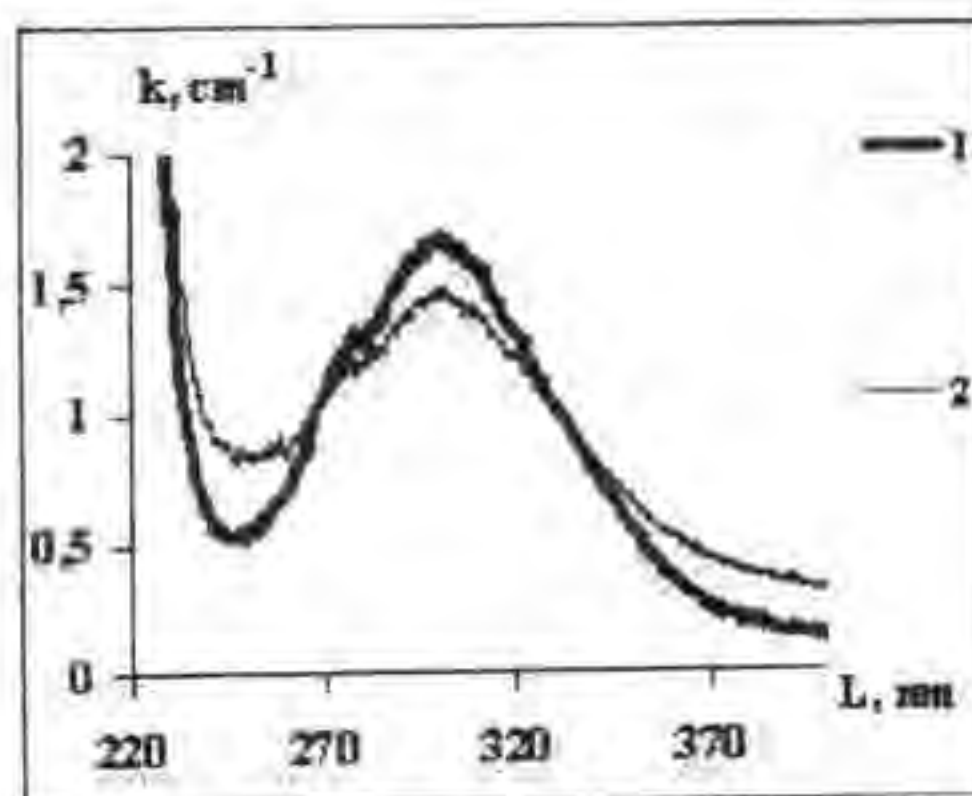


Fig. 8 Optical absorption spectra of the plasma-treated 1 mM phenol solution with 0.08 mM iron sulfate catalyst, stabilized during 1 day, diluted with distilled water by 6 times, measured before (curve 1) and after (curve 2) UV irradiation during 180 min.

## Conclusion

From our experiments with the plasma treatment of aqueous phenol solutions in the plasma-liquid system with a secondary discharge and investigations of the process of phenol degradation through the whole period of the stabilization after the plasma treatment we conclude that:

- The air-liquid plasma-chemical reactor with a secondary discharge supported by a blowing arc of atmospheric pressure offers an efficient technology of plasma treatment of concentrated phenol solutions.
- Direct plasma processing of water leads to the formation of chemically active oxidants  $H_2O_2$ ,  $HNO_3$ ,  $HNO_2$ , etc which cause chain-branching mechanism of oxidation reactions. Therefore, plasma-treated phenol solutions are labile in time: the phenol degradation does not stop after the end of plasma action but continues some time after that.



- An efficiency of the phenol destruction increases with the deposited electric discharge energy, particularly with the increase of the current of the secondary discharge, and with the processing time.
- The stabilization of properties of plasma-treated solutions lasts several days after the treatment. Independently of the polarity of a "liquid" electrode in the secondary discharge, the composition of final output products is practically the same in all treatment modes.
- An additional low-dose UV irradiation of plasma-treated phenol solutions can influence on the phenol destruction in conditions of sufficient optical UV transparency. The UV irradiation changes not only the fraction of destructed phenol but also the spectrum of output products. The UV efficiency decreases with the time interval between the end of plasma treatment and the starting of UV treatment.
- The influence of Fenton's reactions initiating by  $\text{Fe}^{2+}$  ions on the phenol degradation is essential only in the mode of plasma treatment with the "liquid" anode.

### Acknowledgements

This work was supported by the Taras Shevchenko Kyiv National University and by the Program of Scientific Cooperation between the Polish Academy of Sciences and Ukrainian Academy of Sciences.

### References

1. Van Veldhuizen E.M. Electric Discharges for Environmental Purposes: Fundamentals and Applications. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2000.
2. Brisset J.L. Air corona removal of phenols // J. Appl. Electrochem. – 1997. – 27. – P. 179-193.
3. Sunka P., Babicky V., Clupek M., Lukes P., Simek M., Schmidt J., Cernak M. Generation of chemically active species by electrical discharges in water // Plasma Sources Sci. Technol. – 1999. – 8. – P.258-265.

4. Malik M.A., Ghaffar A., Malik S.A. Water purification by electrical discharges // Plasma Sources Sci. Technol. – 2001. – 10. – P.82-91.
5. Chernyak V., Magdenko A., Trokhymchuk A., Tarasova Ya., Naumov V., Kravchenko A., Ulberg Z., Gruzina T., Olszewski S., Chekhovskaya T. Plasmachemical systems for water treatment with electrical discharges in gas streams // Proc. 15th Int. Symp. Plasma Chem. /Eds. A.Bouchoule *et al.* – Orleans: GREMI. – 2001. – VII. – P.3017-3022.
6. Chernyak V.Ya., Tarasova Ya.B., Magdenko A.M., Trokhymchuk A.K., Yukhymenko V.V., Naumov V.V., Kravchenko A.I., Ulberg Z.R., Gruzina T.G., Olszewski S.V., Chekhovskaya T.P. Plasmachemical treatment of water solutions of organic compounds // Bull. Univ. of Kyiv, Series: Radiophysics. – 2002, N 4. – P.67-71.
7. Chernyak V.Ya. Non-equilibrium plasma chemical destruction of toxic agents // NBC Intern. – 2003, N 4. – P.55-56.
8. Chernyak V.Ya., Yukhymenko V.V., Babich I.L., Zrazhevski V.V., Slusarenko Yu.I., Voevoda Yu.V., Trokhymchuk A.K., Naumov V.V., Tarasova Ya.B. Nonequilibrium plasma chemical technologies of water treatment at chemical, bacteriological or radioactive contamination // Bull. Univ. of Kyiv, Series: Radiophysics. – 2005, N 8. – P.45-47.
9. Dors M., Mizeraczyk J., Mok Y.S. Phenol oxidation in aqueous solution by gas phase corona discharge. J. Adv. Oxid. Technol. – 2006. – 9, N2.
10. Shapoval V., Chernyak V., Naumov V., Zrazhevski V., Yukhymenko V., Dors M., Mizeraczyk J. // Abstracts 16th Symp. on Applications of Plasma Processes. Workshop on Research of Plasma Physics & Applications in Visgrad Countries. – Podbanske, Slovakia, 2007. – P.251-252.

Надійшла до редколегії 06.03.07



УДК 537.8.74

Сергій М. Шульга<sup>1</sup>, Ольга В. Багачка<sup>2</sup>, Хе Ши<sup>3</sup>,  
Зариф Ф. Назиров<sup>4</sup>

**Розв'язання задачі розсіювання електромагнітних хвиль на включенні у Т-подібному з'єднанні двох прямокутних хвилеводів за допомогою теореми Гріна**

Отримано строге розв'язання двовимірної задачі розсіювання на ідеально провідному включенні довільного поперечного перерізу, розташованому в області взаємодії Т-подібного з'єднання прямокутних хвилеводів. В рамках даного підходу, який базується на застосуванні теореми Гріна, вагові функції обираються такими, що задовольняють як рівнянню Гельмгольца, так і граничним умовам на поверхні ідеально провідного розсіювача. Представлено ілюстративні результати для прямокутного металевого включення. Метод може бути використано для оптимізації роботи хвилевідних з'єднань.

**Ключові слова:** Т-подібне з'єднання прямокутних хвилеводів, LE-хвилі, теорема Гріна, коефіцієнти розсіювання.

<sup>1</sup> E-mail: Sergey.N.Shulga@univer.kharkov.ua

<sup>2</sup> E-mail: Olga.V.Bagatska@univer.kharkov.ua

<sup>3</sup> E-mail: Heshi@univer.kharkov.ua

## Вступ

В даній роботі розглянуто двовимірну задачу розсіювання на ідеально провідному включенні довільної форми всередині Т-подібної області взаємодії двох прямокутних хвилеводів. Досліджувана структура представлена на рис. 1. Область взаємодії обмежена відрізками  $L_0, L_1, L_2$  і  $L_3$ , поверхня включення –  $L_5$ . Розв'язання базується на методі теореми Гріна, який успішно використовувався для розв'язання задач у повнорозмірній області взаємодії прямокутних хвилеводів (наприклад, [3, 4, 9]).

В рамках даного методу розв'язок задачі розсіювання визначається з відповідного інтегрального рівняння шляхом обрання вагових функцій, які тотожно задовольняють рівнянню Гельмгольца в області взаємодії хвилеводів. При цьому вагові функції повинні автоматично враховувати присутність ідеально провідного

Sergey M. Shulga<sup>1</sup>, Olga V. Bagatskaya<sup>2</sup>, He Shi<sup>3</sup>,  
Zarif F. Nazirov<sup>4</sup>

**The Solution to the Problem of Electromagnetic Wave Scattering on an Inclusion in the Rectangular Waveguides T-junction via the Green's Theorem Approach**

The rigorous solution for 2-D scattering problem on the arbitrary cross-section perfectly conducting inclusion within an interaction region of a T-junction of rectangular waveguides is obtained. In the context of suggested approach based on Green's theorem weight functions are choosing to satisfy as Helmholtz equation as boundary conditions on the perfectly conducting scatterer surface. Illustrative results for rectangular metallic inclusion are presented. This method may be used for the waveguide junction optimization.

**Key Words:** T-junction of rectangular waveguides, LE waves, Green's theorem, scattering coefficients.

включення. Для цього система вагових функцій визначається за допомогою розв'язання трьох допоміжних задач розсіювання на включенні у закороченому хвилеводі. В результаті отримуємо систему алгебраїчних рівнянь (СЛАР) відносно амплітуд розсіяних хвиль в одному з плечей хвилевідного з'єднання. Зауважимо, що метод трьох закороток [8] дає розв'язок поставленої задачі в одномодовому режимі, в той час, як метод, оснований на застосуванні теореми Гріна [3, 8], дозволяє визначити всехвильову матрицю розсіювання для довільної кількості хвилевідних мод [5].

## Постановка і розв'язання задачі

Для визначеності обмежимося розглядом з'єднання двох прямокутних хвилеводів у  $E$ -площині (рис. 1).

Розв'язання будемо проводити для  $LE$ -хвиль [1], крім того, часову залежність оберемо у



вигляді  $\exp(-i\omega t)$ . Для цього типу хвиль компонента магнітного поля  $H_x(x, y, z)$  має вигляд:

$$H_x(x, y, z) = \sin(m\pi/a)W(y, z),$$

де  $a$  – сільний розмір двох хвильоводів, а модальний індекс  $m = 1, 2, \dots$  є фіксованим у межах всієї роботи. Функція  $W(y, z)$  задовольняє рівнянню Гельмгольца

$$(\Delta_{y,z} + K^2)W(y, z) = 0, \quad (1)$$

а також граничним умовам Неймана на ідеально провідних стінках хвильоводу і на контурі  $L_s$ , що обмежує розсіювач  $S$ . Тут  $K = [k^2 - (m\pi/a)^2]^{1/2}$  – ефективне хвильове число,  $k$  – хвильове число в середовищі заповнення хвильоводів. У регулярних областях  $A (y > b)$ ,  $B (z < 0)$  і  $C (z > b_h)$  функції  $W(y, z)$  можуть бути представлені у вигляді:

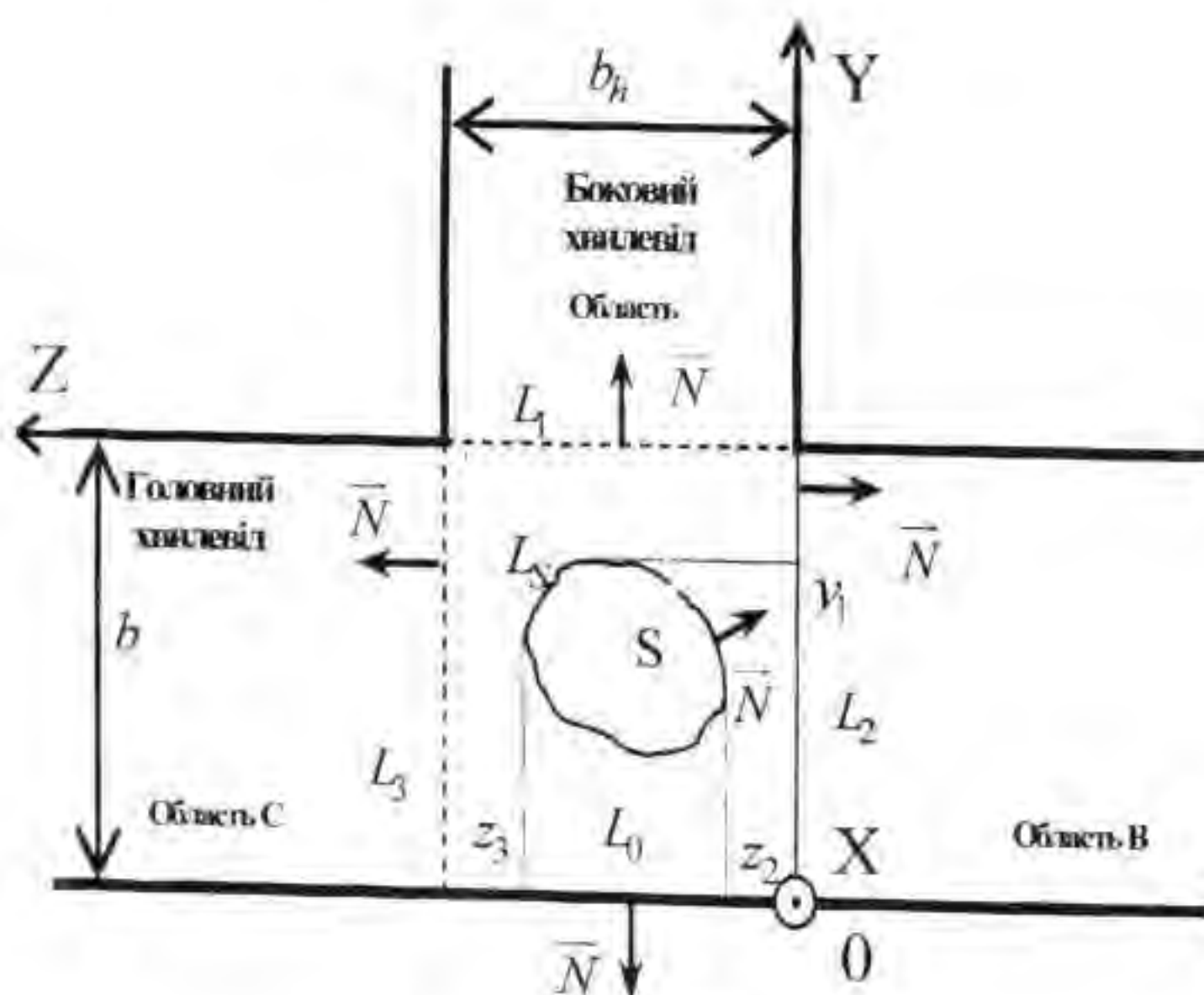


Рис. 1. Геометрія задачі.

$$W^A = \sum_{n=0}^{+\infty} \{A_n^{inc} \exp[-i\eta_n(y-b)] + A_n^{sc} \exp[i\eta_n(y-b)]\} \cos\left(\frac{n\pi}{b_h} z\right),$$

$$W^B = \sum_{n=0}^{+\infty} \{B_n^{inc} \exp[i\beta_n z] + B_n^{sc} \exp[-i\beta_n z]\} \cos\left(\frac{n\pi}{b} y\right),$$

(2)

$$W^C = \sum_{n=0}^{+\infty} \{C_n^{inc} \exp[-i\beta_n(z-b_h)] + C_n^{sc} \exp[i\beta_n(z-b_h)]\} \cos\left(\frac{n\pi}{b} y\right),$$

де  $A_n^{inc}, B_n^{inc}, C_n^{inc}$  і  $A_n^{sc}, B_n^{sc}, C_n^{sc}$  – амплітудні коефіцієнти хвиль, що падають і розсіюються,

$$\eta_n = [K^2 - (n\pi/b_h)^2]^{1/2},$$

$$\beta_n = [K^2 - (n\pi/b)^2]^{1/2} - \text{поздовжні хвильові}$$

числа хвильоводів.

Введемо до розгляду  $\tilde{W}$  – розв'язок рівняння (1) у неоднорідній області, що задовольняє граничним умовам Неймана на ідеально провідних поверхнях:



$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial N} \Big|_{L_5} = 0; \quad \frac{\partial \tilde{W}}{\partial N} \Big|_{L_0} = 0.$$

Тут  $\partial/\partial N$  – нормальна похідна до поверхні.

За допомогою теореми Гріна (другої формули Гріна) перетворюємо рівняння Гельмгольца всередині неоднорідної області в інтегральне рівняння за поверхнями, що обмежують цю область.

$$L = L_0 + L_1 + L_2 + L_3 + L_5,$$

$$\int_L dL \left( \tilde{W} \frac{\partial W}{\partial N} - W \frac{\partial \tilde{W}}{\partial N} \right) = 0. \quad (3)$$

Тут  $W$  – невідомий розв'язок рівняння (1) в неоднорідній області, яке також задовольняє граничним умовам Неймана на ідеально

провідних поверхнях  $L_0$  і  $L_5$ . Як  $\tilde{W}$  послідовно візьмемо розв'язок трьох допоміжних задач для головного і бокового хвильоводів, наведених нижче. Розглянемо першу допоміжну структуру, яка представляє собою головний хвильовід, який містить розсіювач  $S$ . Досліджувану структуру формально можна отримати з рис. 1, якщо вважати сегмент  $L_1$  ідеально провідним. Нехай розсіювач збуджується моною хвилі індексу  $q = 0, 1, 2, \dots$ , яка падає з боку  $z = -\infty$ . Розв'язок поза включенням  $\tilde{W}(y, z) \equiv \tilde{W}B_q(y, z)$  запишеться у вигляді:

$$\tilde{W}B_q(y, z) = \begin{cases} \tilde{W}^{inc} + \tilde{W}^{sc}, & z < z_2, \\ \tilde{W}^{sc}, & z > z_3. \end{cases} \quad (4)$$

В (4) ми позначили:

$$\begin{aligned} \tilde{W}^{inc} &= \exp[i\beta_q(z - z_2)] \cos\left(\frac{q\pi}{b}y\right), \quad z < z_2, \\ \tilde{W}^{sc} &= \sum_{s=0}^{+\infty} SBB_{sq} \exp[-i\beta_s(z - z_2)] \cos\left(\frac{s\pi}{b}y\right), \quad z < z_2, \\ \tilde{W}^{sc} &= \sum_{s=0}^{+\infty} SCB_{sq} \exp[i\beta_s(z - z_3)] \cos\left(\frac{s\pi}{b}y\right), \quad z > z_3. \end{aligned} \quad (5)$$

Як другу допоміжну задачу розглянемо той самий головний хвильовід, але тепер будемо вважати, що  $q$ -а мода вказаного хвильоводу падає з боку  $z = +\infty$ . Розв'язок для  $\tilde{W}(y, z) \equiv \tilde{W}C_q(y, z)$  поза включенням буде виглядати так:

$$\tilde{W}C_q(y, z) = \begin{cases} \tilde{W}^{inc} + \tilde{W}^{sc}, & z > z_3, \\ \tilde{W}^{sc}, & z < z_2. \end{cases} \quad (6)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{W}^{inc} &= \exp[-i\beta_q(z - z_3)] \cos\left(\frac{q\pi}{b}y\right), \quad z > z_3, \\ \tilde{W}^{sc} &= \sum_{s=0}^{+\infty} SCC_{sq} \exp[i\beta_s(z - z_3)] \cos\left(\frac{s\pi}{b}y\right), \quad z > z_3, \\ \tilde{W}^{sc} &= \sum_{s=0}^{+\infty} SBC_{sq} \exp[-i\beta_s(z - z_2)] \cos\left(\frac{s\pi}{b}y\right), \quad z < z_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Третя допоміжна задача формулюється для структури, яку формально можна отримати з рис. 1, якщо сегменти  $L_2$  і  $L_3$  вважати ідеально провідними. Нехай хвиля ( $q = 0, 1, 2, \dots$ ) падає з

боку  $y = +\infty$ . Розв'язок  $\tilde{W}(y, z) \equiv \tilde{W}A_q(y, z)$  для області  $y > y_1$  запишемо так:



$$\tilde{W}A_q(y, z) = \begin{cases} \tilde{W}^{inc} + \tilde{W}^{sc}, & y > y_1, \\ \tilde{W}, & 0 < y < y_1. \end{cases} \quad (8) \quad \text{Тут}$$

$$\tilde{W}^{inc} = \exp[-i\eta_q(y - y_1)] \cos\left(\frac{q\pi}{b_h}z\right), \quad y > y_1,$$

$$\tilde{W}^{sc} = \sum_{S=0}^{+\infty} SAA_{sq} \exp[i\eta_s(y - y_1)] \cos\left(\frac{s\pi}{b_h}z\right), \quad y > y_1. \quad (9)$$

В формулах (5), (7), (9)  $SIJ$  ( $I, J = A, B, C$ ) – елементи матриці розсіювання, яка задається таким чином:

$$\begin{aligned} A^{sc} &= SAA \cdot A^{inc} + SAB \cdot B^{inc} + SAC \cdot C^{inc}, \\ B^{sc} &= SBA \cdot A^{inc} + SBB \cdot B^{inc} + SBC \cdot C^{inc}, \\ C^{sc} &= SCA \cdot A^{inc} + SCB \cdot B^{inc} + SCC \cdot C^{inc} \end{aligned} \quad (10)$$

Тут введені вектори-стовпці амплітуд хвиль, що падають і розсіюються,  $A^{inc} = \{A_n^{inc}\}$ ,  $B^{inc} = \{B_n^{inc}\}$ ,  $C^{inc} = \{C_n^{inc}\}$ ;  $A^{sc} = \{A_n^{sc}\}$ ,  $B^{sc} = \{B_n^{sc}\}$ ,  $C^{sc} = \{C_n^{sc}\}$ . Коефіцієнти розсіювання і розв'язки допоміжних задач

$\tilde{W}A_q, \tilde{W}B_q, \tilde{W}C_q$  можуть бути отримані в різний спосіб, наприклад, за методом модового розкладання [2], чисельними методами [7], методом поверхневих інтегральних рівнянь [6].

Далі послідовно підставляємо до формули Гріна (3) вагові функції  $\tilde{W}A_q(y, z)$ ,  $\tilde{W}B_q(y, z)$ ,  $\tilde{W}C_q(y, z)$  замість  $\tilde{W}$ , враховуючи при цьому явний вигляд (2) для  $W(y, z)$  в кожній з областей, а також рівність до нуля нормальних похідних  $W$  і  $\tilde{W}$  на ідеально провідних поверхнях. В результаті отримаємо прямі формули для амплітуд розсіювання  $A_n^{sc}$ ,  $B_n^{sc}$ ,  $C_n^{sc}$ :

$$\begin{aligned} A_q^{sc} &= \sum_{n=0}^{+\infty} [RA_{qn} \cdot A_n^{inc} + RB_{qn} \cdot (B_n^{inc} - B_n^{sc}) + RC_{qn} \cdot (C_n^{inc} - C_n^{sc})], \\ B_q^{sc} &= \sum_{n=0}^{+\infty} [PA_{qn} \cdot (A_n^{inc} - A_n^{sc}) + PB_{qn} \cdot B_n^{inc} + PC_{qn} \cdot C_n^{inc}], \\ C_q^{sc} &= \sum_{n=0}^{+\infty} [QA_{qn} \cdot (A_n^{inc} - A_n^{sc}) + QB_{qn} \cdot B_n^{inc} + QC_{qn} \cdot C_n^{inc}], \end{aligned} \quad (11)$$

де  $q = 0, 1, 2, \dots$ , а матричні коефіцієнти мають вигляд:

$$RA_{qn} = \frac{\exp[i\eta_q(b - y_1)]}{\varepsilon_q \eta_q} \varepsilon_n \eta_n \exp[i\eta_n(b - y_1)] \cdot SAA_{nq},$$

$$RB_{qn} = \frac{\beta_n b^2}{2b_h \varepsilon_q} GWAB(q, n),$$

$$GWAB(q, n) = \frac{2 \exp[i\eta_q(b - y_1)]}{\eta_q b^2} \int_0^b dy \tilde{W}A_q(y, z) \cos\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \Big|_{z=0},$$



$$\begin{aligned}
 RC_{qn} &= \frac{\beta_n b^2}{2b_h \varepsilon_q} GWAC(q, n), \\
 GWAC(q, n) &= \frac{2 \exp[i\eta_q(b - y_1)]}{\eta_q b^2} \int_0^b dy \tilde{W}A_q(y, z) \cos\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \Big|_{z=b_h}, \\
 PA_{qn} &= \frac{\eta_n b_h^2}{2b \varepsilon_q} GWB(q, n), \\
 GWB(q, n) &= \frac{2 \exp[i\beta_q z_2]}{\beta_q b_h^2} \int_0^{b_h} dz \tilde{W}B_q(y, z) \cos\left(\frac{n\pi}{b_h}z\right) \Big|_{y=b}, \\
 PB_{qn} &= \frac{\exp[i\beta_q z_2]}{\varepsilon_q \beta_q} \varepsilon_n \beta_n \exp[i\beta_n z_2] \cdot SBB_{nq}, \\
 PC_{qn} &= \frac{\exp[i\beta_q z_2]}{\varepsilon_q \eta_q} \varepsilon_n \beta_n \exp[i\beta_n(b_h - z_3)] \cdot SCB_{nq}, \\
 QA_{qn} &= \frac{\eta_n b_h^2}{2b \varepsilon_q} GWC(q, n), \\
 GWC(q, n) &= \frac{2 \exp[i\beta_q(b_h - z_3)]}{\beta_q b_h^2} \int_0^{b_h} dz \tilde{W}C_q(y, z) \cos\left(\frac{n\pi}{b_h}z\right) \Big|_{y=b}, \\
 QB_{qn} &= \frac{\exp[i\beta_q(b_h - z_3)]}{\varepsilon_q \beta_q} \varepsilon_n \beta_n \exp[i\beta_n z_2] \cdot SBC_{nq}, \\
 QC_{qn} &= \frac{\exp[i\beta_q(b_h - z_3)]}{\varepsilon_q \beta_q} \varepsilon_n \beta_n \exp[i\beta_n(b_h - z_3)] \cdot SCC_{nq},
 \end{aligned}$$

$\varepsilon_q = 2$  при  $q = 0$  і 1 для інших значень  $q$ .  
Інтеграли в правих частинах вказаних вище виразів можуть бути взяті аналітично, якщо відомі  $\tilde{W}A_q, \tilde{W}B_q, \tilde{W}C_q$ .

Отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) для амплітуд розсіяного поля в боковому хвилеводі, виразивши один ряд невідомих через інший, а саме,  $\{B_n^{sc}\}$  та  $\{C_n^{sc}\}$  через  $\{A_n^{sc}\}$ . В результаті одержимо систему рівнянь відносно  $A^{sc} = \{A_n^{sc}\}$ , яка в матричній формі має вигляд:

$$(I - D) \cdot A^{sc} = UA \cdot A^{inc} + UB \cdot B^{inc} + UC \cdot C^{inc} \quad (12)$$

Тут  $I$  – одинична матриця, інші матриці, що входять до (12), визначаються таким чином:

$$\begin{aligned}
 D &= RB \cdot PA + RC \cdot QA, \\
 UA &= RA - (RB \cdot PA + RC \cdot QA), \\
 UB &= RB - (RB \cdot PB + RC \cdot QB), \\
 UC &= RC - (RB \cdot PC + RC \cdot QC).
 \end{aligned}$$

Розв'язок СЛАР (12) запишемо у вигляді:

$$A^{sc} = (I - D)^{-1} \cdot (UA \cdot A^{inc} + UB \cdot B^{inc} + UC \cdot C^{inc}). \quad (13)$$

Порівнявши отриманий розв'язок (13) з визначенням матриці розсіювання (10), знайдемо вирази для елементів матриці розсіювання в боковий хвилевід  $A$  ( $y > b$ )



## Приклади

$$\begin{aligned} SAA &= (I - D)^{-1} \cdot UA, \\ SAB &= (I - D)^{-1} \cdot UB, \\ SAC &= (I - D)^{-1} \cdot UC. \end{aligned} \quad (14)$$

З прямих формул (11) і (13) отримаємо елементи матриці розсіювання в головний хвильовід: - для розсіювання в область В головного хвильоводу ( $z < 0$ )

$$\begin{aligned} SBA &= PA \cdot (I - SAA), \\ SBB &= PB - PA \cdot SAB, \\ SBC &= PC - PA \cdot SAC, \end{aligned} \quad (15)$$

- для розсіювання в область С головного хвильоводу ( $z > b_h$ )

$$\begin{aligned} SCA &= QA \cdot (I - SAA), \\ SCB &= QB - QA \cdot SAB, \\ SCC &= QC - QA \cdot SAC. \end{aligned} \quad (16)$$

При чисельній реалізації скористаємось аналогом методу скінченних різниць, в якому відбувається усінчення нескінченних сум СЛАР (12).

Розглянемо ідеально провідне включення у вигляді прямокутної сходинок з шириною  $t$  і висотою  $h$ , яка розташована, для визначеності, посередині (уздовж осі  $Oz$ ) в області взаємодії двох незаповнених хвильоводів (див. вставку до рис. 2). Допоміжні задачі для визначення  $\tilde{W}A_q, \tilde{W}B_q, \tilde{W}C_q$  розв'язувались за методом модового узгодження [2]. Нас цікавлять комплексні елементи матриці розсіювання  $SIJ$  ( $I, J = A, B, C$ ).

На рис. 2 - 5 представлені частотні залежності абсолютної величини комплексних коефіцієнтів розсіювання хвилі основної моди ( $m=1, n=0$ ), яка падає з області В головного хвильоводу для різних геометричних розмірів включення  $t$  і  $h$ . Розміри хвильоводів дорівнюють  $a=8.64$  см,  $b=b_h=a/2$ . На рис. 2 і 4 сходинок має розмір  $t=0.3b_h$ , а на рис. 3 і 5 -  $h=0.3b$ .

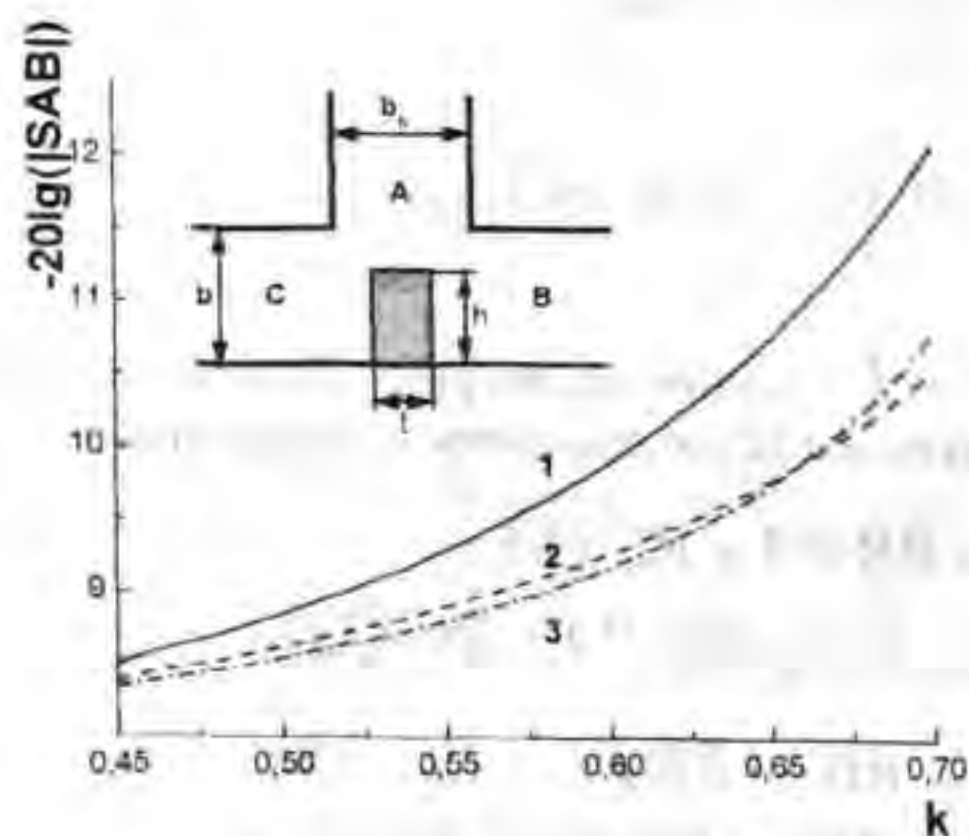


Рис. 2. Залежність параметрів розсіювання від частоти за різних значень висоти сходинок. Крива 1 відповідає значенню  $h=0.2b$ , 2 -  $h=0.4b$ , 3 -  $h=0.6b$ .

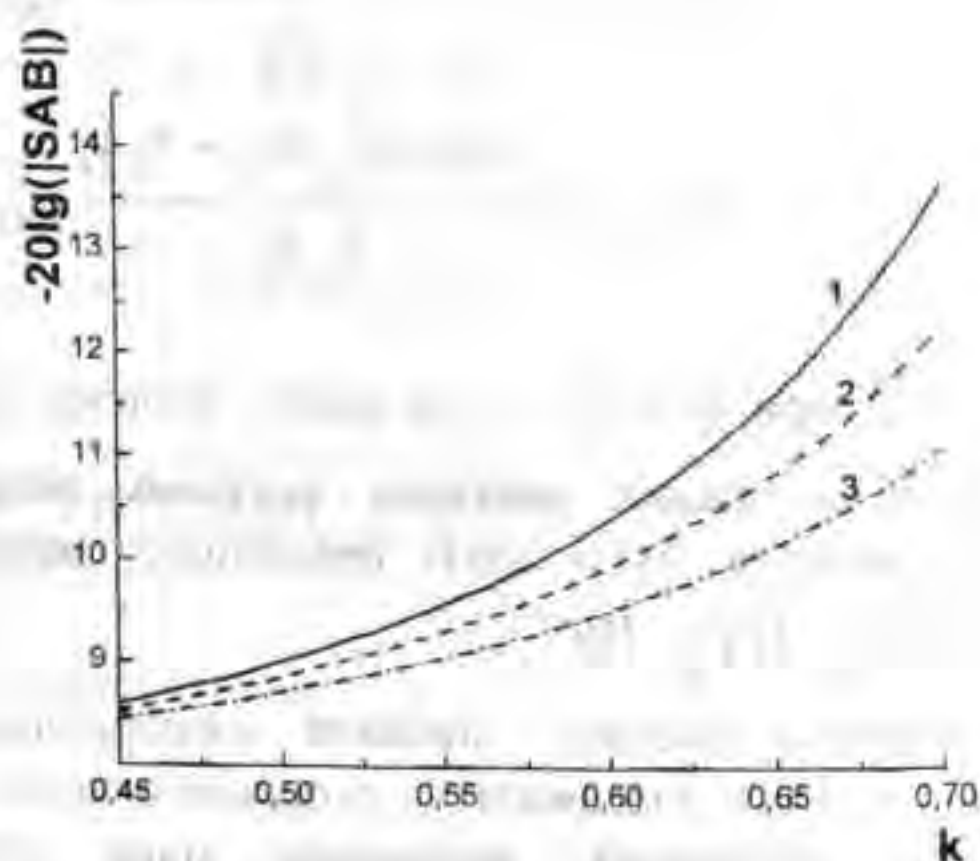


Рис. 3. Залежність параметрів розсіювання від частоти за різних значень ширини сходинок. Крива 1 відповідає значенню  $t=0.1b$ , 2 -  $t=0.2b$ , 3 -  $t=0.3b$ .



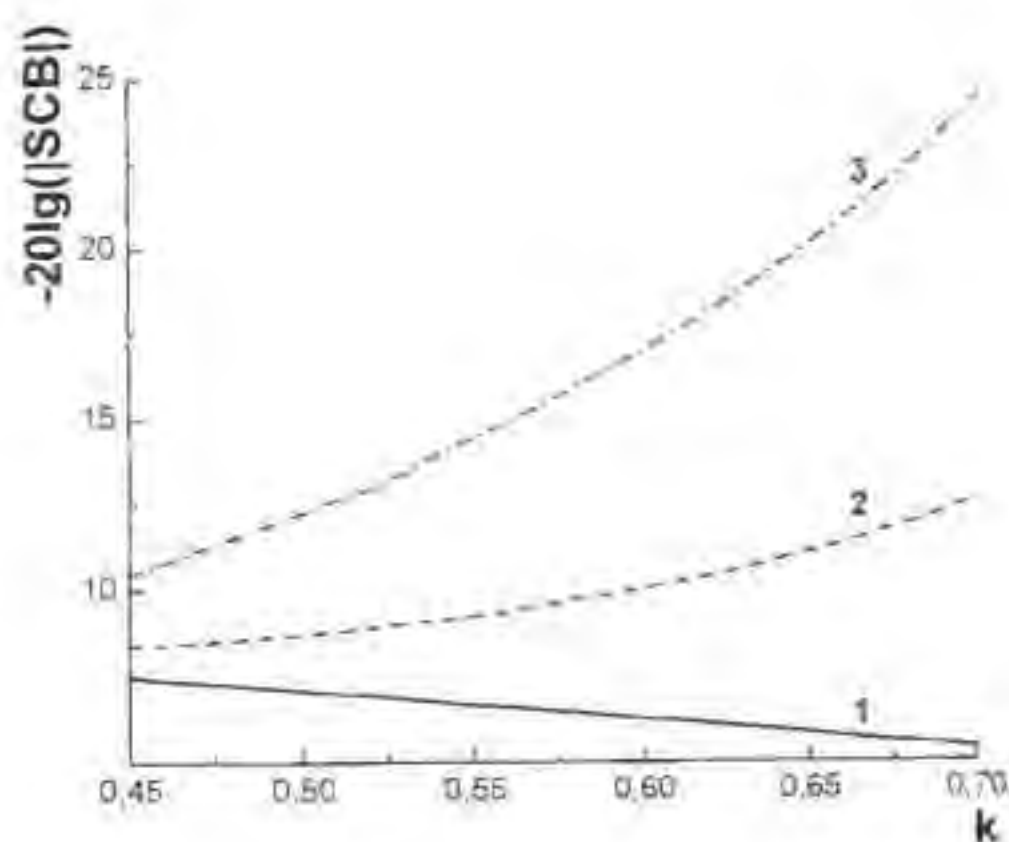


Рис. 4. Залежність параметрів розсіяння від частоти за різних значень висоти сходинок. Крива 1 відповідає значенню  $h = 0.2b$ , 2 -  $h = 0.4b$ , 3 -  $h = 0.6b$ .

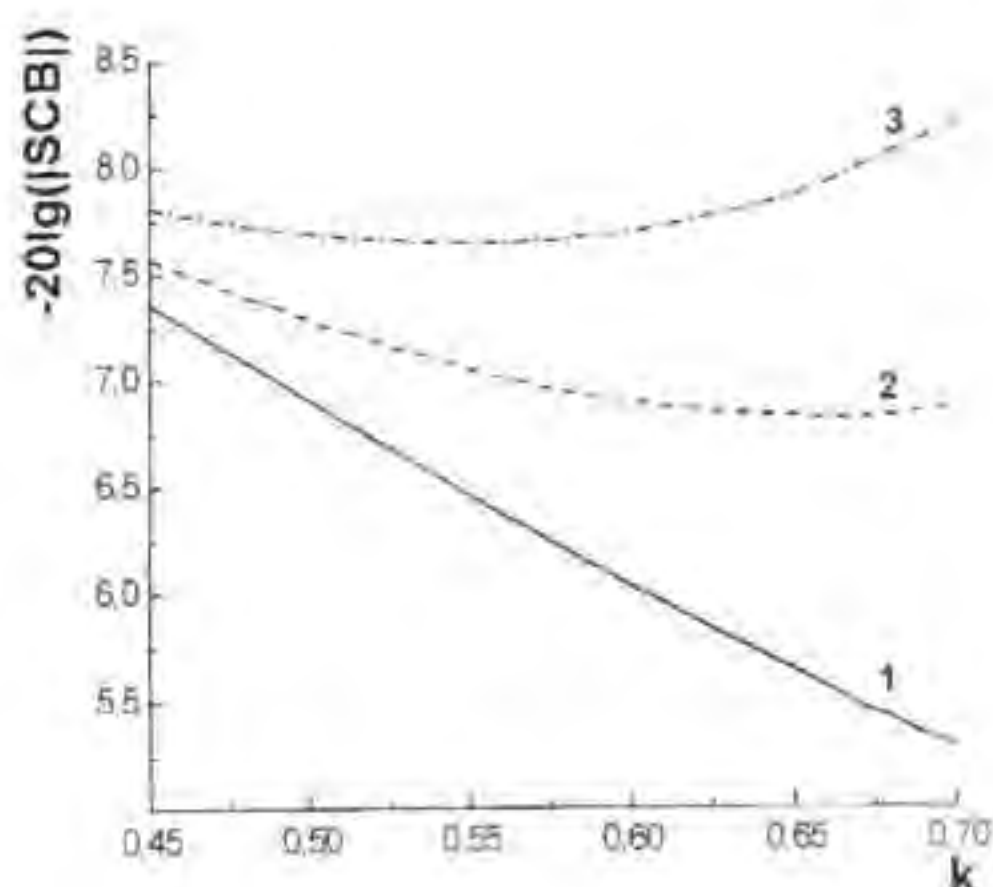


Рис. 5. Залежність параметрів розсіяння від частоти за різних значень ширини сходинок. Крива 1 відповідає значенню  $t = 0.1b$ , 2 -  $t = 0.2b$ , 3 -  $t = 0.3b$ .

### Висновки

Запропоновано строгий універсальний метод аналізу металевих включень довільного поперечного перерізу в області взаємодії Т-подібного з'єднання хвильоводів. Така модель може бути використана для оптимізації передаючих властивостей хвильовідних пристроїв за допомогою стрижнів або сходинок, які розташовані в області з'єднання хвильоводів.

### Список використаних джерел

1. Левин Л. Теория волноводов. - М.: Радио и связь, 1981.
2. Шестопалов В.П., Кириленко А.А., Масалов С.А. Матричные уравнения типа свертки в теории дифракции. - Киев, Наукова думка, 1984.
3. Кириленко А.А., Литвинов В.Р., Рудь Л.А. Усеченный излом прямоугольного волновода в Н-плоскости // Радиотехника и электроника. - 1979. - 24, № 6. - с. 1043-1052.
4. Рудь Л.А. Дифракция волн на Т-образном соединении прямоугольных волноводов в Н-плоскости // Радиотехника и электроника. - 1984. - 29, № 9. - с. 1711-1719.

5. Шульга С.Н., Багацкая О.В., Васильева Т.И., Жук Н.П. Анализ прямоугольного изгиба двух прямоугольных волноводов с двумерным включением в области взаимодействия // Радиотехника и электроника. - 2002. - 47, № 11. - с. 1335-1339.
6. Auda H., Harrington R.F. Inductive post and diaphragms of arbitrary shape and number in rectangular waveguide // IEEE Trans. - 1984. - MTT-32, № 6. - p. 606-612.
7. Levitan Y., Li P.G., Adams A.T., Perini G. Single post inductive obstacle in rectangular waveguide // IEEE Trans. - 1983. - MTT-31, № 10. - p. 806-812.
8. Ma Z., Yamashita E. Efficient fullwave analysis of a T-junction with an inductive post // IEICE Trans. Electron. - 1995. - E78-C, № 8. - p. 1117-1124.
9. Rud L.A. E-plane T-junction of oversize rectangular waveguide // Radiophys. Quantum Electron. - 1985. - 28, № 2. - p. 146-151.

Надійшло до редколегії 05.02.07







# СУЧАСНА ФІЗИКА



# САРАЧНА ФИЗИКА



УДК 538.22

Беженар А.А.<sup>\*</sup>, аспірантка, Копань В.С.<sup>\*\*</sup>,  
доктор фіз.-мат. наук, професор

### Поверхневий натяг та внутрішні напруги фторопласту

Показано, що залежність деформації вільних фторопластових плівок від часу має дві області. Перша область обумовлена впливом внутрішніх залишкових напруг, а друга – поверхневим натягом. Визначено коефіцієнт поверхневого натягу  $\gamma = 0,012 \text{ Па}\cdot\text{м}$  та розраховані внутрішні напруги.

Ключові слова: фторопласт, коефіцієнт поверхневого натягу, внутрішні напруги, повзучість.

A.A. Bezhenar<sup>\*</sup>, post-graduate student,  
V.S. Kopan<sup>\*\*</sup>, doctor of science, professor

### Surface tension and internal tension of fluoroplastic

It is shown that the time dependence of deformation of free fluoroplastic films has two regions. First region is caused by influence of internal residual tensions whereas second one by surface tension. It is found the coefficient of surface tension  $\gamma = 0,012 \text{ Pa}\cdot\text{m}$  and estimated internal tensions.

Key Words: fluoroplastic, coefficient of surface tension, internal tension, creep.

<sup>\*</sup>E-mail: R10@univ.kiev.ua, <sup>\*\*</sup>E-mail: kopa@pulsary.com.ua

Композиційні матеріали (КМ) провідник-діелектрик широко використовуються в радіо- та електротехніці, автоматичі тощо. Властивості КМ залежать від параметрів діелектрика, армуючих частинок та від їх синергетики [3].

Шаруватий композиційний матеріал (ШКМ) фторопласт-нанотрубки (ФП-НТ) забезпечує чистий перколяційний режим роботи композиту. В ШКМ такого типу шляхи проходження струму через області контакту електропровідних частинок дають малий вклад в загальний електроопір. Основний опір визначається опором діелектричного шару.

Наявність у фторопласті значної кількості зв'язаного фтору надає йому цінні технічні властивості. ФП-4 відноситься до полімеризаційних термопластів. При нагріванні в ньому не відбувається ніяких хімічних реакцій, характерних для термореактивних пластиків. ФП-4 суттєво відрізняється від звичайних термопластів (полістиролу, поліхлорвінілу та ін.) вмістом значної кількості кристалічної фази, температура плавлення якої рівна  $327^\circ\text{C}$  [1]. Вона значно перевищує температуру плавлення інших кристаломістких полімерів і температуру розм'якшення більшості термопластів. При нагріванні до температури, близької до  $327^\circ\text{C}$ , ФП-4 не плавиться, не тече при малих навантаженнях. При достатньо високій температурі він стає м'яким, однак зберігає незмінною свою форму.

ФП використовується для виготовлення термостійких конденсаторів, які експлуатуються при підвищених температурах ( $\sim 200^\circ\text{C}$ ), а також в конденсаторах, що призначені для роботи в колах змінного струму високої частоти [2].

Мета роботи – дослідження формозміни фторопластових плівок при умовах, що створюються в ШКМ внаслідок проходження електричного струму (нагрівання, стискання і розтяг фторопластових прошарків внаслідок взаємодії електропровідних частинок).

### Експериментальні результати та їх обговорення

В перколяційній області концентрацій КМ можна використати для виготовлення тензодатчиків, з допомогою яких вимірюють зміщення і напруги. Така проблема завжди існує в різних областях техніки. Дослідження повзучості фторопласту необхідне для забезпечення стабільності тензодатчиків.

Фторопластові плівки товщиною  $h = 25 \text{ мкм}$  були одержані від виробника у вигляді рулону. Повзучість фторопласту  $\Delta L/L$  ( $L$  – довжина зразка) досліджувалась для різних напрямків  $\varphi$  ( $\varphi$  – це кут між повздовжньою віссю ФП плівки та повздовжньою віссю зразка, що вирізаний з плівки) у площині плівки (рис. 1 – 10). До зразків прикладалась сила  $F = \sigma \cdot S$  (де  $S$  – площа поперечного перерізу зразка,  $\sigma$  – напруга) і вимірювалась деформація повзучості.



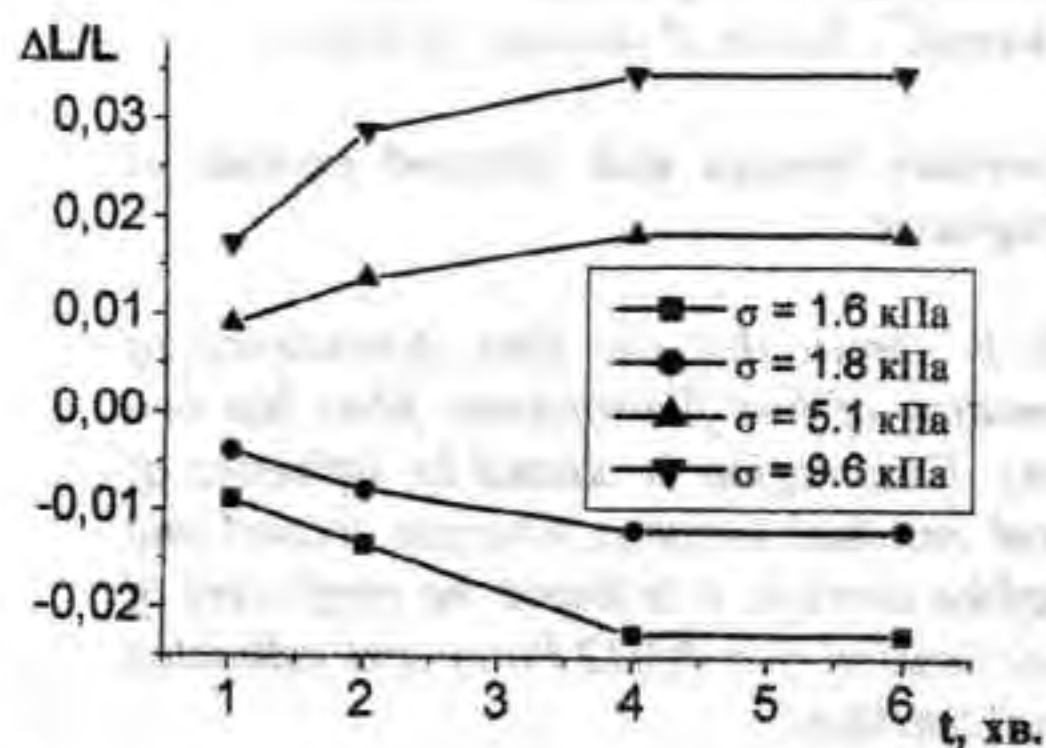


Рис. 1. Залежності деформації  $\Delta L/L$  фторопластового зразка від часу  $t$  для напрямку  $\varphi = 0^\circ$ .

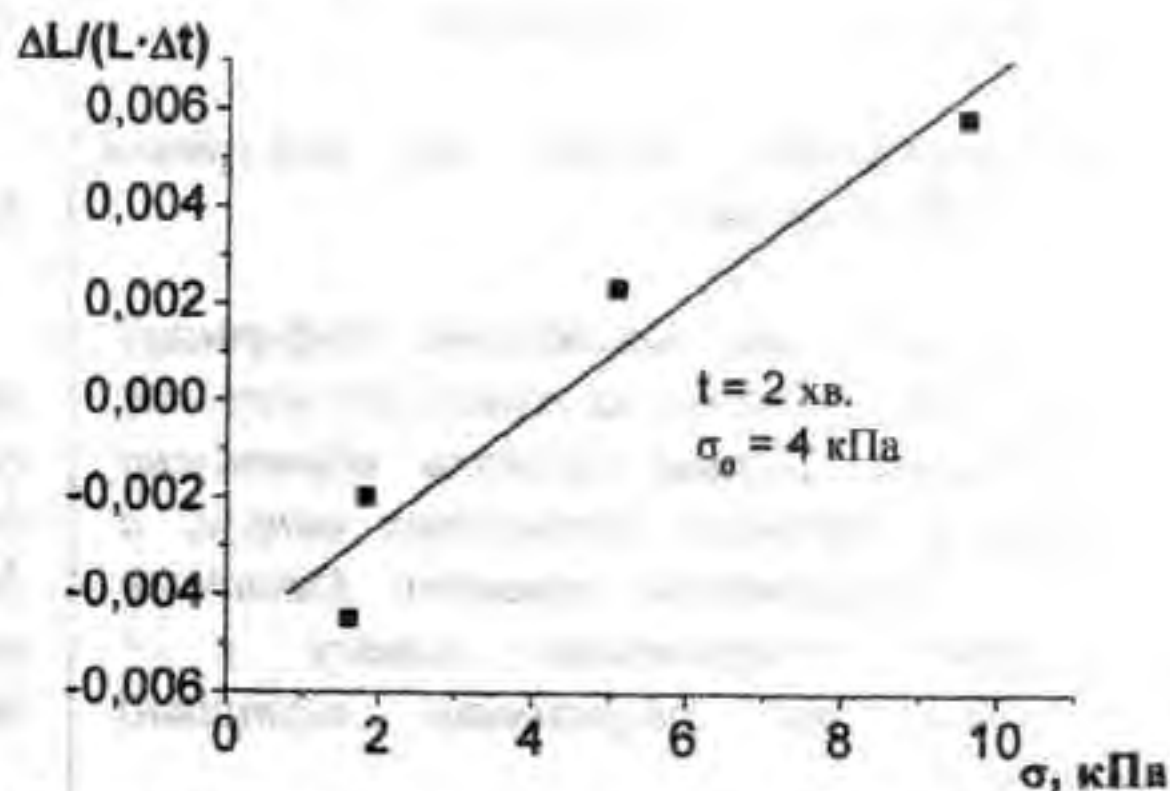


Рис. 2. Залежність швидкості деформації  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  від напруги  $\sigma$  для напрямку  $\varphi = 0^\circ$ .

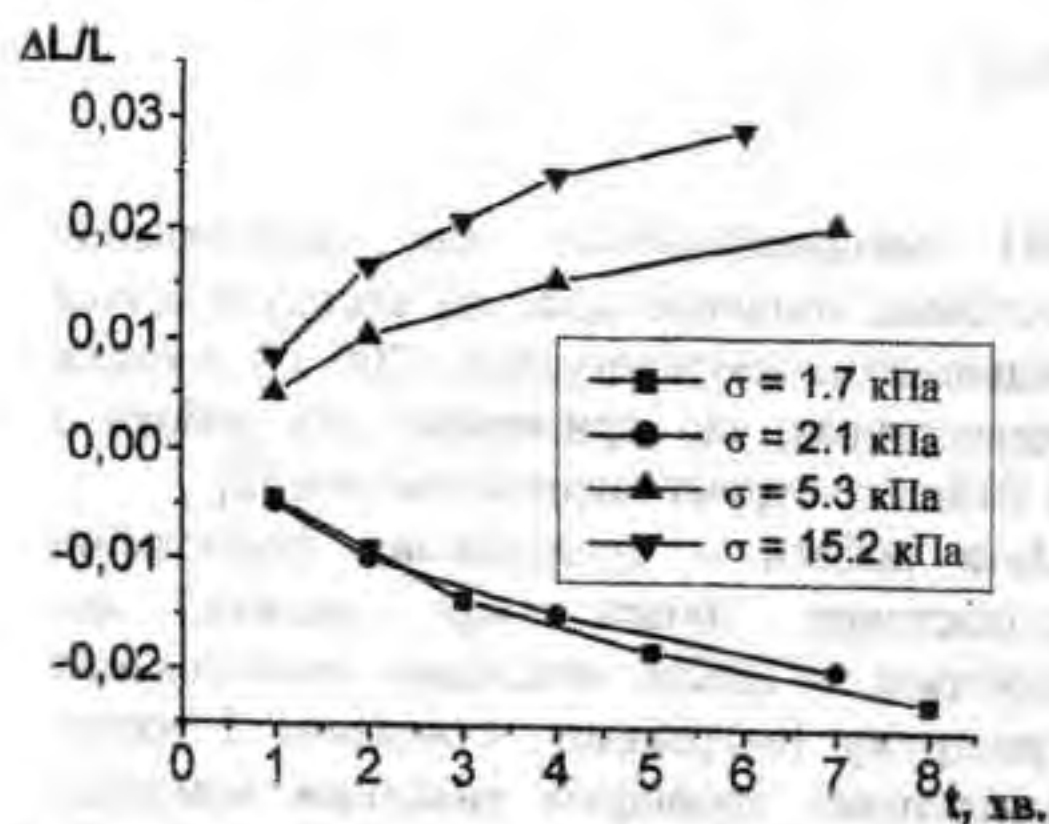


Рис. 3. Залежності деформації  $\Delta L/L$  фторопластового зразка від часу  $t$  для напрямку  $\varphi \approx 22^\circ$ .

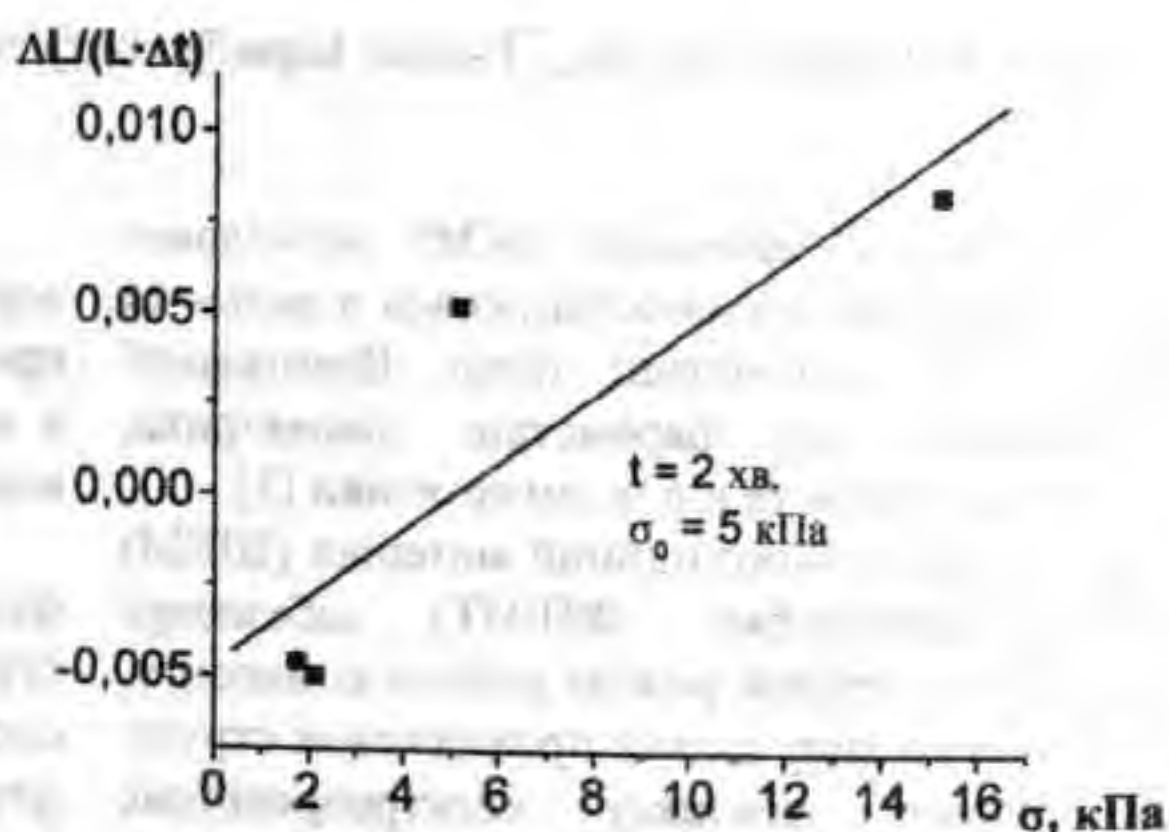


Рис. 4. Залежність швидкості деформації  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  від напруги  $\sigma$  для напрямку  $\varphi \approx 22^\circ$ .

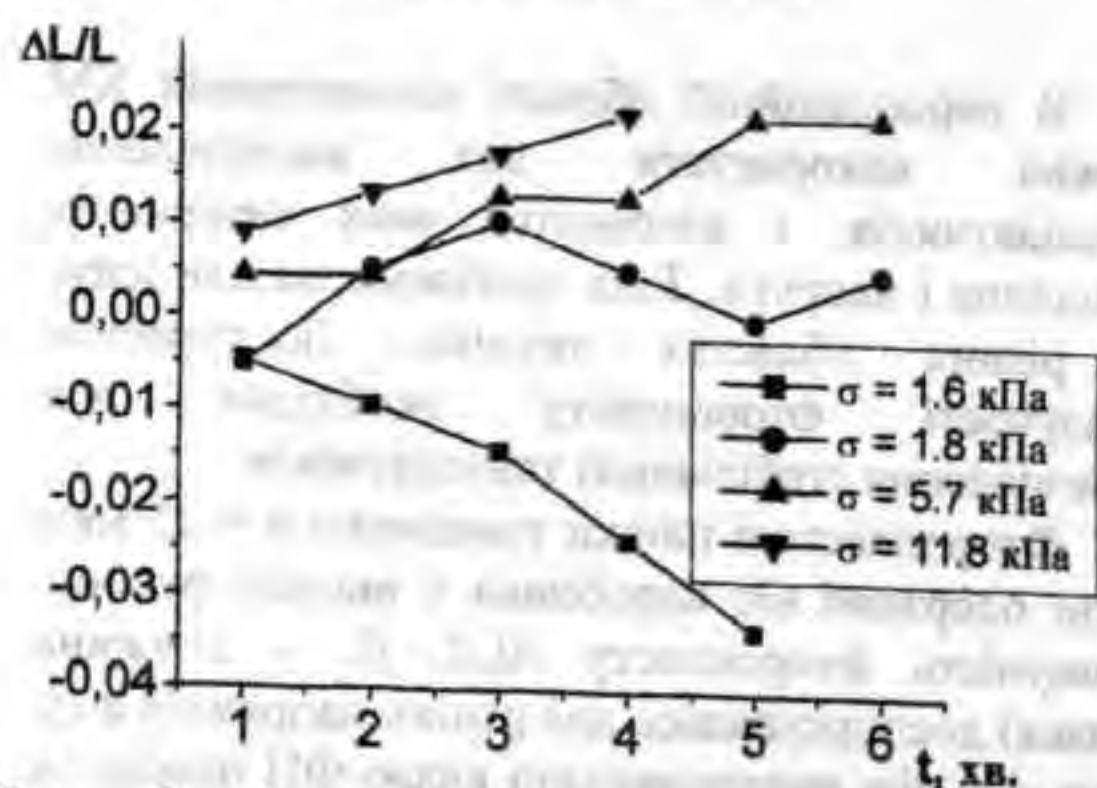


Рис. 5. Залежності деформації  $\Delta L/L$  фторопластового зразка від часу  $t$  для напрямку  $\varphi = 45^\circ$ .

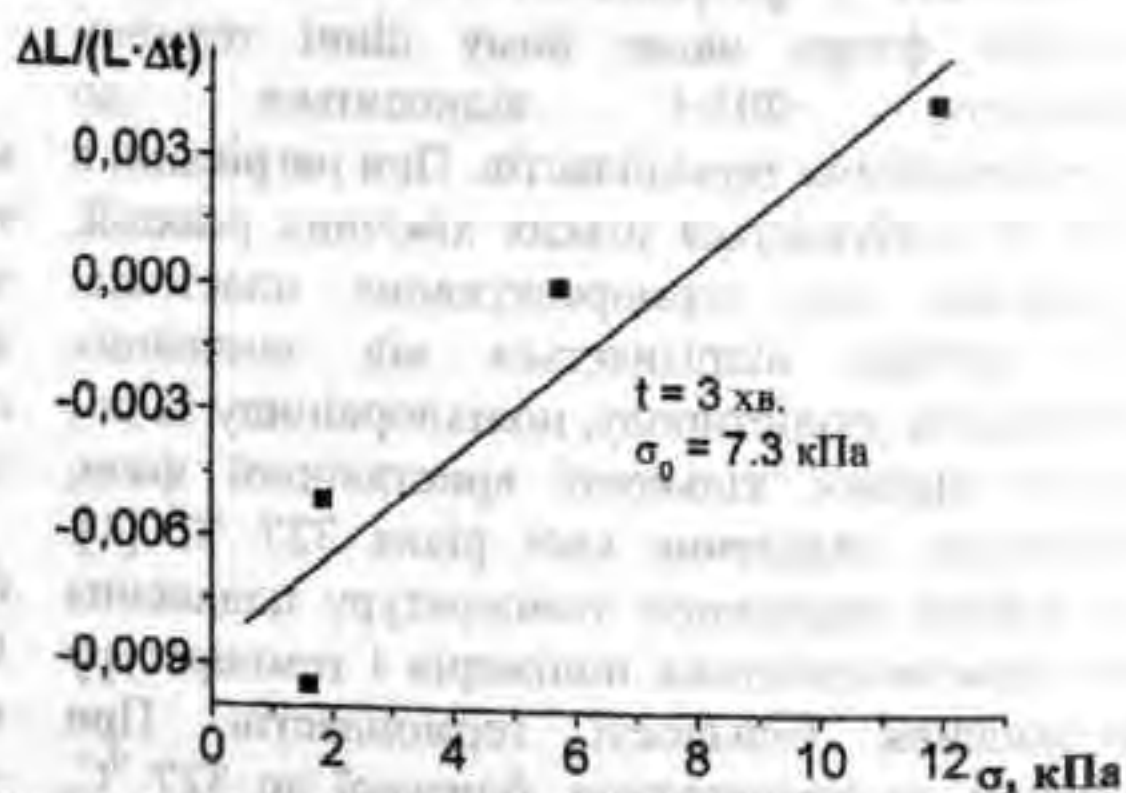


Рис. 6. Залежність швидкості деформації  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  від напруги  $\sigma$  для напрямку  $\varphi = 45^\circ$ .



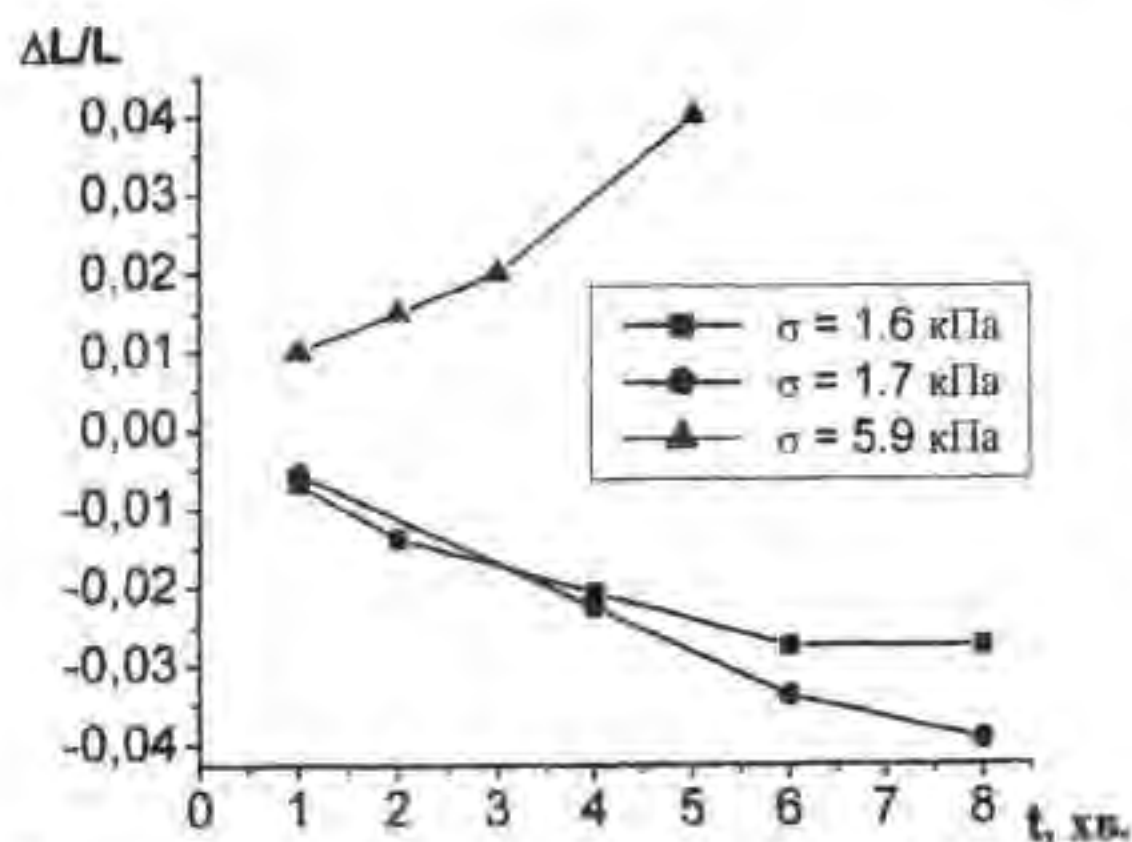


Рис. 7. Залежності деформації  $\Delta L/L$  фторопластового зразка від часу  $t$  для напрямку  $\varphi \approx 67^\circ$ .

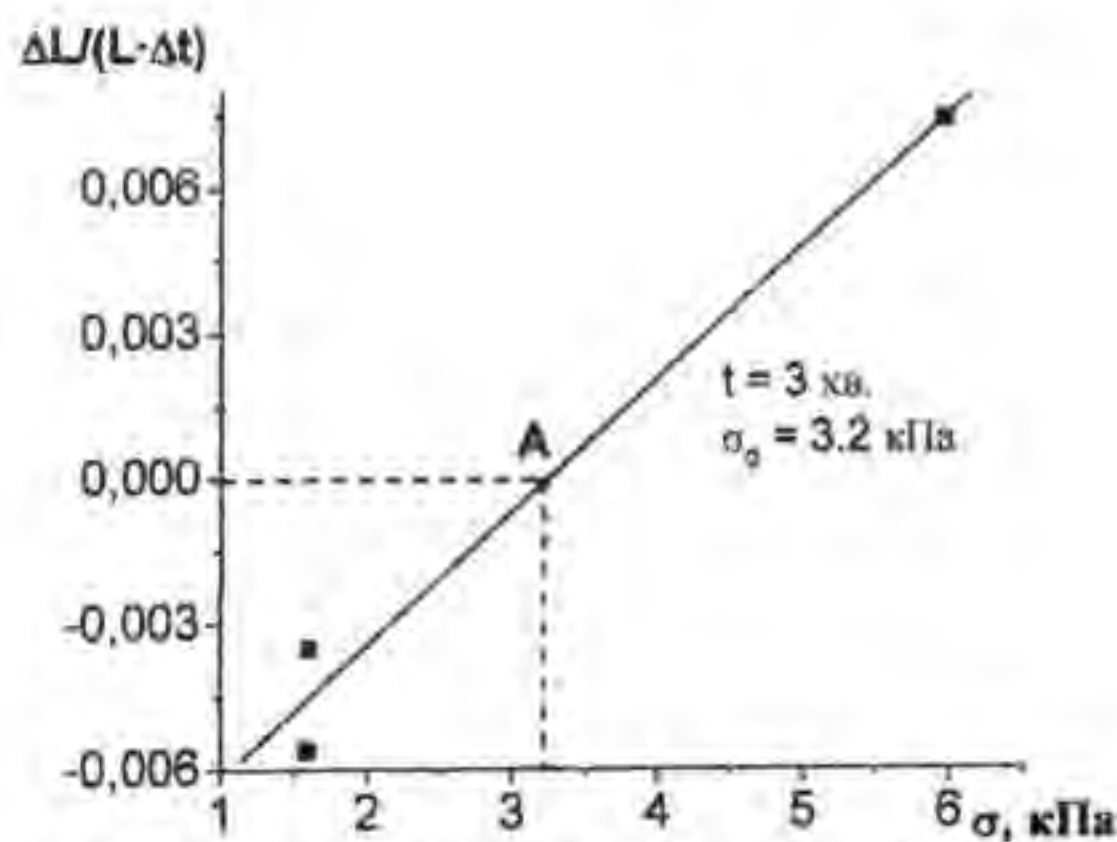


Рис. 8. Залежність швидкості деформації  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  від напруги  $\sigma$  для напрямку  $\varphi \approx 67^\circ$ .

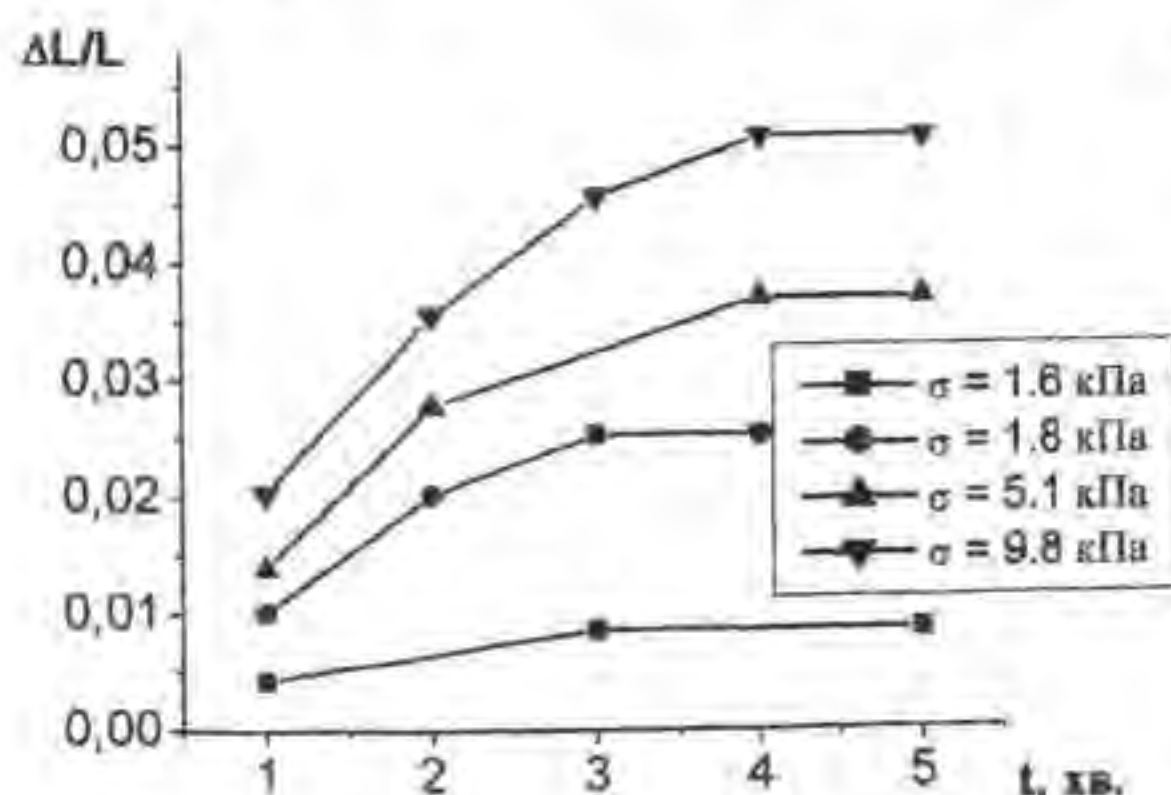


Рис. 9. Залежності деформації  $\Delta L/L$  фторопластового зразка від часу  $t$  для напрямку  $\varphi = 90^\circ$ .

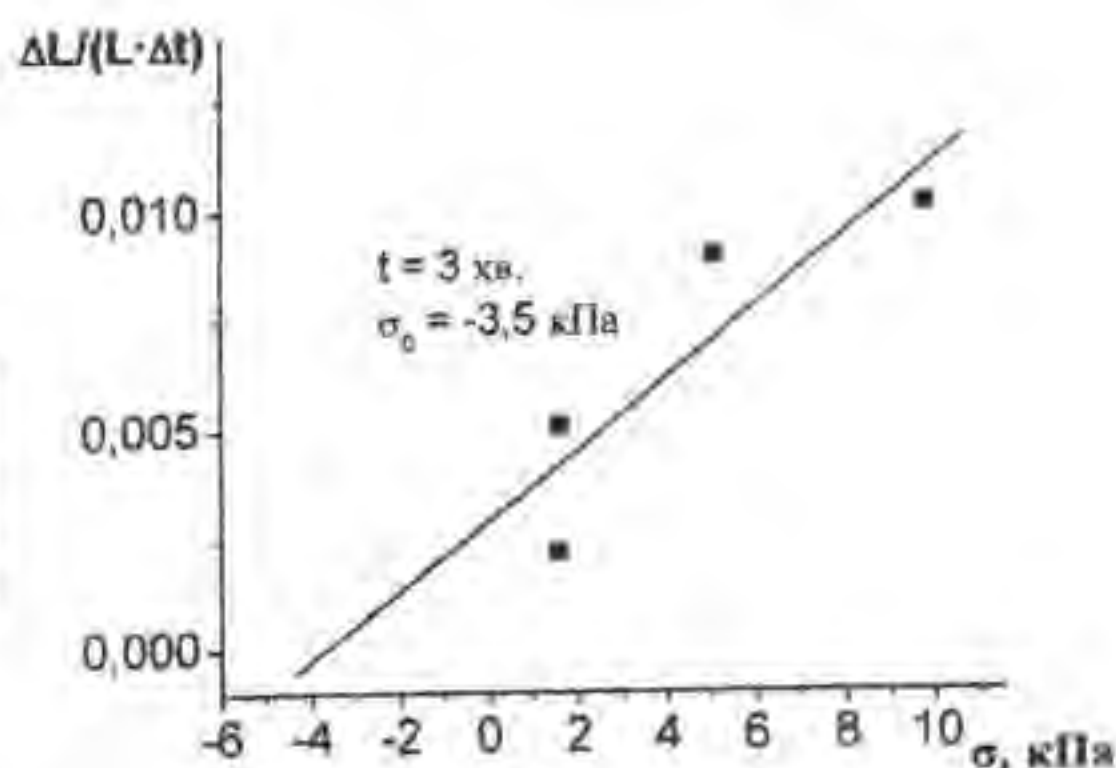


Рис. 10. Залежність швидкості деформації  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  від напруги  $\sigma$  для напрямку  $\varphi = 90^\circ$ .

Спостерігаємо наступні закономірності:

1. Довжина фторопластових зразків зменшується при малих напругах і збільшується при великих для напрямків  $\varphi \approx 0^\circ - 70^\circ$ .

2. Довжина зразків зростає при різних напругах для напрямків  $\varphi \approx 70^\circ - 90^\circ$ .

3. Криві  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  мають інверсію знаку для напрямків  $\varphi \approx 0^\circ - 67^\circ$ , коли напруга досягає певного значення  $\sigma_0$  (точка А на рис. 8 є прикладом знаходження  $\sigma_0$ , при якому  $\Delta L/L = 0$ ).

Для пояснення природи таких залежностей повзучості від напрямку  $\varphi$  в плівці (зменшення довжини при  $\sigma < \sigma_0$  і збільшення при  $\sigma > \sigma_0$ ) вивчалась поведінка вільної плівки при нагріванні. Зміна  $\Delta L/L$  вільної плівки з часом для різних  $\varphi$  показана на рис. 11. Тут можна виділити дві області: на початку відпалу (до 5 хв.) відбувається швидка зміна розмірів, після ~1 год. відпалу спостерігається майже лінійна залежність. Перша область обумовлена впливом

внутрішніх залишкових напруг у фторопласті (що утворились при виготовленні плівки), а друга – поверхневим натягом.

Розглянемо в плівковому зразку товщиною  $d$ , контур ABCD, що як пояс охоплює зразок. Поверхні зразка намагаються стиснутись за рахунок сил поверхневого натягу. Сила  $F_n$  поверхневого натягу, що стискає зразок в напрямку, перпендикулярному контуру ABCD,

$$F_n = \gamma \cdot (2l + 2d), \quad (1)$$

де  $l = AB = CD$ ,  $d = AC = BD$  – товщина плівки,  $\gamma$  – коефіцієнт поверхневого натягу (Н/м = Па·м).

Стискаюча напруга  $\sigma_0$ , що виникає в контурі

$$\sigma_0 = \frac{F_n}{l \cdot d} = \frac{\gamma \cdot (2l + 2d)}{l \cdot d}. \quad (2)$$



Оскільки  $l \gg d$ , то

$$\sigma_0 \approx \frac{2\gamma}{d} \quad (3)$$

З рівняння (3) можна отримати

$$\gamma = \frac{\sigma_0 \cdot d}{2} \quad (4)$$

Напруження  $\sigma_0$  вимірювали безпосередньо в [4, 5] для металів, використовуючи методику підбору розтягуючого навантаження, при якому зразок і не скорочується, і не розтягується.

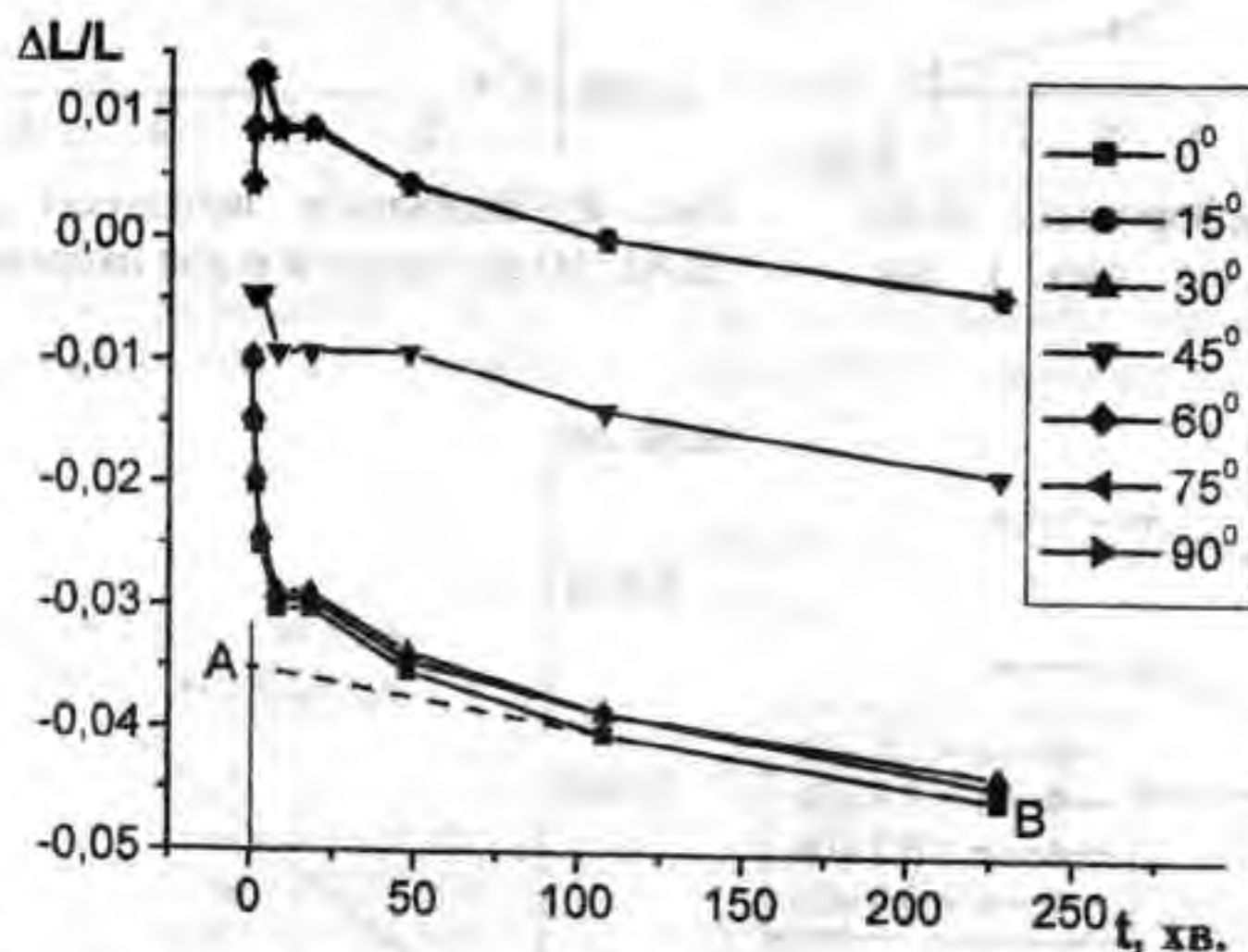


Рис. 11. Залежності деформації  $\Delta L/L$  вільної плівки від часу  $t$  для напрямку  $\varphi = 0^\circ - 90^\circ$ .

Для підрахунку коефіцієнта  $\gamma$  проводився довготривалий (~ 2 год.) дослід на повзучість плівок під дією різного навантаження (рис.12).

За рис.13 було визначено напруження  $\sigma_0$  при якому зразок не буде деформуватись:  $\sigma_0 \approx 0,9$  кПа.

За рівнянням (4) отримали  $\gamma = 0,012$  Па·м. Такий результат є порівняним з відомим значенням коефіцієнта поверхневого натягу ФП-4 (0,015 – 0,02 Па·м) [6].

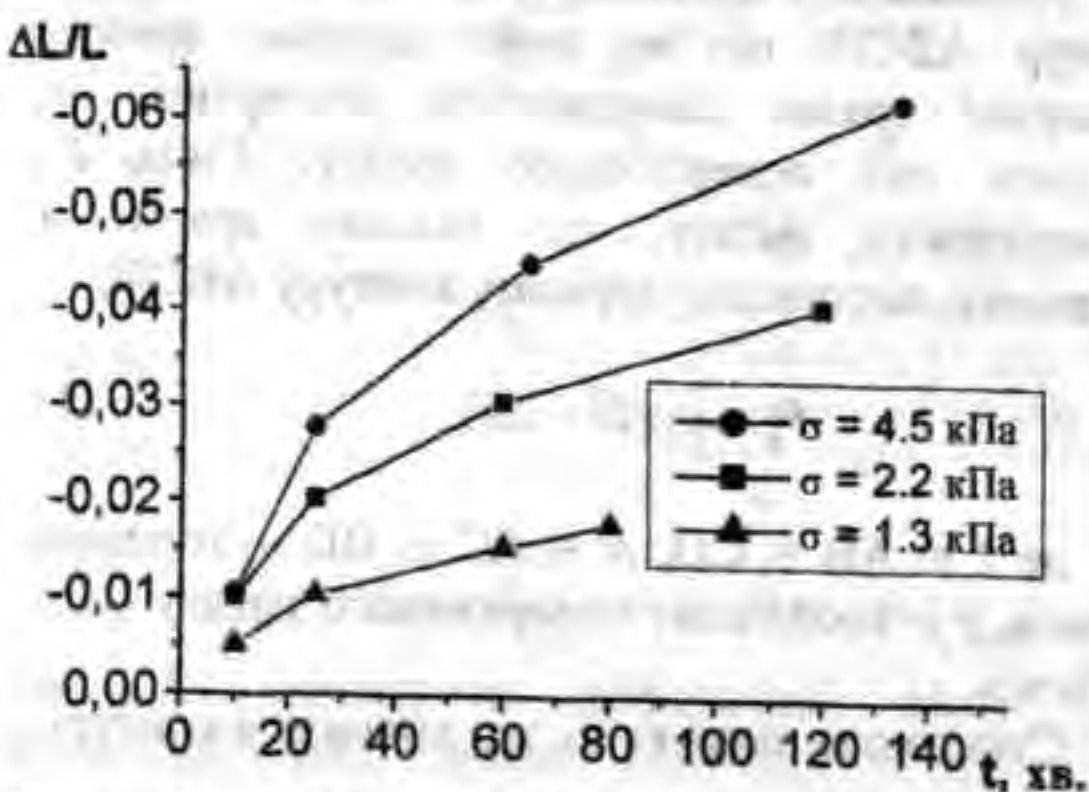


Рис. 12. Залежності деформації  $\Delta L/L$  фторопластового зразка від часу  $t$  для напрямку  $\varphi = 90^\circ$ .

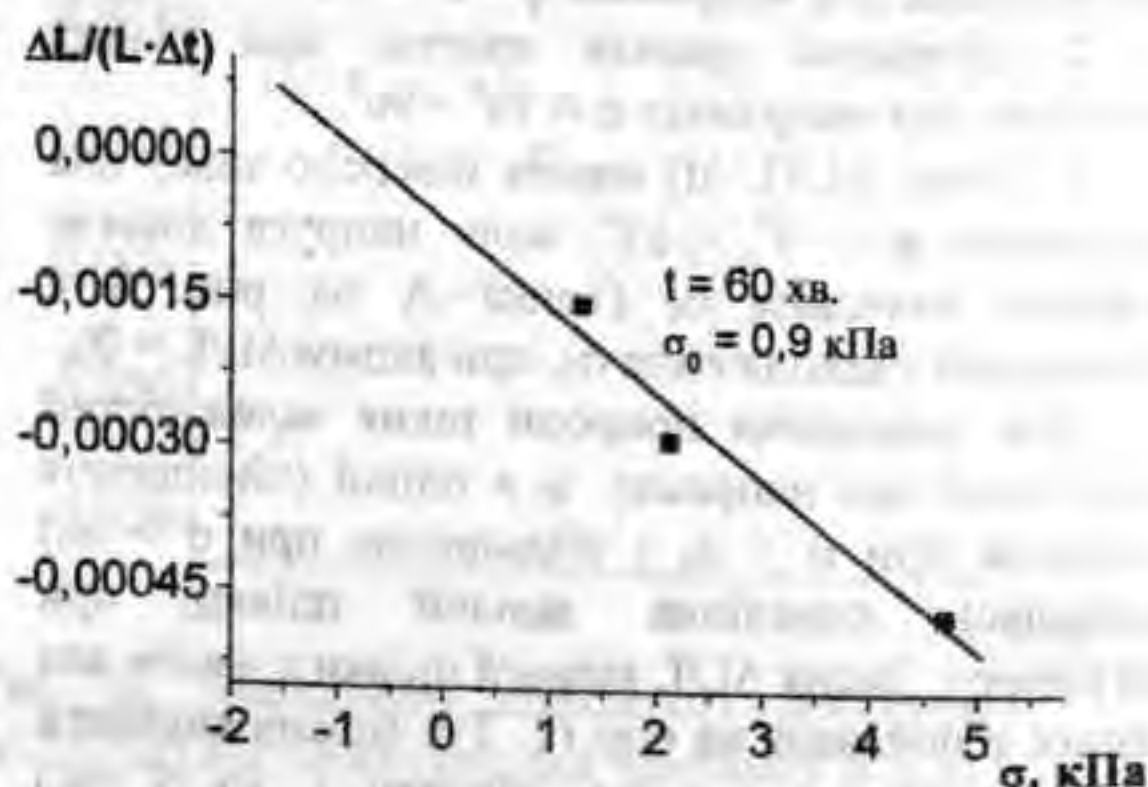


Рис. 13. Залежність швидкості деформації  $\Delta L/(L \cdot \Delta t)$  від напруги  $\sigma$  для напрямку  $\varphi = 0^\circ$ .



Розглянемо зразок у формі круга. Внутрішні напруги  $\sigma_n$  в уявній смужці, що тягнеться від центру круга вздовж радіуса смужки (сектор  $\delta\varphi$ )  $\varphi = 0$ ,

$$\sigma_n = \frac{F_n}{S_0}, \quad (5)$$

де  $F_n$  – сила внутрішніх залишкових напруг. Площа  $S_0$  поперечного перерізу сектора шириною  $l$  посеред радіуса

$$S_0 = l \cdot d. \quad (6)$$

Тоді

$$\sigma_n = \frac{F_n}{l \cdot d}. \quad (7)$$

Чим менше значення  $\delta\varphi$ , тим точнішим буде значення  $\sigma_n$ . Силу внутрішніх залишкових напруг  $F_n$  можна оцінити із співвідношення:

$$\frac{F_n}{F_n} = \frac{\left(\frac{\delta L}{L}\right)_n}{\left(\frac{\delta L}{L}\right)_n}, \quad (8)$$

де  $F_n$  – сила поверхневого натягу, що визначається з рівняння (1).

Розглянуто два наближення:

1)  $\delta\varphi = 5^\circ$ ;  $l = 1$  мм; оскільки  $d = 0,026$  мм, то  $F_n = 0,0205 \cdot 10^{-3}$  Н;

2)  $\delta\varphi = 3^\circ$ ;  $l = 0,6$  мм; тоді  $F_n = 0,013 \cdot 10^{-3}$  Н.

Величини  $(\Delta L/L)_n$  та  $(\Delta L/L)_n$  знайдені з рис. 11 при  $t = 85$  с. Для цього було проведено дотичні прямі по лінійній залежності  $(\Delta L/L)$  від  $t$  (наприклад АВ). Все, що нижче цієї прямої, обумовлено поверхневим натягом і так визначено  $(\Delta L/L)_n$ , а все, що вище цієї прямої, відповідає внутрішнім залишковим напругам і так визначено  $(\Delta L/L)_n$ .

Таблиця 1.

Значення внутрішніх залишкових напруг  $\sigma_n$  в залежності від  $\varphi$ .

| $\varphi$        | $0^\circ$ | $15^\circ$ | $30^\circ$ | $45^\circ$ | $60^\circ$ | $75^\circ$ | $90^\circ$ |
|------------------|-----------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| $(\Delta L/L)_n$ | 0,01016   | 0,01053    | 0,00948    | 0,01       | 0,0083     | 0,00874    | 0,00813    |
| $(\Delta L/L)_n$ | 0,0151    | 0,0141     | 0,01468    | 0,00433    | 0,00971    | 0,0093     | 0,0092     |
| $F_n$ , мН       | 0,031     | 0,027      | 0,032      | 0,009      | 0,024      | 0,022      | 0,023      |
| $\sigma_n$ , кПа | 1,19      | 1,04       | 1,22       | 0,35       | 0,92       | 0,84       | 0,89       |
| $F_n$ , мН       | 0,019     | 0,017      | 0,02       | 0,006      | 0,015      | 0,014      | 0,015      |
| $\sigma_n$ , кПа | 1,22      | 1,12       | 1,29       | 0,39       | 0,98       | 0,9        | 0,96       |

Результати розрахунку внутрішніх залишкових напруг  $\sigma_n$  наведені в таблиці 1.

### Висновки

1. Вивчена залежність деформації  $\Delta L/L$  плівок ФП в залежності від часу  $t$  для різних напрямків  $\varphi$ . Виділено дві області, де перша область обумовлена впливом внутрішніх залишкових напруг, а друга – поверхневим натягом.
2. Досліджена повзучість фторопласту під дією різного навантаження і визначено коефіцієнт поверхневого натягу  $\gamma = 0,012$  Па·м.
3. Розраховані внутрішні залишкові напруги у фторопластових плівках для різних напрямків  $\varphi$ . Так для напрямку  $\varphi = 45^\circ$  внутрішні залишкові напруги є найменші ( $\sim 0,39$  кПа), а для  $\varphi = 0^\circ$  – найбільші ( $\sim 1,22$  кПа).

### Список використаних джерел

1. Лазар М. Фторопласты. – М.-Л., 1965, - 304 с.

2. Ануфриев Ю.А., Гусев В.Н., Смирнов В.Ф. Эксплуатационные характеристики и надежность электрических конденсаторов. – Москва, 1976, - 224 с.
3. Maaroufi A., Nahoubi K., Amarti A. EL, Carmona F. Electrical resistivity of polymeric matrix loaded with nickel and cobalt powders // Journal of Materials Science. – 2004. – №39. – P. 265-270.
4. Копань В.С. Определение поверхностного натяжения платины // УФЖ. – 1965. – №2. – с. 223-224.
5. Белащенко Г.И. Исследование сил, возникающих при взаимодействии примесей, на тонких проволоках. Реферат кандидатской диссертации, Институт стали, М., 1962.
6. <http://www.bask.ru/info/papers/dwr.html>

Надійшла до редколегії 15.01.2007



УДК 532.73

Біляєв С.В.<sup>1</sup>, наук. співробітник  
Велешук В.П.<sup>1</sup>, аспірант  
Ляшенко О.В.<sup>2</sup>, канд. фіз.-мат. наук, доцент  
Фонкіч О.М.<sup>1</sup>, зав. відділом

### Збагачення поверхні монокристалів CdTe надлишковим телуrom при обробці в системі $Br_2 - HBr - H_2O$

В роботі на основі проведених досліджень пояснено механізм збагачення поверхні монокристалів CdTe надлишковим хімічно незв'язаним телуrom з утворенням нанорозмірних шарів при взаємодії з поліруючим травником  $Br_2-HBr-H_2O$ . Проаналізовано особливості взаємодії поверхні CdTe з бромним травником та вплив хімічного складу поверхні на фізичні властивості монокристалів CdTe. Запропоновано шляхи розширення функціональних можливостей поліруючого травника для отримання стехіометричної поверхні монокристалів CdTe.

Ключові слова: CdTe, поліруючий травник  $Br_2-HBr-H_2O$ , надстехіометричний незв'язаний телур.

S.V. Belyaev<sup>1</sup>, researcher  
V.P. Veleschuk<sup>1</sup>, post-graduate student  
O.V. Lyashenko<sup>2</sup>, Ph. D., assoc. professor  
O.M. Fonkich<sup>1</sup>, head of department

### Enrichment of CdTe single crystal surface by superfluous tellurium at processing in $Br_2 - HBr - H_2O$ solution

In this paper the enrichment mechanism of the CdTe single crystal surface by superfluous chemically untied tellurium with the appearance of nanosized layers at interaction with polishing bromine solution  $Br_2-HBr-H_2O$  is developed. Interaction features of the CdTe surface with bromine solution are analyzed and influence of a surface chemical composition on physical properties of CdTe single crystal is considered. The ways of expansion of polishing solution functionalities for production stoichiometric CdTe single crystal surface are offered.

Key Words: CdTe, polishing solution  $Br_2-HBr-H_2O$ , overstoichiometric untied tellurium.

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України.

<sup>2</sup> Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

Монокристали CdTe та тверді розчини  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  є базовим підкладковим матеріалом для виготовлення багатоелементних фотоприймачів інфрачервоного діапазону в області вікна прозорості атмосфери на основі епітаксійних шарів  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  [1,2]. Іншою областю застосування CdTe та  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  є використання в детекторах гамма- та рентгенівського випромінювання [2,3].

В обох випадках основною вимогою, що пред'являється до вказаного матеріалу, є його високий питомий опір  $\rho$ , величина якого становить  $10^9 - 10^{10}$  Ом·см [1-3]. Проте поверхневий опір монокристалів CdTe може суттєво знижуватись внаслідок збагачення поверхні окремими компонентами (Te, Cd), адсорбції атмосферного кисню, утворення повновалентних і неповновалентних поверхневих хімічних сполук.

Найбільш типовою проблемою є виділення надлишкового надстехіометричного електро-негативного хімічно незв'язаного телуру безпосередньо в процесі травлення [4,5], що в

більшості випадків є небажаним явищем при технологічних обробках телуриду кадмію. Крім того стан реальної поверхні напівпровідникових монокристалів різко залежить від характеру умов її утворення та формування, зокрема – особливостей хімічної поліровки, режиму її відмивки та сушки, а також від хімічної природи адсорбованих домішкових атомів на різних стадіях обробки.

Вказані фактори, змінюючи зарядовий стан поверхні, швидкість поверхневої рекомбінації та характер поглинання світла зовнішніми шарами поверхневої структури суттєво впливають на фізичні характеристики поверхні напівпровідників на основі CdTe, зокрема на висоту потенційного бар'єра в системі напівпровідник-метал [5]. Для зниження рівня оптичного поглинання і підвищення квантової ефективності електричний бар'єр повинен розміщуватись на малій глибині від поверхні (1,0 – 1,5 мкм), але при цьому густина поверхневих станів реальної поверхні буде суттєво впливати на фізичні параметри приладів.



Слід відмітити, що збільшення поверхневої провідності в широкому діапазоні найбільш властиво саме для високоомного стану кристалів в зв'язку з ростом дебаєвської довжини екранування

$$l_D = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 kT}{e^2 n_0}},$$

яка характеризує глибину проникнення поверхневого електричного поля в об'єм кристалу, внаслідок чого змінюється співвідношення концентрації основних та неосновних носіїв заряду.

Вказаний ефект зростання поверхневої провідності супроводжується зростанням поверхневих струмів витоку і відповідно амплітуди шумів в матричних фотоприймачах на основі  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ , ускладнюючи тим самим виділення корисного сигналу. В детекторах рентгенівського та гама- випромінювання зниження поверхневого опору при високій прикладеній напрузі призводить до поверхневих закорочень.

Адсорбція молекул розчинника, які проявляють донорні або акцепторні властивості з виникненням додаткових поверхневих електронних рівнів в забороненій зоні напівпровідника, а також вплив розчинника на зсув хімічної рівноваги в системі, сольватаційну здатність, розчинність та реакційну здатність реагентів [6] обумовлює недопустимість дослідження фізичних властивостей поверхні без врахування конкретних умов її формування в поліруючому травнику визначеного складу.

Найбільш практично поширеною та вивченою поліруючою системою для сполуки  $CdTe$  та твердого розчину  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  є бромні травники, використання яких обумовлено доброю розчинністю продуктів реакції у водних розчинах та в органічних розчинниках.

В даній роботі розглянуто особливості та причини формування шарів надстехіометричного хімічно незв'язаного телуру на поверхні телуриду кадмію при взаємодії його поверхні з розчином поліруючого бромного травника  $Br_2-HBr-H_2O$ .

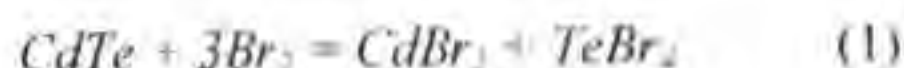
Відомо, що на хімічно травлених поверхнях  $CdTe$  спостерігається неконтрольоване відхилення від стехіометрії [4,5,7]. Причому поверхні, збагачені аніонами, можуть бути отримані при використанні тільки кислотних травників. В ряді робіт [4,5,7,8] відмічено, що при поліруванні пластин  $CdTe$  в бромних травниках поверхня неконтрольовано покривається тонким шаром товщиною від 3 – 5

до 150 моноатомних шарів елементарного хімічно незв'язаного телуру.

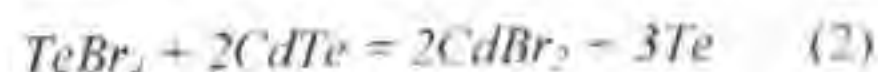
Наявність вільного телуру на поверхні  $CdTe$  була виявлена нами після полірування поверхні  $CdTe$  при різних режимах травлення бромним травником на протязі від 120 до 300 сек. Дослідження були проведені за методикою порівняння відносних інтенсивностей характеристичного рентгенівського випромінювання компонентів поверхні монокристалів за допомогою рентгенівського мікроаналізатора типу COMIBAX. Підтвердження ефекту виділення надлишкового телуру на поверхні  $CdTe$  були отримані в роботі [9] методом комбінаційного розсіювання світла по характерним частотам аморфної та кристалічної фази  $Te$ .

Причини та механізм виділення хімічно незв'язаного телуру на реальній поверхні  $CdTe$ , зокрема при травленні в поліруючій системі  $Br_2-HBr-H_2O$  на сьогоднішній день практично не вивчені [4,7,8], причому в літературі майже відсутні відомості про прогнозований вплив хімічних обробок на електрофізичні властивості протравленої поверхні [7,8].

Відповідно до [7,8] хімічна взаємодія поверхні  $CdTe$  з поліруючою системою  $Br_2-HBr-H_2O$  описується рівнянням:



Авторами [7] була зроблена спроба пояснити ефект збагачення поверхні  $CdTe$  надлишковим надстехіометричним елементарним телуrom за допомогою електрохімічного механізму розчинення за рівнянням:



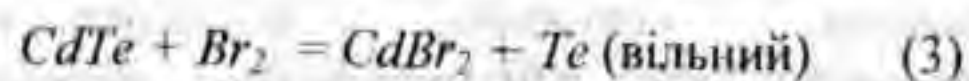
Особливості протікання гетерогенної реакції розглянемо з урахуванням загальних закономірностей теорії кислотно - основної взаємодії, у відповідності з якою кожна довільна індивідуальна речовина може проявляти кислотні або основні властивості. При цьому згідно [6] можна встановити зв'язок між хімічними властивостями розчиняємої речовини та її розчинністю, яка визначається інтенсивністю взаємодії з розчинником. Аналізуючи реакцію (1) з урахуванням загальних закономірностей теорії кислотно-основної взаємодії [6], справедливих для довільного класу реакцій, можна прийти до висновку про неможливість протікання такої реакції взагалі.

З правої частини рівняння (1) випливає, що бром повинен індивідуально взаємодіяти з вихідними вільними компонентами  $Cd$  та  $Te$ , розчиненими в  $Br_2-HBr-H_2O$ , а не з поверхнею

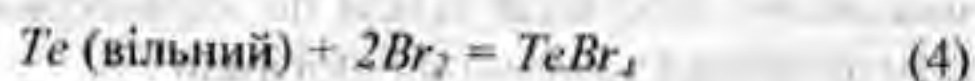


хімічної сполуки  $CdTe$ .

Логічно припустити, що при взаємодії броду з хімічною сполукою  $CdTe$  повинна протікати реакція витіснення більш сильною кислотою, якою є брод, відносно слабкої кислоти, в ролі якої виступає хімічний елемент  $Te$ , тобто повинна йти реакція витіснення за рівнянням:

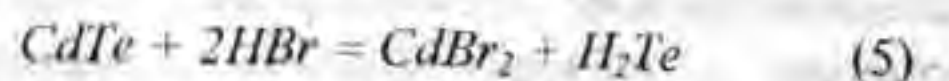


Телур, проявляючи кислі властивості, повинен вступати в реакцію з окисником – бродом, проте інтенсивність даної взаємодії повинна бути невеликою у порівнянні з взаємодією окислювача з більш основною сполукою  $CdTe$ :

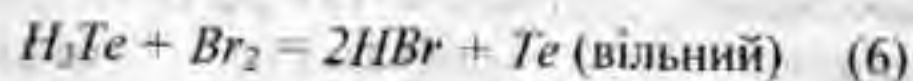


При умові, що швидкість прямої реакції (3) значно перевищує швидкість прямої реакції (4), виділення вільного телуру є природним процесом та не потребує залучення додаткових штучних механізмів. Виділення телуру на поверхні  $CdTe$  пояснюється в рамках основних положень теорії кислотно – основної взаємодії [6], а саме реакцією витіснення телуру з більшою швидкістю за швидкість його зв'язування в хімічну сполуку  $TeBr_4$ .

Хімічна сполука  $CdTe$  в поліруючому бродному травнику, крім взаємодії з окислювачем ( $Br_2$ ), може також взаємодіяти з розчинником, в ролі якого виступає бродоводнева кислота  $HBr$  за рівнянням:

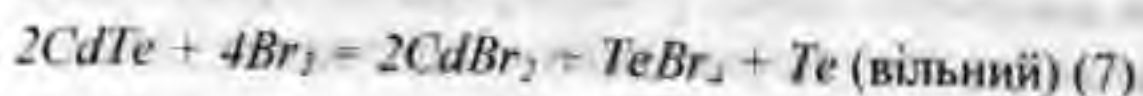


Телуроводень, що виділяється в процесі реакції, легко окислюється галогеном  $Br_2$  до вільного телуру по реакції:



Проте швидкість протікання прямої реакції  $CdTe$  з розчинником  $HBr$  як мінімум на порядок нижча за швидкість реакції (3) і ефект виділення елементарного телуру при протіканні хімічних реакцій (5) та (6) вірогідно є незначним.

Таким чином, повна взаємодія  $CdTe$  з поліруючим бродним розчином у відповідності з рівняннями реакцій (3) та (4) носить двостадійний характер та описується загальним рівнянням



Продукт реакції  $CdBr_2$  є кристалогідратом та, проявляючи більш виражені основні властивості у порівнянні з елементарним  $Te$ , розчиняється набагато швидше у кислих водних розчинах

внаслідок підвищеної інтенсивності взаємодії з розчинником. Тому ефект збагачення поверхні надлишковим телуром обумовлений відносним зменшенням його розчинності в розглянутому кислому розчині.

Необхідно відмітити, що протікання гетерогенної реакції локалізовано безпосередньо поблизу границі розділу двох фаз [10]. Тому в реакційній зоні перерозподілу зв'язків в околі 12 – 18 Å, що примикає до поверхні твердої фази кристалічного  $CdTe$  [10] у відповідності з рівнянням (7) одночасно існують не два, а три продукти реакції:  $CdBr_2$ ,  $TeBr_4$  та елементарний хімічно незв'язаний телур. Питання яким саме компонентом буде збагачуватись поверхня телуриду кадмію в заданому поліруючому розчині зводиться до аналізу інтенсивностей взаємодії вказаних продуктів реакції з розчинником та співвідношенню їх відносних розчинностей в даному водному розчині.

Окрім неконтрольованого збагачення поверхні атомами електронегативного телуру, недоліком поліруючої системи  $Br_2-HBr-H_2O$  є можливість утворення окислів безпосередньо в процесі хімічного травлення. Це обумовлено використанням в системі водного розчинника  $HBr-H_2O$ . Для усунення двох небажаних факторів пропонується використання неводних органічних розчинників.

Функціональні можливості поліруючих бродних розчинів можуть бути значно розширені шляхом заміни розчинника  $HBr-H_2O$ . Зміщуючи хімічну рівновагу в системі та розчинність продуктів реакції шляхом підбору відповідного розчинника, можна отримувати поверхню з необхідними функціональними хімічними та фізичними властивостями, зокрема – з відносно малою концентрацією кінцевих продуктів реакції на поверхні монокристалу, які є додатковими центрами дефектоутворення в напівпровідникових структурах.

Розглянутий ефект збагачення поверхні монокристалів  $CdTe$  електронегативними атомами вільного хімічного незв'язаного телуру з утворенням нанорозмірного шару призводить до зміни зарядового стану поверхні в сторону негативних значень поверхневого потенціалу, що супроводжується відповідним зсувом електронно-діркової рівноваги в приповерхневому шарі дебаєвської глибини екранування. Внаслідок цього змінюються фізичні характеристики: поверхнева провідність, робота виходу, час життя нерівноважних носіїв заряду та рівень фоточутливості монокристалів



$CdTe$  після хімічної обробки в поліруючому травнику визначеного складу [4,5].

Таким чином з'ясовано, що основним механізмом неконтрольованого збагачення поверхні монокристалів  $CdTe$  надлишковим хімічно незв'язаним телуrom з утворенням нанорозмірного шару є послідовні хімічні реакції, локалізовані на границі розділу двох фаз, а саме в межах кількох моноатомних шарів.

Показано, що хімічна реакція  $CdTe$  з поліруючим бромним розчином має двостадійний характер і виділення хімічно незв'язаного телуру на поверхні  $CdTe$  відбувається за рахунок значного перевищення швидкості прямої реакції виділення хімічно незв'язаного телуру за швидкістю реакції зв'язування вільного телуру в сполуку тетрабромід телуру.

Встановлені та проаналізовані закономірності двостадійної взаємодії крім  $CdTe$  поширюються на сполуку  $ZnTe$ , тверді розчини  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  та  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ . Майже повна практична незалежність від складу аніонів у вказаних напівпровідниках впливає з реакцій (3) та (4), в яких головну роль відіграє хімічна взаємодія саме телуру з окислювачем та кислим водним розчинником.

Для отримання поверхонь, максимально наближених до стехіометричного складу, а також поверхонь з контрольованим відхиленням концентрації компонентів напівпровідникової сполуки  $CdTe$  пропонується використання поліруючих бромних розчинів із змішаним розчинником, що дозволяє плавно змінювати кислотність розчину та реакційну здатність реагентів.

#### Список використаних джерел

1. Мынбаев К.Д., Иванов-Омский В.И. Легирование эпитаксиальных слоев и гетероструктур на основе  $HgCdTe$ . Обзор // ФТП. – 2006. – 40 вып.1 – С. 3 – 22.

2. Fiederle M., Babentsov V., Franc J., Fauler A., Konrath J.-P. Growth of high resistivity  $CdTe$  and  $(Cd,Zn)Te$  crystals // Cryst. Res. Technol. – 2003. – 38 № 7–8, P. – 588 – 597.
3. Szeles Cs.  $CdZnTe$  and  $CdTe$  materials for X-ray and gamma ray radiation detector application // Phys. Stat. Sol. (b) – 2004. – 241 №3. – P. 783–790.
4. Dharmadasa I.M. Recent developments and progress on electrical contacts to  $CdTe$ ,  $CdS$  and  $ZnS$  with special reference to barrier contacts to  $CdTe$  // Prog. Cristal Growth and Charact. – 1998. – № 36. – P. 249-290.
5. Білевич Е.О., Сукач А.В., Тетеркин В.В. Влияние химической обработки поверхности на высоту потенциального барьера в диодах Шоттки  $Li/p-CdTe$  // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. – 2004. вып. 39. – С. 144 – 151.
6. Фиалков Ю.Я., Житомирский А.Н., Тарасенко Ю.А. Физическая химия неводных растворов. Ленинград: "Химия", 1973. – С. 375.
7. Венгель П.Ф., Томашик В.Н., Фомин А.В. Травление теллурида кадмия раствором брома в бромистоводородной кислоте. Тезисы докладов 3-го Всесоюзного семинара "Химические составы обработки поверхности неорганических материалов" Москва, 1991. – С. 16.
8. Білевич Е.О. Дис. на здоб. наук. ступ. канд. тех. наук. Інститут фізики напівпровідників НАНУ, Київ, 2002. – С. 176.
9. Артамонов В.В., Байдуллаєва А., Власенко А.И. и др. Атомно-силовая микроскопия и рамановское рассеяние света лазерно-индуцированного структурного разупорядочения на поверхности  $p-CdTe$  // ФТП. 2004. – 46 вып.8 – С. 1489 – 1493.
10. Браун М., Доллмор Д., Гальвей А. Реакции твердых тел. М.: Мир, 1983. – С. 359.

Надійшла до редколегії 6.03.2007



УДК 519.9

Боровий М.О., канд. фіз.-мат. наук, доцент,  
Іщенко Р.М., аспірант,  
Степаніщев М.Б., інженер

### Інтегральні перерізи іонізації $M$ - підоболонок атомів Pb при електронному ударі в діапазоні енергій 5–30 кеВ

Експериментально досліджено відношення інтенсивності  $M_{5N}$ -сателітів до інтенсивності групи  $M\alpha_{1,2}$ -ліній та  $M_{5X}$ -сателітів ( $\eta$ ) при електронному бомбардуванні товстих мішеней Pb в діапазоні енергій електронів  $E_0=5-30$  кеВ. Інтегральні перерізи іонізації  $M$ -підоболонок Pb обчислювалися у плоскохвильовому наближенні (модифікована формула Бете), класичному імпульсному наближенні (формула Гризинські), за напівемпіричною формулою Бете та використовувалися для розрахунків величини  $\eta$ . Встановлено, що в області енергій  $E_0 > 10$  кеВ для обчислення перерізів іонізації  $M$ -підоболонок Pb є коректним застосування класичного імпульсного наближення та напівемпіричної формули Бете з коригуючими параметрами для  $K$ -та  $L$ -оболонок. Однак, в біляпороговій області  $E_0=5-7$  кеВ спостерігаються значні розбіжності (15–65%) між експериментальними та розрахованими значеннями  $\eta$ . Визначено значення коригуючих параметрів у напівемпіричній формулі Бете, які є рекомендованими для обчислення перерізів іонізації  $M$ -підоболонок важких елементів ( $Z > 80$ ).

Ключові слова: електронна оболонка, переріз іонізації, рентгенівський  $M\alpha$ -спектр

N.A. Borovoy, Ph.D.,  
Ischenko R.M., post-graduate,  
M.B. Stepanischev, engineer

### Integral cross sections of ionization of $M$ - subshells of Pb atoms at electron impact in energy range 5 – 30 keV

The ratio of  $M_{5N}$ -satellites intensity to  $M\alpha_{1,2}$ -lines and  $M_{5X}$ -satellites intensities is experimentally investigated at electron bombardment of thick Pb targets in energy range  $E_0=5-30$  keV. The integral ionization cross sections of Pb  $M$ -subshells were calculated in plane-wave approximation (modified Bethe formula), classical momentum approximation (Gryzinski formula), under the semiempirical Bethe formula and used for calculations  $\eta$  values. It is found, that classical momentum approximation and semiempirical Bethe formula with adjusting parameters for  $K$ - and  $L$ -shells are correct for calculation of  $M$ -subshells ionization cross sections at energies  $E_0 > 10$  keV. However in the near-threshold region  $E_0=5-7$  keV significant distinctions (15–65%) between the experimental and calculated values  $\eta$  are observed. Values of adjusting parameters in the semiempirical Bethe formula which are recommended for calculations of high elements ( $Z > 80$ )  $M$ -subshells ionization cross sections are certain.

Key Words: electron subshell, ionization cross section,  $M\alpha$  X-ray spectrum

\* E-mail: borovoy@univ.kiev.ua; rm\_ischenko@ukr.net

Інтегральний переріз іонізації (ІП) внутрішньої електронної оболонки атому при електронному бомбардуванні характеризує взаємодію електронної підсистеми атому з іонізуючим електроном і широко використовується у практичних розрахунках інтенсивності рентгенівського характеристичного випромінювання та іонізаційних втрат енергії

електронного пучка. Для  $K$ -оболонки при електронному ударі абсолютні значення ІП атомів елементів різних груп визначалися експериментально різними методами в ряду робіт [1–4]. Однак вже при дослідженні таких величин для  $L$ -підоболонок істотно зростають експериментальні складнощі, пов'язані з необхідністю коректного урахування



міжоболонкової міграції вакансій, і тому відомі лише поодинокі експерименти з визначення абсолютних значень ІП  $L_{1-}$ ,  $L_{2-}$  та  $L_{2-}$  підоболонок [5,6]. У випадку ж  $M_i$ -підоболонок ( $i=1-5$ ) можна говорити про фактичну відсутність експериментальних досліджень абсолютних значень ІП при електронному ударі.

В той же час, квантово-механічні *ab initio* розрахунки ІП, наприклад, методами збіжного сильного зв'язку чи матриці функціоналу густини (R-матриці) при різних енергіях налітаючих електронів  $1 < \varepsilon < \infty$  ( $\varepsilon = E_0/E_i$  – перевищення енергії налітаючого електрона ( $E_0$ ) над потенціалом іонізації ( $E_i$ ) відповідної оболонки чи підоболонки) обмежуються лише легкими елементами  $Z < 10$  [7], тоді як в області великих енергій  $\varepsilon \gg 1$  для розрахунків ІП внутрішніх електронних оболонок атомів з різним  $Z$  широко використовується теорія збурень, зокрема, перше борнівське наближення (як плоскохвильове, так і спотворених плоских хвиль) [8]. Привабливість плоскохвильового наближення полягає в тому, що воно дає досить простий аналітичний вираз для визначення ІП (формула Бете [9] та її модифікації [10,11]), основними параметрами якого є кількість електронів ( $n_i$ ) у  $i$ -оболонці (підоболонці) та перевищення  $\varepsilon$ . Однак, така модель справедлива лише при великих перевищеннях  $\varepsilon \gg 1$  (як правило, достатньо  $\varepsilon > 4$  [12]). Тому для використання формули Бете при проміжних та, особливо, біляпорогових енергіях налітаючого електрона до формули вводять коригуючі функції, що забезпечують узгодження розрахунків з відомими експериментальними значеннями ІП в області  $\varepsilon < 4$ , зберігаючи Бете-асимптотику при  $\varepsilon \gg 1$ . Така напівемпірична модифікація формули Бете для К-оболонки успішно реалізована в ряду робіт, зокрема, [13-15]. Щодо  $L_{1-}$ ,  $L_{2-}$  та  $L_{2-}$  підоболонок, то нами було запропоновано метод визначення корекцій до напівемпіричної формули Бете [13], який базується на експериментальному визначенні відносних ІП  $\sigma(L_2)/\sigma(L_1)$  та  $\sigma(L_3)/\sigma(L_1)$  (де  $\sigma(L_1)$ ,  $\sigma(L_2)$ ,  $\sigma(L_3)$  – ІП  $L_{1-}$ ,  $L_{2-}$ ,  $L_{3-}$  підоболонок відповідно) за відносними інтенсивностями  $L\beta_1$ ,  $L\beta_{2,15}$  та  $L\beta_3$ -ліній рентгенівського емісійного  $L\beta$ -спектру [16]. Застосування такого підходу для атомів W дозволило визначити коригуючі параметри в напівемпіричній формулі Бете, використання яких забезпечує коректне обчислення ІП  $L_{1-}$ ,  $L_{2-}$  та  $L_{2-}$  підоболонок в області проміжних та біляпорогових енергій бомбардуючих електронів  $1 < \varepsilon < 4$ . Наступним

кроком виглядає доцільним подальше застосування такого рентгеноспектрального методу для дослідження ІП  $M_i$ -підоболонок важких елементів  $Z > 80$ , які експериментально фактично не визначалися. Тому в представленій роботі досліджено особливості іонізації  $M_i$ -підоболонок атомів Pb при електронному ударі в широкому діапазоні енергій бомбардуючих електронів  $E_0=5-30$  кеВ за відносною інтенсивністю ліній рентгенівського емісійного  $M\alpha$ -спектру.

### Методика експерименту

Рентгенівські емісійні  $M\alpha$ -спектри Pb при електронному збудженні у діапазоні прискорюючих напруг  $U=5-30$  кВ було отримано на модернізованому приладі EMMA-2 за допомогою брегівського спектрометра з вигнутим за Іоганом монокристалом кварцу (1011) в першому порядку відбивання. Спектри реєструвалися у режимі щокрокового сканування ( $\Delta E=0,1-0,5$  еВ) з часом накопичення у точці 1-50 с, залежно від прискорюючої напруги та спектральної ділянки. При обробці спектрів вводилися корекції, які враховували кутову залежність коефіцієнта відбивання кристала-аналізатора та дисперсію спектрометра при переході від шкали кутів до шкали енергій. При інтерпретації результатів, отриманих за умов електронного бомбардування товстої мішені Pb, враховувалося зменшення енергії електронів пучка при заглибленні у речовину зразка шляхом використання ефективної енергії електронів  $E_{eff}$ , яка є моноенергетичним еквівалентом іонізуючої дії електронів пучка у процесі зменшення їх енергії від  $E_0=eU$  ( $e$ -заряд електрона) до  $E_i$  [17]. Необхідно відзначити, що при одній і тій же енергії  $E_0$  в силу відмінності потенціалів іонізації  $M_i$ -підоболонок ( $E(M_1)=3,851$  кеВ,  $E(M_2)=3,554$  кеВ,  $E(M_3)=3,066$  кеВ,  $E(M_4)=2,586$  кеВ,  $E(M_5)=2,484$  кеВ [18]) значення ефективної енергії для кожної з  $M_i$ -підоболонок  $E_{eff}(M_i)$  дещо відрізняються одне від одного, особливо при наближенні до порогу.

### Обговорення результатів

Інтенсивність рентгенівських емісійних  $M\alpha$ -ліній безпосередньо визначається перерізами іонізації  $M_i$ -підоболонок. Зокрема, відносна інтенсивність  $M\alpha_{1,2}$ -дублету, який випромінюється при радіаційних переходах  $M_1-N_{6,7}$ , дорівнює



$$I(M\alpha_{1,2}) = \sigma_5 \frac{\Gamma_{\alpha}^R}{\Gamma_{M_5}} \quad (1)$$

де  $\sigma_5$  – переріз іонізації  $M_5$ -підоболонки,  $\Gamma_{\alpha}^R$  – парціальна ширина  $M_5$ -рівня, що відповідає радіаційному переходу  $M_5-N_{6,7}$ ,  $\Gamma_{M_5}$  – повна ширина  $M_5$ -рівня. Однак у випадку, якщо енергія електрона, що налітає, достатня для іонізації більш глибоких  $M_5$ -підоболонки, створення  $M_5$ -вакансії може відбуватися і внаслідок процесів двократної іонізації, пов'язаних з переходами Костера-Кроніга (КК) типу  $M_5-M_5N$  і  $M_5-M_5X$  ( $X=O,P$ ). Оскільки результатом КК-переходів та їхніх каскадів є стани з однієї чи декількома

додатковими вакансіями в  $N,O,P$ -оболонках, то радіаційний розпад  $M_5$ -вакансії у присутності  $N,O,P$ -вакансій призводить до випромінювання сателітних ліній, що формують разом з відповідною діаграмною лінією повний, досить складний спектральний  $M\alpha$ -контур. В недавніх роботах [19,20] ми запропонували модель  $M$ -емісії, яка враховує основні канали генерації та міграції вакансій в  $M_5$ -підоболонках і дозволяє обчислювати відносну інтенсивність  $M\alpha_{1,2}$ -ліній разом з  $M_5X$ -сателітами, що за енергетичним положенням накладаються на  $M\alpha_{1,2}$ -ліній –  $I(M\alpha_{1,2}+M_5X)$ , та відносну інтенсивність  $M_5N$ -сателітів, які експериментально відокремлюються від групи ліній  $M\alpha_{1,2}$  та  $M_5X$  –  $I(M_5N)$ . Такі відносні інтенсивності дорівнюють:

$$I(M\alpha_{1,2} + M_5X) = \frac{\Gamma_{\alpha}^R}{\Gamma_{M_5}} \left\{ \sigma_5 (1 + P_{M_5}^{(X)}) + \sum_{i=1}^4 \sigma_i G_{M_i} \right\} \quad (2)$$

$$I(M_5N) = \frac{a\Gamma_{\alpha}^R}{\Gamma_{M_5} + \Gamma_{N_{6,7}}} \left\{ \sigma_5 P_{M_5}^{(N)} + \sum_{i=1}^4 \sigma_i F_{M_i} \right\} \quad (3)$$

де  $\sigma_i$  – переріз іонізації  $M_i$ -підоболонки електронним ударом,  $P_{M_5}^{(X)}$ ,  $P_{M_5}^{(N)}$  – імовірності викиду електрона відповідно з  $O$ ,  $P$ - та  $N$ -оболонки при утворенні вакансії у  $M_5$ -підоболонці в результаті процесу shake-off (SO),  $G_{M_i}$ ,  $F_{M_i}$  – коефіцієнти міграції вакансій між  $M_i$ -підоболонками за рахунок усіх можливих радіаційних та КК-переходів, а також SO-процесів двократної іонізації [20]. Коректність цієї моделі була експериментально доведена при дослідженні відношення інтенсивностей  $\eta = I(M_5N)/I(M\alpha_{1,2}+M_5X)$  за умов фотонного збудження  $M\alpha$ -спектру  $Au$  характеристичним  $K\alpha_{1,2}$  та  $K\beta_{1,3}$  випромінюванням  $Cu$  та  $St$ . Експериментально відношення інтенсивностей  $\eta$  визначалося в роботах [19,20] як відношення площин фігур, що обмежуються контурами груп  $(M\alpha_{1,2}+M_5X)$ -ліній та  $M_5N$ -сателітів. При розділенні складного  $M\alpha$ -контур на компоненти використовувалася апроксимація окремих ліній псевдофункціями Фойгта. В цей же спосіб відношення інтенсивностей  $\eta$  визначалося і в представленій роботі. Відносна похибка визначення величини  $\eta$  не перевищувала (3–5)%.

Як видно з наведених формул, відносна інтенсивність кожної з груп ліній, що можуть бути експериментально відокремленими одна від одної, залежить від ІП усіх п'яти  $M_i$ -підоболонки. Цей факт, на жаль, унеможливує

безпосереднє експериментальне визначення відносних перерізів  $\sigma_5/\sigma_1$ ,  $\sigma_4/\sigma_1$  тощо, як це було виконано для  $L_1$ -,  $L_2$ - та  $L_3$ -підоболонки  $W$  в нашій роботі [16]. В той же час, експериментальне визначення відношення  $\eta$  при різних енергіях бомбардуючих електронів дозволяє опосередковано з'ясувати, яка з моделей обрахування ІП  $M_i$ -підоболонки найкраще узгоджується з експериментом, а також визначити коригуючі коефіцієнти в напівемпіричній формулі Бете [13]. Для цього необхідно обчислити величини  $\sigma_i(E_0)$  за різними наближеннями, розрахувати з їх використанням залежності  $\eta(E_0)$  та визначити, за якою з моделей визначення ІП  $\sigma_i$  досягається найкраще узгодження відношення інтенсивностей  $\eta$  з експериментом. В свою чергу, варіювання коригуючих параметрів у напівемпіричній формулі Бете [13], при якому б мінімізувалася розбіжність між обчисленими та експериментальними значеннями відношення  $\eta(E_0)$ , дозволяє визначити ці величини для випадку іонізації  $M_i$ -підоболонки. Саме така задача і розв'язувалася у даній роботі.

Відношення інтенсивностей  $\eta$  обчислювалося з використанням формул (2) та (3), в яких  $\sigma_i$  розраховувалися в таких наближеннях:

1) плоскохвильове наближення – модифікована формула Бете [9]



$$\sigma_i = a_i n_i \left( \frac{1}{E_i^2 \varepsilon} \right) \ln \left[ \frac{4\varepsilon}{k_1 + k_2 \exp(1 - \varepsilon)} \right] \quad (4)$$

де  $a_i$  – параметр Бете,  $k_1 = 1,65$ ;  $k_2 = 2,35$ ;

2) класичне імпульсне наближення (формула Гризинські) [21]:

$$\sigma_i = n_i \left( \frac{\sigma_0}{E_i^2 \varepsilon} \right) \left[ \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \right]^{3/2} \left[ 1 + \frac{2}{3} \left[ 1 - \frac{1}{2\varepsilon} \right] \times \ln \left[ 2,7 + (\varepsilon - 1)^{1/2} \right] \right] \quad (5)$$

де  $\sigma_0 = 6,56 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$ ;

3) напівемпірична формула Бете [13]

$$\sigma_i = n_i \pi a_0^2 \left( \frac{Ry}{E_i} \right)^{C(\varepsilon)} \cdot D(\varepsilon) \quad (6)$$

де

$$D(\varepsilon) = \left( a + \frac{b}{\varepsilon} + \frac{c}{\varepsilon^2} \right) \frac{\ln(\varepsilon)}{\varepsilon}; \quad C(\varepsilon) = \left( d + \frac{e}{\varepsilon} + \frac{f}{\varepsilon^2} \right);$$

$a_0$  – перший борівський радіус,  $Ry = 13,61 \text{ еВ}$ .  
Константи  $a, b, c, d, e, f$  є параметрами, які встановлюються шляхом узгодження розрахованих значень ІП з відповідними експериментальними величинами. При обчисленнях для кожної прискорюючої напруги  $U$  використовувалися відповідні значення ефективних енергій  $E_{\text{eff}}(M_i)$ , а вже саме за ними розраховувалися перерізи  $\sigma_i$ . Обчислення ІП за формулою (6) виконувалися з коригуючими параметрами  $a, b, c, d, e, f$  як для К-оболонки [13], так і для L-оболонки [16]; значення таких параметрів наведено в табл. 1.

Таблиця 1

Корегуючі параметри в напівемпіричній формулі Бете (6)

| Оболонка        | $a$   | $b$    | $c$   | $d$   | $e$    | $f$   |
|-----------------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|
| K [12]          | 3,125 | -4,172 | 1,877 | 2,031 | -0,316 | 0,155 |
| L [16]          | 2,979 | -4,422 | 1,527 | 2,033 | -0,309 | 0,161 |
| M (дана робота) | 2,886 | -4,645 | 1,503 | 2,040 | -0,196 | 0,253 |

На рис. 1 представлено експериментальні значення відносної інтенсивності  $\eta$  та залежності величини  $\eta$  від енергії електронів пучка  $E_0$  при обчисленні ІП в наближеннях 1) – 3). Крива 1 відповідає значенням ІП в наближенні 1); 2 – в

наближенні 2); 3 – в наближенні 3) з корегуючими параметрами для К-оболонки; 4 – також в наближенні 3), але з корегуючими параметрами для L-оболонки.

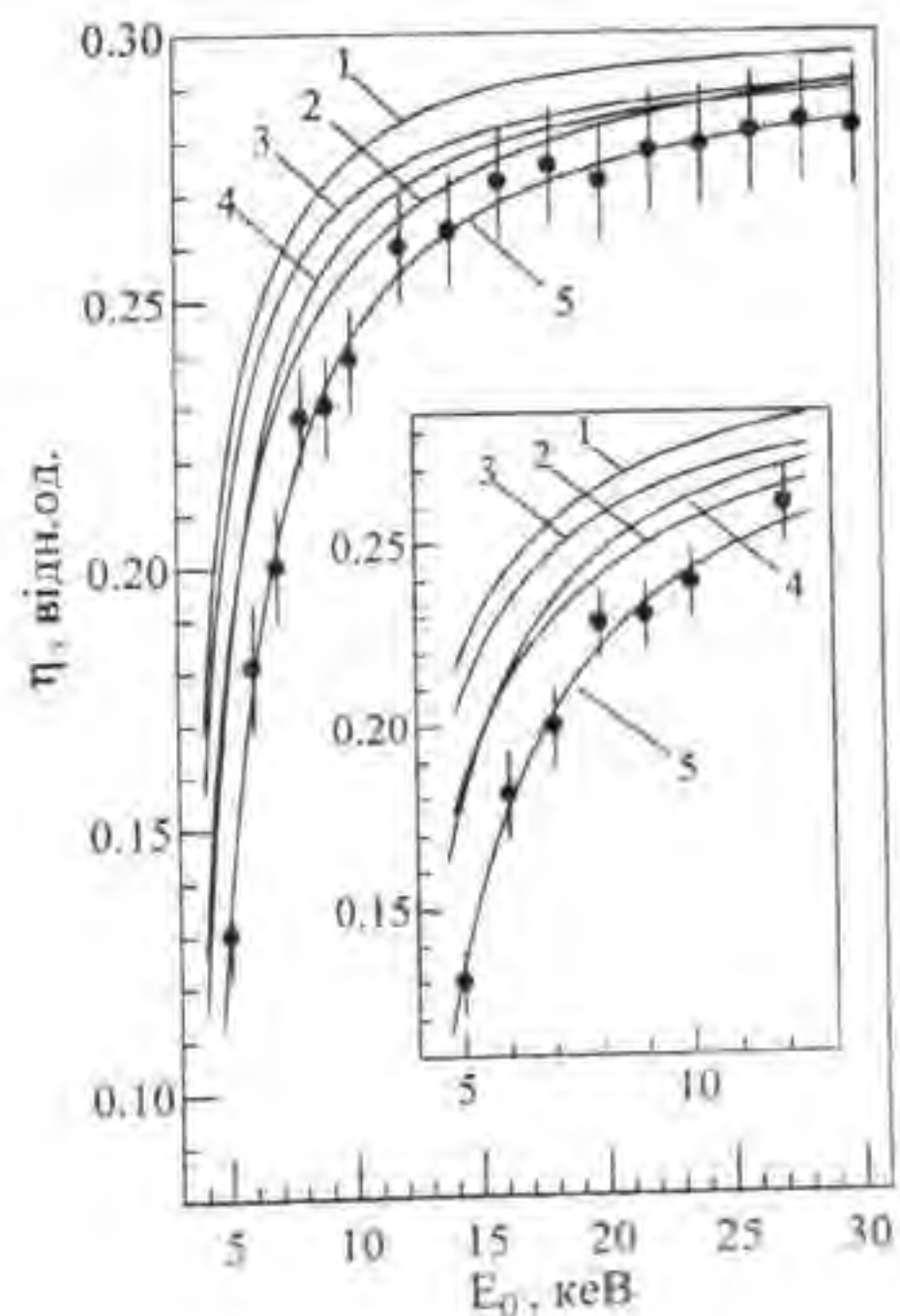


Рис.1 Відношення інтенсивностей  $\eta$  при різних енергіях налітаючих електронів

Як видно, в області енергій  $E_0 > 10 \text{ кеВ}$  ( $\varepsilon > 3-4$ ) розбіжність між експериментальними значеннями  $\eta$  та обчисленими в класичному імпульсному наближенні (5), а також за напівемпіричною формулою (6) з параметрами для К- і для L-оболонки практично не виходить за межі похибки експерименту. В той же час, в усій цій області перевищень  $\varepsilon$  розрахунки в плоскохвильовому наближенні за формулою (4) систематично перевищують експериментальні значення  $\eta$  на 7–15%. Значні відмінності між результатами обчислень за формулами (4)–(6) та експериментом виявляються в біляпороговій області  $\varepsilon < (3-4)$ . Зокрема, при  $E_0 = 5-7 \text{ кеВ}$



значення  $\eta$ , розраховані в плоскохвильовому наближенні (4) та за формулою (6) з корегуючими параметрами для К-оболонки стають близькими, але відрізняються від експериментальних значень на 25–65 %. Щодо класичного імпульсного наближення, то в цій області енергій величини  $\eta$ , розраховані за формулою (5), дещо краще відповідають експериментальним значенням, але все ж перевищують їх на 15–40%. При цьому результати обчислення за формулою (6) з коригуючими параметрами для L-оболонки практично співпадають з розрахунками (5). Отже, в біляпороговій області енергій  $E_0=5-7$  кеВ жодна з моделей 1) – 3) (остання – з коригуючими параметрами для К- та L-оболонки) не забезпечує достатньої точності обчислення ІІІ М<sub>L</sub>-подоболонок. Виходячи з цього, було виконано варіювання параметрів  $a, b, c, d, e$ , при якому забезпечувався мінімум суми квадратів нев'язок

$$\sum_i^N [\eta_{exp}(E_{0i}) - \eta_{calc}(E_{0i})]^2 = \min \quad (7)$$

де  $E_{0i}$  – значення енергій, при яких експериментально визначалося відношення інтенсивностей  $\eta$ . Кількість експериментальних точок  $N=16$ . Мінімізація виконувалася методом градієнтного спуску [22]. Отримані значення коригуючих параметрів наведено в табл.1 (останній рядок). З їх використанням також розраховувалося відношення  $\eta$  (крива 5). Зрозуміло, що в цьому випадку досягається краще узгодження залежності  $\eta(E_0)$  з експериментом, а ніж в усіх попередніх. Звертає на себе увагу та обставина, що при варіюванні параметрів величини  $a, b, c, d$  змінюються мало у порівнянні з їх значеннями для L-оболонки, тоді як величини  $e, f$ , що визначають функцію  $C(\epsilon)$ , зазнають значних змін. В подальшому ця особливість може спростувати процедуру варіювання, обмежуючи її підбором саме параметрів  $e, f$ .

Таким чином, експериментально з'ясовано, що в діапазоні енергій налітаючих електронів  $E_0=5-30$  кеВ плоскохвильове наближення не забезпечує задовільного опису процесу іонізації М<sub>L</sub>-подоболонок атомів Pb. В той же час, в області енергій  $E_0>10$  кеВ використання класичного імпульсного наближення (формула Гризинські) та напівемпіричної формули Бете з корегуючими параметрами для К-та L-оболонки дозволяє обчислювати ІІІ М<sub>L</sub>-подоболонок з достатньою точністю. В біляпороговій області енергій  $E_0=5-7$  кеВ жодна

з наведених моделей не є коректною, хоча розрахунки в класичному імпульсному наближенні дають результати дещо ближчі до експериментальних значень відношень інтенсивностей  $\eta$ , а ніж усі інші. Визначено значення коригуючих параметрів у напівемпіричній формулі Бете, за яких забезпечується найкраща збіжність розрахованих та експериментальних значень відношення інтенсивностей М<sub>5</sub>N-сателітів до інтенсивності групи М $\alpha_{1,2}$ - та М<sub>5</sub>X-ліній атомів Pb.

### Список використаних джерел

1. Shah M.B., Elliott D.S., Gilbody H. B. Pulsed crossed-beam study of the ionisation of atomic hydrogen by electron impact // J. Phys. B. – 1987. – B20. – P.3501-3514.
2. Ishii K., Kamiya M., Sera K., Morita S., Tawara H., Oyamada M., ets. Inner-shell ionization by ultrarelativistic electrons // Phys. Rev. A. – 1977. – B15. – P.906-913.
3. Platten H., Schiwietz G., Nolte G. Cross sections for K-shell ionization of Si and Ar by 4 keV to 10 keV electron impact // Phys. Lett. A – 1983. – 107, №2. – P.83-86.
4. Tang C., An Z., Luo Z. Measurements of germanium K-shell ionization cross sections and tin L-shell x-ray production cross sections by electron impact // J. Appl. Phys. – 2002. – 91, – P.6739-6743.
5. Carvalho M. L., Ferreira J. G., Salgueiro L. L-subshell-ionization cross sections of tungsten by electron impact near the threshold region // Phys. Rev. A. – 1988. – 37. – P.106-110.
6. Campos C. S., Vasconcellos M. A., Llovet X., Salvat F. Measurements of L-shell x-ray production cross sections of W, Pt, and Au by 10–30-keV electrons // Phys. Rev. A. – 2002. – 66. – P.012719 (9).
7. Pindzola M. S., Mitnik D. M., Colgan J., Griffin D. C. Electron-impact ionization of Li<sup>+</sup> // Phys. Rev. A. – 2000. – 61, N5. – 052712(5).
8. Bethe H. Theory of the Passage of Fast Corpuscular Rays Through Matter // Ann. Phys. (NY). – 1930 – 5. – P. 325 – 336.
9. Worthington C.R., Tomlin S.G. The Intensity of Emission of Characteristic X-Radiation – Proc. Phys. Soc. London, Ser. A, 69, 401 (1956).
10. Kim Y.-H., Stone P.M. Ionization of boron, aluminum, gallium, and indium by electron impact // Phys. Rev. A. – 2001. – 64. – P. 052707(11).
11. Khare S.P., Wadera J.M K-shell ionization of atoms by electron impact // Phys. Lett. A. – 1995. – 198, N3. – P.212 – 216.



12. McGuire E.J. Scaled electron ionization cross sections in the Born approximation // Phys. Rev. A. – 1977. – **16**, N1. – P. 73 – 79.
13. Hombourger C. An empirical expression for K-shell ionization cross section by electron impact // J. Phys. B. – 1998. – **31**. – P. 3693 – 3702.
14. Bernshtam V.A., Ralchenko Yu.V., Maron Y. Empirical formula for cross section of direct electron-impact ionization of ions // J. Phys. B. – 2000. – **33**. – P. 5025 – 5032.
15. Haque A.K.F., Uddin M.A., Basak A.K. Empirical model for the electron-impact K-shell-ionization cross sections // Phys. Rev. A. – 2006. – **73**. – P. 012708(7).
16. Borovoy M.O., Ischenko R.M., Shyyanovskyi V.I. Integral cross sections of ionization of L-subshells of tungsten atoms under electron bombardment near energetic threshold // Ukr. Journ. Phys. – 2004. – **V. 49**, № 1. – P. 21–25.
17. Шияновский В.И. Встряска и прямые соударения в атомах при фотоионизации,  $\beta^-$ -распаде и ионизации электронным ударом // ЖЭТФ. – 1989. – **Т. 95**, вып. 2. – С. 467 – 474.
18. Блохин М.А., Швейцер И.Г. Рентгеноспектральный справочник. – М.: Наука. 1982.
19. Borovoy M.O., Ischenko R.M., Shiyanyovskiy V.I.  $M\alpha$  X-ray emission spectrum of multi-ionized Au atoms // Functional Materials. – 2006. – **V. 13**, № 1. – P. 150–153.
20. Боровий М.О., Іщенко Р.М., Степаніщев М.Б. Рентгенівські емісійні  $M\alpha$ - та  $M\beta$ - спектри кратноіонізованих атомів Au. // Вісник Київського університету. – Серія фіз.-мат. науки. – 2006. – № 2. – С. 361–369.
21. Gryzinski M. Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions // Phys. Rev. A. – 1965. – **138**. – P. 336–345.
22. Сухарев А.Г., Тимохов А.В., Федоров В.В. Курс методов оптимизации. – М.: Наука. 1982

Надійшла до редколегії 26.03.07



УДК 532.536.537

Булавін Л.А., академік НАН України,  
Соколовський Б.І., канд. фіз-мат. наук,  
Склярчук В.М., канд. фіз-мат. наук,  
Плевачук Ю.О., канд. фіз-мат. наук

### Перехід до металевої провідності в розплавах на основі селену

Температурна залежність електропровідності та термо-е.р.с. потрійних розплавів  $\text{CuTlSe}_2$ ,  $\text{CuAsSe}_2$ , і  $\text{TlAsSe}_2$  досліджена в інтервалі до 1800 К під високим тиском аргону (до 50 МПа). Поведінка електропровідності вказує на перехід напівпровідник-метал у досліджених системах. Інтерпретація високотемпературного переходу напівпровідник-метал проведена в рамках розробленого механізму трансформації енергетичного спектру рідких напівпровідників. Вказаний механізм передбачає існування енергетичного інтервалу, в якому відбуваються процеси перенесення заряду.

Ключові слова: перехід напівпровідник – метал, термо-е.р.с., електропровідність, псевдощілина, енергетичний спектр.

\*E-mail: sklyarchuk@ukr.net

Відомі дослідження [1-3] проведені для подвійних рідких напівпровідників виявили цілий ряд невідповідностей експерименту з відомими модельними уявленнями. Зокрема, температура металізації ( $T^S$ ), визначена за залежністю термо-е.р.с.  $S(T)$ , завжди нижча від температури металізації ( $T^0$ ), визначеної за залежністю електропровідності  $\sigma(T)$ ; енергія активації  $E^0(0)$  не співпадає з  $E^S(0)$ ; при певній температурі може спостерігатися різке зростання енергії активації від  $E^0(0)_1$  до  $E^0(0)_2$  при незмінній  $E^S(0)$ ; в області переходу, як правило, виконується співвідношення  $E^0(0) > E^S(0)$ .

Виходячи з цього, є сенс розширити коло рідких напівпровідників з метою вивчення закономірностей їхньої металізації. Вибрані термодинамічно однорідні розплави, які раніше в широкому температурному інтервалі не вивчалися, а саме  $\text{CuTlSe}_2$ ,  $\text{CuAsSe}_2$  і  $\text{TlAsSe}_2$ .

### Особливості експерименту

Для збереження постійного хімічного складу зразків і запобігання випаровуванню летких

Bulavin L.A., academician of NANU  
Sokolovskii B.I., Ph.D.  
Sklyarchuk V.M., Ph.D.  
Plevachuk Yu.O., Ph.D.

### Transition to metal conductivity in Se-based melts

Temperature dependence of electroconductivity and thermoelectric power were studied for ternary  $\text{CuTlSe}_2$ ,  $\text{CuAsSe}_2$ , and  $\text{TlAsSe}_2$  liquid alloys in a wide temperature range (up to 1800 K) under ambient pressures of argon gas (up to 50 MPa). The electrical conductivity behavior points to a fact of the semiconductor-metal transition in the systems. The semiconductor-metal high-temperature transition is interpreted in the frame of developed transformation mechanism of the energy spectrum in liquid semiconductors. The mechanism suggests an existence of the energy interval of charge transfer processes.

Key Words: Semiconductor-metal transition, electrical conductivity, thermoelectric power, pseudogap, energy spectrum.

компонентів, вимірювання проводились в умовах високого тиску аргону (до 500 атм), контактним методом, за чотириточковою схемою. Вимірювальна установка і процедура вимірювань докладно описані в [4]. Загальна похибка вимірів електропровідності не перевищувала 1,5%, а термо-е.р.с. – 5%.

### Експериментальні результати

На рис.1, 2, приведені усереднені результати вимірювань електропровідності та термо-е.р.с. розплавів  $\text{CuTlSe}_2$ ,  $\text{CuAsSe}_2$  і  $\text{TlAsSe}_2$ . Наші результати для всіх розплавів добре узгоджуються з даними [5,6] отриманими до 1000 К. Як видно з рисунків, для кривих всіх складів мають місце загальні закономірності. До деякого, характерного для кожного сплаву значення температури,  $\sigma(T)$  описується експоненціальною залежністю, характерною для власної провідності напівпровідників. При підвищенні температури  $\sigma(T)$  поступово насичується. Характерною особливістю розплавів є наявність зломів на кривих  $\log \sigma = f(T^1)$ , які відображають збільшення енергії



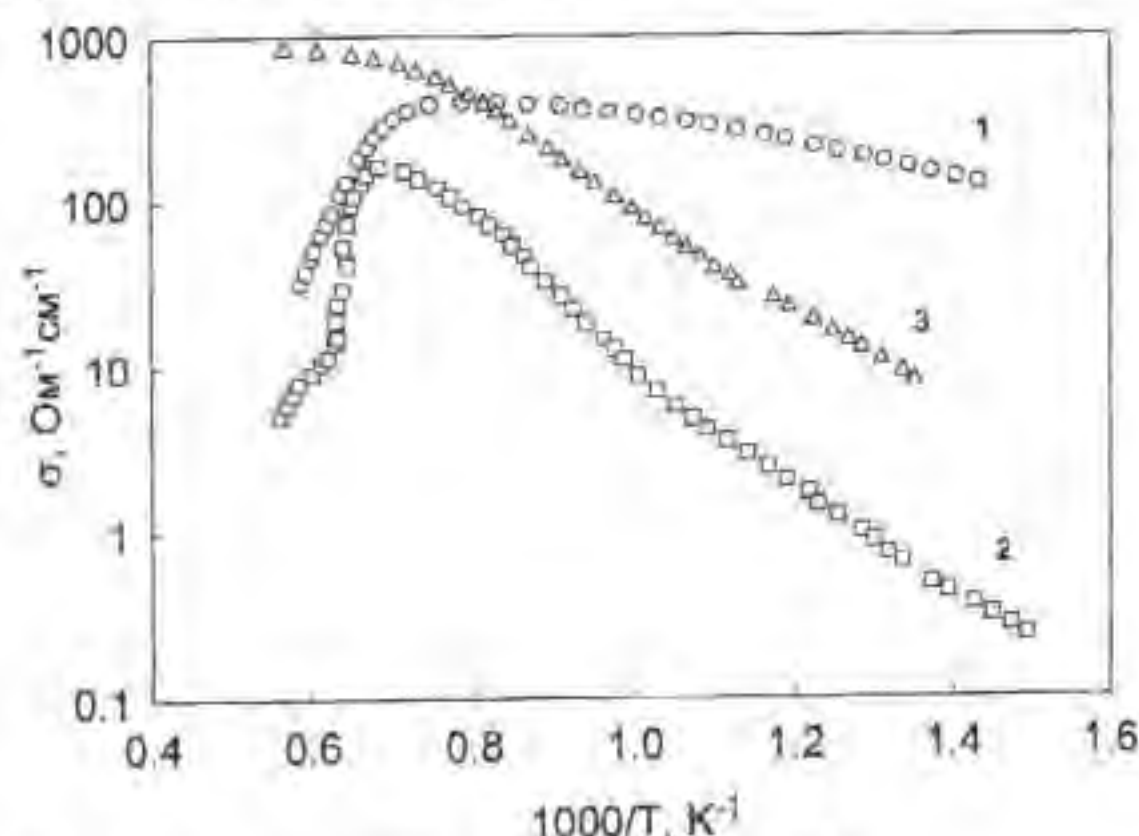


Рис. 1 Електропровідність розплавів  
CuTlSe₂ (1), TlAsTe₂ (2), CuAsTe₂ (3)

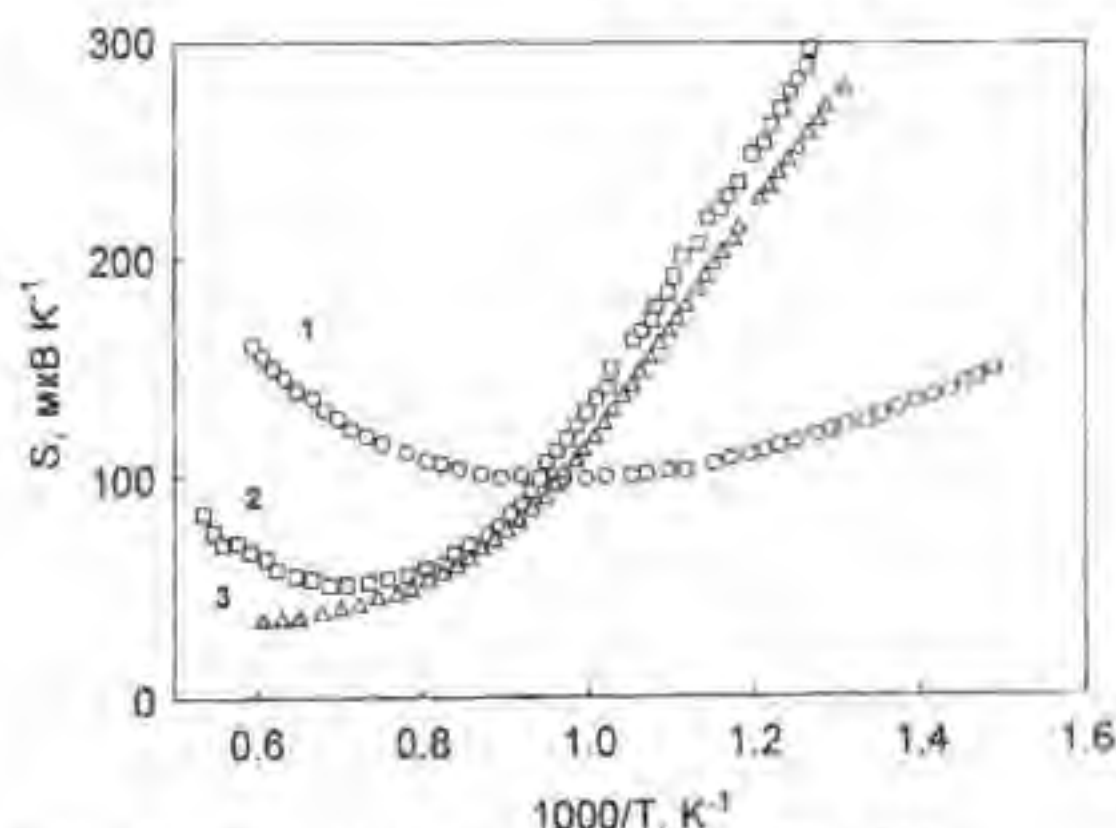


Рис. 2 Термо-е.р.с. розплавів CuTlSe₂ (1),  
TlAsTe₂ (2), CuAsTe₂ (3)

активації провідності від  $E^{\sigma}(0)_1$  до  $E^{\sigma}(0)_2$  при постійній  $E^{\sigma}(0)$ .

Звертає на себе увагу той факт, що при високих температурах електропровідність всіх трьох розплавів досягає і навіть перевищує значення мінімальної металевої провідності 150-350 Ом<sup>-1</sup>см<sup>-1</sup>, передбачене Моттом [7]. З рис. 1 видно, що при цих значеннях  $\sigma$  має місце зменшення енергії активації провідності. Так для TlAsSe₂ вказаний ефект спостерігається при  $T_{S-m}^{\sigma} = 1250$  К, для CuAsSe₂ - при 1260 К, для CuTlSe₂ - при 850 К. Зменшення енергії активації провідності можна пояснити зникненням локальних станів у псевдощільності і ліквідацією механізму термоактивації носіїв струму через псевдощільність. Подальше зростання  $\sigma$  до насичення вище вказаних температур зумовлене, очевидно, збільшенням з ростом температури, густини електронних станів на рівні Фермі. Таким чином, відмічені  $T_{S-m}^{\sigma}$  згідно з [7], слід вважати температурами металізації відповідних розплавів. Є інтерес перевірити міркування відносно переходу в металевий стан виходячи з даних по термо-е.р.с. Для рідких напівпровідників термо-е.р.с. можна описати формулою:

$$S(T) = -\frac{k}{e} \left( \frac{E_c - E_v}{2kT} + A \right) \quad (1)$$

в якій параметр розсіювання  $A=1$ . Значить, при зникненні псевдощільності, коли  $E_c - E_v \sim 2kT$ ,  $S=86$  мкВ/К. Власне ця величина і є критерієм переходу напівпровідник-метал по термо-е.р.с. Як видно з рис. 2, для TlAsSe₂  $T_{S-m}^{\sigma}$  рівне 1065 К, і 1115 К відповідно для CuAsSe₂. Для CuTlSe₂  $T_{S-m}^{\sigma}$  не визначається, тому що термо-е.р.с. проявляє металевий характер поведінки вже при температурі плавлення, незважаючи на те, що

провідність у певному інтервалі рідкого стану характеризує розплав як напівпровідниковий.

### Обговорення результатів

Виходячи з даних роботи [7], трансформацію енергетичного спектру рідких напівпровідників може відбуватись при лінійному зменшенні ширини псевдощільності з ростом температури і відповідає виразу:

$$E_c - E_v = \Delta E_0 - 2\gamma T, \quad (2)$$

де  $\Delta E_0$  - екстрапольоване до 0 К значення ширини псевдощільності (суть енергії активації);  $2\gamma$  - температурний коефіцієнт замивання псевдощільності.

Виходячи зі сказаного, відомі формули для опису  $\sigma(T)$  і  $S(T)$  при дірковій провідності набувають вигляду:

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left( -\frac{E(0) - \gamma T}{kT} \right), \quad (3)$$

$$S = -\frac{k}{e} \left( -\frac{E(0) - \gamma T}{kT} \right) \quad (4)$$

Енергії активації  $E(0)$ , визначені з нахилу кривих  $\log \sigma = f(T^{-1})$  і  $S = f(T^{-1})$ , не є півшириною забороненої зони, а виступають в ролі своєрідної псевдощільності. Потрібно зауважити, що формули (3) і (4) мають місце до температури переходу, вище якої всі стани на рівні Фермі є делокалізовані.

З аналізу (4) випливає, що лінійне зменшення з ростом температури півширини псевдощільності визначає лінійну залежність  $S = f(T^{-1})$ . З рис. 2 видно, що експериментальні криві відповідають рівнянню (4) за виключенням CuTlSe₂, де поведінка  $S(T)$  металічна, але зберігаються



великі абсолютні значення  $S$ . З ростом температури при  $S > k/e$  (тобто псевдощілина зберігається, але її ширина дуже мала) спостерігається відхилення  $S(T^{-1})$  від лінійної залежності. Очевидно, це зумовлено некоректністю формули (4) в цій області. У цьому випадку для розрахунку температури повного зникнення псевдощілини з  $S = f(T^{-1})$  більш коректно було б вибрати не рівність  $S \approx 86$  мкВ/К, а визначити температуру, при якій пряма, екстрапольована з експериментальної лінійної залежності  $S$  досягає значення 86 мкВ/К. До температури переходу напівпровідник-металл  $\sigma(T)$  відповідає виразу (3), який, як і (4), непридатний при  $E_F - E_v \sim kT$ . Але згідно з [7], параметри псевдощілини  $E(0)$  і  $\gamma$ , які входять в (3) і (4), при даній температурі, повинні бути однаковими, то в області температур, де спостерігається відхилення від лінійної  $S(T^{-1})$ , слід очікувати аномалії на кривих  $\log \sigma = f(T^{-1})$ .

Однак, отримані нами комплексні експериментальні дані з  $\sigma(T)$  і  $S(T)$  цього не підтверджують. Енергія активації провідності  $E^{\sigma}(0)$  продовжує залишатись незмінною при переході через температуру, вище якої  $E^S(0)$  різко падає. Крім того,  $E^{\sigma}(0)$  і  $E^S(0)$ , визначені з лінійних ділянок відповідних залежностей, не співпадають. При високих температурах, поблизу переходу  $E^{\sigma}(0)$  більше від  $E^S(0)$ , а при нижчих температурах  $E^S(0)$  може перевищувати  $E^{\sigma}(0)$ . Не вияснена природа зломів на залежності  $\log \sigma = f(T^{-1})$ , яка немає аналогів на залежності  $S = f(T^{-1})$ . Слід підкреслити, що приведені вище невідповідності мають місце для сплавів Se-Te [1],  $\text{As}_2\text{Te}_3$ [8],  $\text{As}_2\text{Se}_3$ [8] та Se[2].

Для інтерпретації отриманих даних ми скористалися моделлю [9], яка базується на висновках теорії протікання. Вводяться два характерні енергетичні рівні:  $E_v^{\sigma}$  - відповідає порогу рухливості і  $E_v^S$  - формально названий поріг по густині станів.  $E_v^S$  зміщений по відношенню до  $E_v^{\sigma}$  в сторону рівня Фермі, звідки випливає, що псевдощілина по рухливості, яка визначає активаційний характер провідності, завжди більша від псевдощілини по густині, що відповідає термо-е.р.с. Передбачається, що  $E_F - E_v^{\sigma}$  як і  $E_F - E_v^S$  є лінійними функціями температури:

$$E_F - E_v^{\sigma} = E^{\sigma}(0) - \gamma^{\sigma}T; \quad E_F - E_v^S = E^S(0) - \gamma^S T, \quad (5)$$

де  $E^{\sigma}(0)$  і  $E^S(0)$  - екстрапольовані до 0 К значення віддалей відповідних порогів до  $E_F$ ,  $\gamma^{\sigma}$ ,  $\gamma^S$  -

коефіцієнти, що визначають швидкість дрейфу  $E_v^{\sigma}$  і  $E_v^S$ , відповідно, в напрямку до  $E_F$ . Для більш коректного визначення ширини відповідних псевдощілин враховується теплове розмиття ( $\sim kT$ ), тобто  $\gamma^{\sigma}_0$  і  $\gamma^S_0$  замінюються відповідними виразами  $\gamma^{\sigma} = \gamma^{\sigma}_0 + k$  і  $\gamma^S = \gamma^S_0 + k$ . У цьому випадку вирази (3) і (4) перетворюються до вигляду:

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left( 1 - \frac{E^{\sigma}(0) - \gamma^{\sigma}_0 T}{kT} \right), \quad (6)$$

$$S = -\frac{k}{e} \left( 1 - \frac{E^S(0) - \gamma^S_0 T}{kT} \right). \quad (7)$$

Отже, перехід напівпровідник-метал рівнозначний умовам  $E_F - E_v^{\sigma} \sim kT$  і  $E_F - E_v^S \sim kT$ . Припущення про наявність двох дозволених енергетичних рівнів, які зміщені один відносно іншого, дозволяють якісну інтерпретацію отриманих результатів.

#### Список використаних джерел

1. Cutler M. Liquid Semiconductors. -New York: Academic Press, 1977.
2. Perron Y.C. Adv. Phys. - 1967. -16, №64. -P. 657-666.
3. Ninomiya Y., Nakamura Y., Shimoji M. // J.Non.-Cryst. Sol. -1975. -17, №2. -P.231-240.
4. Sokolovskii B., Sklyarchuk V., Didoukh V., Plevachuk Yu. // High Temp. Mater. Sci. -1995. -34. -P.275-284.
5. Satow T., Hoshino K., Uemura O. // J. Non.-Cryst. Sol. -1983. -57. -P.91-100.
6. Nakamura Y. // Suppl. of the Progr. of Theor. Phys. -1982. -72. -P.124-139.
7. Mott F., Davis E. Electron processes in non-crystalline materials -Oxford: Clarendon Press, 1979.
8. Андреев А.А., Лебедев Э.А., Шмуратов Е.А. и др. // ФТТ. - 1973. - 15, №9. - С.3456-3457.
9. Bandrovskaya I., Prokhorenko V., Romanov V., Sokolovskii B. // Phys.stat.sol.(b).-1981. -107.-K95.

Надійшла до редколегії 19.03.07



УДК 537.228.1

Бурлій П.В., Козаченко В.В.<sup>\*</sup>, Коробкіна О.О.,  
Кучеров І.Я., Ільїн П.П.

# Вплив акустoeлектронної взаємодії на розповсюдження поперечних акустичних хвиль в пластинах

В роботі досліджується вплив акустoeлектронної взаємодії на швидкість розповсюдження поперечних акустичних хвиль в пластинах кристалу  $C_{6V}$ . Показано, що в області низьких частот і при малих товщинах пластин він набагато більший ніж для об'ємних хвиль.

Ключові слова: акустoeлектронна взаємодія, п'єзонапівпровідник, ультразвук.

<sup>\*</sup>E-mail: victorc@univ.kiev.ua

Акустoeлектронна взаємодія в п'єзонапівпровідниках призводить до впливу на загасання (підсилення) ультразвукових (УЗ) хвиль, так і на їх розповсюдження (на швидкість поширення). Це питання добре вивчено для об'ємних УЗ хвиль [1]. Для УЗ хвиль інших типів: поверхневих, в пластинах, в шаруватих структурах, детально вивчено тільки вплив на загасання (підсилення) [2-4]. Вплив акустoeлектронної взаємодії на швидкість поширення цих УЗ хвиль зовсім не досліджено. Однак це питання заслуговує на увагу оскільки з ним пов'язана можливість створення керованих акустoeлектронних елементів, робота яких пов'язана зі зміною швидкості розповсюдження, особливо це суттєво, коли хвилі мають значну дисперсію швидкості розповсюдження. Такими УЗ хвилями є хвилі в пластинах [5]. Тому в даній роботі розглядається вплив акустoeлектронної взаємодії на розповсюдження УЗ хвиль в пластинах п'єзонапівпровідників.

Розглядаються нормальні поперечні хвилі в пластині п'єзонапівпровідникового кристалу класу  $6mm$ . Геометрія задачі показана на рис.1. Пластина товщиною  $2d$  і провідністю  $\sigma$ . В ній утворено дрейф носіїв заряду зі швидкістю  $V_d$  постійним електричним полем  $E_x$ . Нормальні поперечні УЗ хвилі з пружними зміщеннями вздовж осі  $Z$  розповсюджуються вздовж осі  $X$ . З такою поляризацією вони п'єзоактивні. Дисперсійні рівняння цих хвиль мають вигляд [3]:

P.V.Burliy, V.V.Kozachenko<sup>\*</sup>, O.O.Korobkina,  
I.Ya.Kucherov, P.P. Ilyin

# The influence of acoustoelectronic interactions on a traverse acoustic waves propagation in plates.

In this work the acoustoelectronic interactions influence on a traverse acoustical waves propagation speed in plates of  $C_{6V}$  crystals is investigated. It is shown, that in the low frequencies and at small thickness of plates it is much more than for bulk waves.

Key Words: acoustoelectronic interaction, piezoelectric semiconductor, ultrasonic.

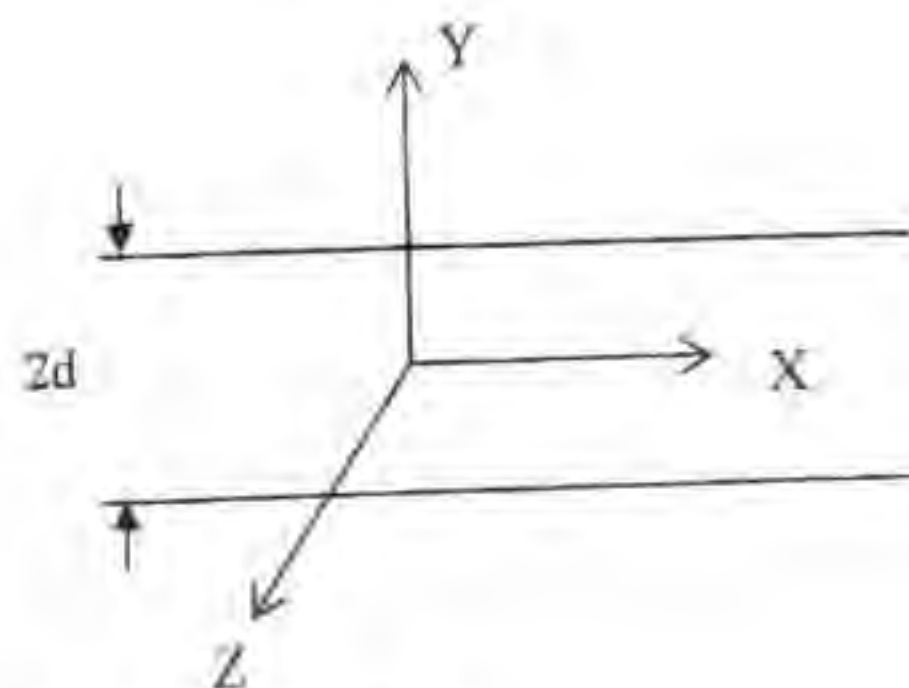


Рис. 1 Геометрія задачі

Антисиметричні хвилі:

$$\beta \left[ \frac{\epsilon}{\epsilon_0} + i h(kd) \right] \operatorname{ctg}(k\beta d) = \frac{\dot{K}^2}{1 + \dot{K}^2} \quad (1)$$

Симетричні хвилі:

$$\beta \left[ \frac{\epsilon}{\epsilon_0} + c \operatorname{th}(kd) \right] \operatorname{tg}(k\beta d) = -\frac{\dot{K}^2}{1 + \dot{K}^2} \quad (2)$$

$$\text{де } \dot{K}^2 = \frac{K^2}{1 - ig}, \quad K^2 = \frac{e_{13}^2}{\epsilon_{11} C_{44}}, \quad g = \frac{\omega_c}{\gamma \omega},$$

$$\omega_c = \frac{\sigma}{\epsilon_{11}}, \quad \gamma = 1 - \frac{V_d}{V}, \quad \epsilon = \epsilon_{11}(1 - ig),$$



$$\beta = \sqrt{\frac{(k_t/k)^2}{(1+K^2)}} - 1, \quad k_t = \frac{\omega \rho}{c_{44}};$$

$\omega$ ,  $V$  і  $k$  – частота, швидкість і хвильове число пружних хвиль;  $\rho$ ,  $\epsilon_{11}$ ,  $e_{13}$ ,  $c_{44}$  – густина, діелектрична проникливість, п'єзоелектрична і пружна сталі речовини пластини відповідно;  $\epsilon_0$  – діелектрична проникність вакууму.

Як видно, (1) і (2) є трансцендентними рівняннями, які в загальному вигляді не розв'язуються. А для знаходження впливу акустoeлектронної взаємодії на швидкість розповсюдження в аналітичному вигляді треба мати відповідний вигляд дисперсійного рівняння  $\omega(k)$ .

Тому здійснимо приблизний розв'язок цих рівнянь. Розглянемо це питання на прикладі антисиметричних хвиль. Представимо рівняння (1) у вигляді:

$$(k\beta d) = n\pi + \arctg \left\{ \frac{\dot{K}^2}{1 + \dot{K}^2} \frac{1}{\beta [\epsilon/\epsilon_{11} + th(kd)]} \right\}. \quad (3)$$

Для відомих п'єзонапівпровідників класу бтп  $K^2 \ll 1$ ,  $\epsilon_{11}/\epsilon_0 \gg 1$  [5]. Враховуючи цю обставину і, розкладаючи арктангенс в ряд, рівняння (3) з точністю до членів пропорційних  $K^2$ , набуває вигляду:

$$(k\beta d) = (2n+1)\frac{\pi}{2} - \dot{K}^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \frac{1}{\beta_0}, \quad (4)$$

де  $\beta_0$  – нульове наближення  $\beta$  по  $K^2$ .

Після нескладних перетворень, з виразу (4), одержимо:

$$k^2 - k_0^2 = -\dot{K}^2 k_t \left( k_t - 2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \frac{k_0}{k_t d} \right), \quad (5)$$

де  $k_0$  – нульове наближення  $k$  по  $K^2$ .

Оскільки акустoeлектронна взаємодія в даному випадку пов'язана з п'єзо ефектом, то  $k - k_0 = \delta k$  є малою величиною і  $k^2 - k_0^2 = 2k\delta k$  та

$$\delta k = \frac{\dot{K}^2}{2} k_t \left( 2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \frac{1}{k_t d} - \frac{k_t}{k_0} \right). \quad (6)$$

І для відносної зміни швидкості розповсюдження, пов'язаної з акустoeлектронною взаємодією, одержуємо:

$$\frac{dV}{V} = \frac{\dot{K}^2}{2} \frac{V}{V_t} \left( \frac{V}{V_t} - 2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \frac{1}{k_t d} \right). \quad (7)$$

І остаточно:

$$\frac{dV}{V} = \frac{K^2}{2} \frac{V}{V_t} \frac{1}{1+g^2} \left( \frac{V}{V_t} - 2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{11}} \frac{1}{k_t d} \frac{1-g^2}{1+g^2} \right). \quad (8)$$

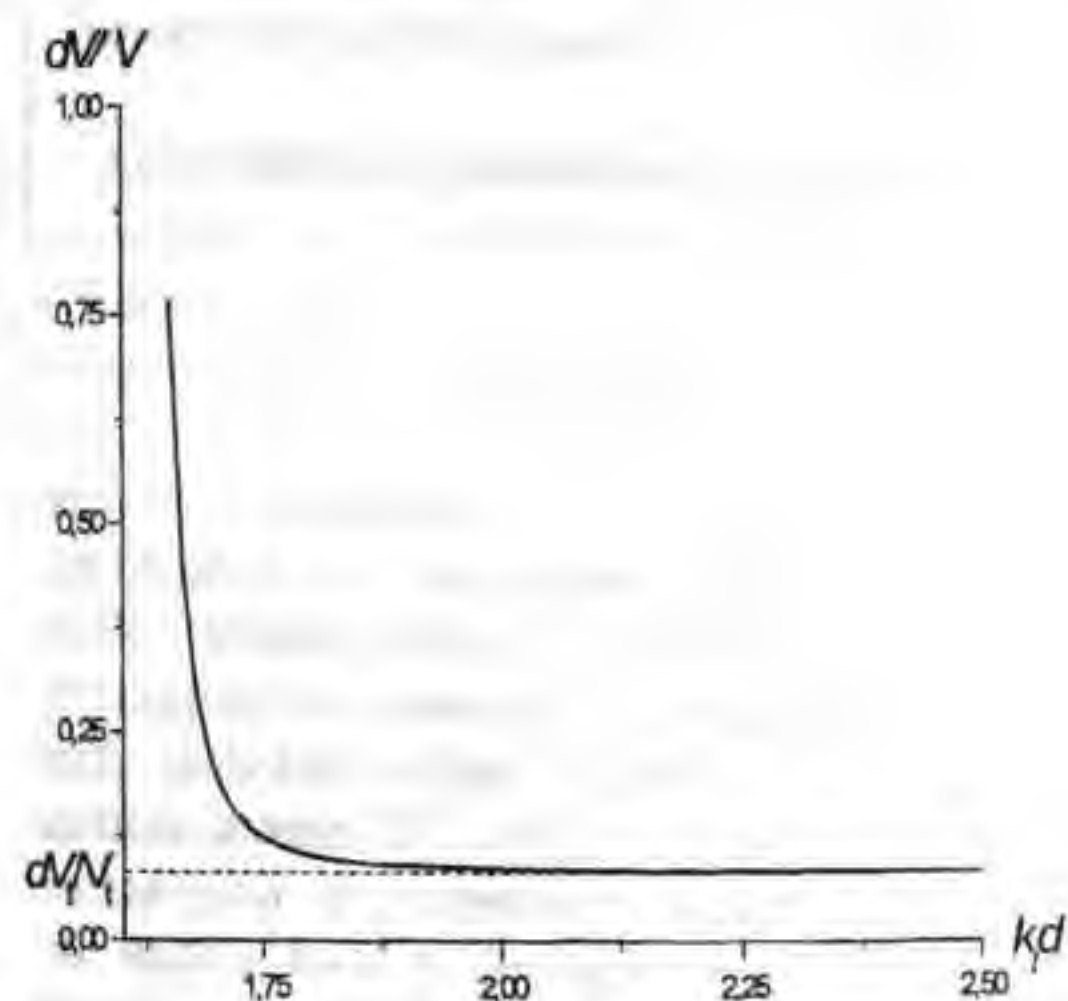


Рис. 2 Залежність відносної зміни швидкості розповсюдження нормальних поперечних акустичних хвиль від  $kd$  для першої антисиметричної моди в кристалі CdS (суцільна лінія). Значення  $dV/V$  для об'ємних поперечних акустичних хвиль (штрихована лінія).

Для об'ємних УЗ хвиль, при аналогічних умовах, маємо:

$$\frac{dV_t}{V_t} = \frac{K^2}{2} \frac{1}{1+g^2}. \quad (9)$$

На рис.2 суцільною лінією зображено залежність відносної зміни швидкості поширення нормальних поперечних акустичних хвиль в кристалі CdS, пов'язаної з акустoeлектронною взаємодією, від частоти і товщини пластини для першої антисиметричної моди. Штрихованою лінією приведено величину відносної зміни швидкості поширення об'ємних акустичних хвиль для того ж кристалу. Як видно з рис.2, для пружних хвиль в пластинах, величина впливу акустoeлектронної взаємодії на швидкість



розповсюдження УЗ хвиль залежить від частоти і товщини пластини ( $k, d$ ), стрімко зростає при наближенні до критичного значення  $kd$  і може бути набагато більшою ніж для об'ємних УЗ хвиль.

### Список використаних джерел

1. Мак-Фи Дж. Распространение и усиление звуковых волн в пьезоэлектрических полупроводниках. //Физическая акустика /Под. ред. У.Мэзона.-М.:Мир, 1969, -т.1., ч.А, -с.13-62.
2. Гуляев Ю.В., Пустовойт В.И. Усиление поверхностных волн в полупроводниках // ЖЭТФ, — 1964. — т.47, вып.6. — с.2251-2253.
3. Кучеров И.Я., Островский И.В. Пьезоэлектрическое взаимодействие поперечных ультразвуковых волн с носителями заряда в пластинах кристаллов  $\text{С}_{60}$  // Укр.Физ. Ж. — 1972. — т.17, №5. — с.842-844.
4. Коцаренко Н.Я., Кошечая С.В., Островский И.В. Пьезоэлектрическое взаимодействие поперечных нормальных волн в двухслойной среде с носителями заряда // Укр.Физ. Ж. — 1971. — т.16, №10. — с.1618-1624.
5. П.В.Бурлий, И.Я.Кучеров, А.А.Левченко. Управление акустоэлектронным взаимодействием в слоистой структуре пьезоэлектрическая пластина-полупроводник // Письма в ЖТФ, 1986, - вып. 18, т.12, -с.1130-1134.

Надійшла до редколегії 15.03.2007



УДК 519.9

С. Й. Вільчинський, д.ф.-м.н., професор,  
А. В. Чумаченко

Метод континуального інтегрування  
при отриманні низькочастотної  
асимптотики функцій Гріна для  
сильновзаємодіючої Бозе-системи.

Знайдено розв'язки кінетичних рівнянь  
для сильновзаємодіючої Бозе-системи,  
в акустичному наближенні, отримано  
елементи власноенергетичної матриці  $\Sigma$  і  
проаналізовано рівняння для знаходження  
спектру елементарних збуджень в  
надплинному  $^4\text{He}$ . Показано, що врахування  
взаємодії приводить до квадратичних  
поправок у виразі для швидкості першого  
звуку і не змінює вираз для швидкості  
другого звуку.

Ключові слова: надпливність, вершинні  
функції, спектр елементарних збуджень

S. I. Vilchynskyy, d.p.-m.s. professor,  
A. V. Chumachenko

The path integral method for obtain-  
ing the lowfrequency asymptotic of the  
Green's functions for the strongly inter-  
acting Bose-system.

Were found the solutions of the kinetic equations  
for the strongly interacting Bose-system. The el-  
ements of the self-energy matrix  $\Sigma$  were calculat-  
ed in the acoustic approximation and the equa-  
tion for elementary excitation spectrum in  $^4\text{He}$   
was analyzed. It was shown that interaction once  
taken into account, leads to the quadratic correc-  
tions in the expression for the first sound velocity  
and does not change the expression for the second  
sound velocity.

Key words: superfluidity, vertex functions, the el-  
ementary excitation spectrum

E-mail: sivil@univ.kiev.ua, chumachenko.a@gmail.com

## Вступ

Ефективний метод подолання проблеми  
інфрачервоних розбіжностей діаграм теорії  
збурень в рамках мікроскопічного опису  
взаємодіючих Бозе-систем був запропонований  
В. М. Поповим [1]. Використовуючи метод  
континуального інтегрування за допомогою  
розділення Фур'є-образу польових змінних  
 $\Psi$  на повільні  $\Psi_s$  та швидкі  $\Psi_f$  відносно  
деякого імпульсу  $q_0$  і наступним інтегруванням  
по швидким змінним, Попов отримав  
ефективний перенормований функціонал  
квантовомеханічної дії  $S_{\text{eff}}$ . Теорія збурень з  
використанням такого функціоналу, записаного  
у "гідродинамічних" змінних фази  $\varphi(q)$  і  
амплітуди  $\pi(q)$ , не містить інфрачервоних  
розбіжностей і тому є ефективною при  
розрахунку низькоенергетичних властивостей  
системи. У наближенні слабонеідеального Бозе-  
газу Попов отримав вираз для затухання  
спектру елементарних збуджень, після чого  
показав, що знаходження суми послідовностей  
діаграм вищих порядків теорії збурень  
може бути зведено до розв'язання системи

рівнянь типу кінетичних. Використовуючи  
метод Чепмена-Енскога-Гільберта в роботі [1]  
знайдено розв'язок цих рівнянь в акустичному  
та в'язкому наближенні і отримано вираз  
для швидкості другого звуку, а також  
температурну поправку до швидкості першого  
звуку. Отримані результати при температурі  
 $T = 0$  відтворюють результат Беляєва [2, 3].

На жаль, використана Поповим модель  
слабонеідеального Бозе-газу, не дуже добре  
описує таку сильновзаємодіючу Бозе-систему  
як надплинний  $^4\text{He}$ . Тому усі розрахунки,  
проведені на основі розробленого Поповим  
методу, який безсумнівно є вірним, потребують  
уточнення і залишаються актуальною і  
складною проблемою і зараз.

В роботі [4] проведено розрахунок  
затухання спектру для сильновзаємодіючої  
Бозе-системи на основі методу ефективного  
потенціалу, розвиненого у роботі [1].  
Виразивши термодинамічні коефіцієнти  
квадратичної форми  $S_{\text{eff}}$  через вимірювані  
фізичні характеристики системи, такі як  
швидкість звуку  $c_0$ , густина системи  $\rho_0$  і  
стисливість конденсату  $d\rho_0/d\mu$  ( $\mu$  – хімічний



потенціал системи), було отримано нові гідродинамічні функції Гріна для системи з сильною взаємодією. На основі цих функцій Гріна у другому порядку теорії збурень було розраховано уявну частину спектру елементарних збуджень надплинного  $^4\text{He}$ , яка визначає його затухання.

Метою даної роботи є розв'язок кінетичних рівнянь для сильновзаємодіючої Бозе-системи, аналогічних до отриманих Поповим для слабонеідеального Бозе-газу. Застосовуючи метод континуального інтегрування і використовуючи отриманий в [4] вираз для затухання спектру елементарних збуджень, знайдено розв'язки кінетичних рівнянь для сильновзаємодіючої Бозе-системи, в акустичному наближенні, отримано елементи власноенергетичної матриці  $\Sigma$ , і нарешті, розв'язано рівняння для знаходження спектру елементарних збуджень в надплинному  $^4\text{He}$ .

## Розв'язок кінетичних рівнянь в акустичному наближенні.

Для мікроскопічного опису сильновзаємодіючої Бозе-системи будемо використовувати розвинену Поповим [1] схему теорії збурень, яка дозволяє обчислити функції Гріна неідеального Бозе-газу нижче точки Бозе-конденсації в гідродинамічній області (при малих енергіях і імпульсах). Використовуючи метод континуального інтегрування, виділимо послідовність діаграм теорії збурень, які дають основний вклад в гідродинамічну асимптотику функцій Гріна. Можна показати, що так само, як і для випадку слабонеідеального Бозе-газу, знаходження суми послідовності виділеного класу діаграм зводиться до пошуку розв'язків рівнянь типу кінетичних. Як і у випадку слабонеідеального Бозе-газу, для сильновзаємодіючої Бозе-системи верхніні функції  $D^i$  входять у рівняння в наступних комбінаціях:

$$h(k_1, k, E) \equiv \frac{1}{2Z} \frac{mc^2}{n} \left\{ \frac{dn_0}{d\mu} (D_{\phi\pi, \pi}^i - D_{\pi\phi, \pi}^i) + \right. \\ \left. + i\varepsilon_1^{-1} D_{\phi\phi, \pi}^i + c^2 \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right)^2 k_1^2 \varepsilon_1^{-1} D_{\pi\pi, \pi}^i \right\},$$

$$g(k_1, k, E) \equiv -\frac{1}{2Z} \frac{mc^2}{n} \left\{ i \frac{dn_0}{d\mu} (D_{\phi\pi, \pi}^i - D_{\pi\phi, \pi}^i) + \right. \\ \left. + \varepsilon_1^{-1} D_{\phi\phi, \pi}^i + c^2 \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right)^2 k_1^2 \varepsilon_1^{-1} D_{\pi\pi, \pi}^i \right\},$$

де  $\vec{k}, \vec{k}_1$  – імпульси бозонів,  $m$  – маса атому гелію,

$$Z \equiv E - 2\varepsilon_1'(\vec{k}_1, \vec{k}) + 2i\Delta(k_1), \quad \varepsilon_1' = \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_1^2},$$

$E(\vec{k})$  – спектр елементарних збуджень,  $\varepsilon(\vec{k}) = c\vec{k}$ , де  $c = \frac{1}{m} \frac{dp}{dn}$  – швидкість першого звуку,  $p$  – тиск у системі,  $\Delta(k)$  – уявна частина спектру  $E$ , отримана в [4]:

$$\Delta(\vec{k}_1) = \frac{9mc^2(1 - e^{-\beta\varepsilon_1})}{128\pi^2 n^3} \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right)^2 \int d\vec{k}_2 d\vec{k}_3 \varepsilon_1 \times \\ \times \varepsilon_2 \varepsilon_3 n_2 n_3 \left[ 2\delta(1 + 2 - 3)e^{\beta\varepsilon_3} + \delta(1 - 2 - 3)e^{\beta\varepsilon_1} \right]; \quad (1)$$

$\beta$  – безрозмірна обернена температура.

Комбінації  $h(k_1, k, E)$  і  $g(k_1, k, E)$  задовольняють наступній системі рівнянь і є аналогічними до рівнянь для слабонеідеального Бозе-газу:

$$(E - 2\varepsilon_1'(\vec{k}\vec{k}_1)) \frac{n}{mc^2} \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right)^{-1} h + iI(h) = \frac{1}{m}(\vec{k}\vec{k}_1),$$

$$(E - 2\varepsilon_1'(\vec{k}\vec{k}_1)) \frac{n}{mc^2} g + iI(g) = \varepsilon(\vec{k}_1). \quad (2)$$

Тут

$$I(h) = -\frac{9(1 - e^{-\beta\varepsilon_1})}{64m\pi^2 n^2} \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right) \int d\vec{k}_2 d\vec{k}_3 \varepsilon_1 \times \\ \times \varepsilon_2 \varepsilon_3 n_2 n_3 \left[ 2\delta(1 + 2 - 3)e^{\beta\varepsilon_3}(h_1 + h_2 - h_3) + \right. \\ \left. + \delta(1 - 2 - 3)e^{\beta\varepsilon_1}(h_1 - h_2 - h_3) \right], \quad (3)$$

$$I(g) = -\frac{9(1 - e^{-\beta\varepsilon_1})}{64m\pi^2 n^2} \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right)^2 \int d\vec{k}_2 d\vec{k}_3 \varepsilon_1 \times \\ \times \varepsilon_2 \varepsilon_3 n_2 n_3 \left[ 2\delta(1 + 2 - 3)e^{\beta\varepsilon_3}(g_1 + g_2 - g_3) + \right. \\ \left. + \delta(1 - 2 - 3)e^{\beta\varepsilon_1}(g_1 - g_2 - g_3) \right], \quad (4)$$

де

$$h_i \equiv h(\vec{k}\vec{k}_i, E), \quad g_i \equiv g(\vec{k}\vec{k}_i, E)$$

$$\delta(1 \pm 2 - 3) = \delta(\vec{k}_1 \pm \vec{k}_2 - \vec{k}_3) \delta(\varepsilon_1 \pm \varepsilon_2 - \varepsilon_3),$$



$$n_i = (e^{\beta \varepsilon_i} - 1)^{-1}.$$

Отримані рівняння (2) по своїй суті є лінеаризованими кінетичними рівняннями, а вирази  $I(h)$  і  $I(g)$  відіграють роль інтегралів зіткнень. При цьому неоднорідні члени  $\frac{1}{m}(\vec{k}\vec{k}_1)$  і  $\varepsilon(\vec{k}_1)$  є інтегралами руху, які заносять інтегралам зіткнень. Як добре відомо [6], рівняння такого типу можна розв'язувати застосовуючи метод Чепмена-Енскога-Гільберта. Будемо шукати розв'язок кінетичних рівнянь (2) у вигляді суми лінійних комбінацій інтегралів руху  $\frac{1}{m}(\vec{k}\vec{k}_1)$  і  $\varepsilon(\vec{k}_1)$  і малих в порівнянні з ними добавок  $\delta h$  та  $\delta g$ :

$$\begin{aligned} h &= a\varepsilon(\vec{k}) + (\vec{b}\vec{k}_1) + \delta h, \\ g &= a_1\varepsilon(\vec{k}_1) + (\vec{b}_1\vec{k}_1) + \delta g. \end{aligned} \quad (5)$$

Використовуючи умову ортогональності інтегралів зіткнень і інтегралів руху з вагою

$$\frac{\exp[\beta\varepsilon(\vec{k}_1)]}{[\exp[\beta\varepsilon(\vec{k}_1)] - 1]},$$

отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів  $a, a_1, \vec{b}, \vec{b}_1$  і знаходимо в першому (акустичному) наближенні її розв'язок, що дає змогу записати шукані функції  $h$  та  $g$  у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} h &= \frac{\frac{2}{3} \frac{\langle \varepsilon \varepsilon_1 (\vec{k})^2 \rangle}{\langle (\varepsilon^2) \rangle} (\vec{k})^2 \varepsilon(\vec{k}) + E(\vec{k}\vec{k}_1)}{m(E^2 - u^2 k^2)}, \\ g &= \frac{E\varepsilon(\vec{k}) - \frac{2}{3} \frac{\langle \varepsilon \varepsilon_1 (\vec{k})^2 \rangle}{\langle (\varepsilon^2) \rangle} (\vec{k}\vec{k}_1)}{(E^2 - u^2 k^2)}, \end{aligned} \quad (6)$$

де

$$\langle \langle A \rangle \rangle \equiv \int A(\vec{k}_1) \exp[\beta\varepsilon(\vec{k}_1)] (\exp[\beta\varepsilon(\vec{k}_1)] - 1)^2 d\vec{k}_1,$$

$$u^2 \equiv \frac{4}{3} \frac{\langle \varepsilon \varepsilon_1 (\vec{k})^2 \rangle}{\langle \varepsilon \varepsilon_1 \rangle \langle (\vec{k})^2 \rangle}.$$

Вирази для власноенергетичних частин  $\Sigma_{\phi\phi}, \Sigma_{\phi\pi}, \Sigma_{\pi\phi}, \Sigma_{\pi\pi}$  в термінах функцій  $h$  і  $g$  мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\phi\phi} &= \frac{11\beta^2 \langle \varepsilon (\vec{k})^2 \rangle (\vec{k})^2}{24m^2} - \beta E \langle \langle \frac{\vec{k}\vec{k}_1}{m} h \rangle \rangle, \\ \Sigma_{\phi\pi} &= -\Sigma_{\pi\phi} = \frac{\beta E}{2\rho_0} \langle \langle \frac{\vec{k}\vec{k}_1}{m} g \rangle \rangle, \\ \Sigma_{\pi\pi} &= \frac{1}{4\rho_0^2} \left( \frac{5}{4} \beta \langle \varepsilon^2 \rangle - \beta E \langle \langle \varepsilon_1 g \rangle \rangle \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Як і слід було очікувати, знайдені вирази для функцій  $h$  і  $g$ , а отже і для власноенергетичних частин також, такі ж самі як і у випадку слабонеідеального газу, але ця тотожність носить формальний характер, оскільки функції  $Z$ , які входять в дефініцію функцій  $h$  і  $g$  суттєво відрізняються у випадках слабонеідеальної та сильновзаємодіючої систем через відмінність параметру затухання  $\Delta$ . Як було показано в [4] вираз для параметру затухання у випадку сильновзаємодіючої системи у наближенні малої густини збігається з результатом, отриманим Поповим, а при нульовій температурі ( $\beta \rightarrow \infty$ ) відтворює результат Беляєва [3]

$$\Delta(\vec{k}) = \frac{3\vec{k}^5}{640\pi n m}. \quad (8)$$

Таким чином, використовуючи знайдені в першому (акустичному) наближенні функції  $h$  і  $g$ , можна знайти у явному вигляді власноенергетичну матрицю  $\Sigma(q)$ . Використовуючи відоме співвідношення [7]

$$\det[G_0^{-1}(\vec{k}, \omega) - \Sigma(\vec{k}, \omega)] = 0,$$

де

$$\begin{aligned} G_0^{-1}(\vec{k}, \omega) &= \begin{pmatrix} g_{\pi\pi} & g_{\pi\varphi} \\ g_{\varphi\pi} & g_{\varphi\varphi} \end{pmatrix} = \\ &= - \begin{pmatrix} - \left( \frac{dn_0}{d\mu} \right)^2 \omega_s^2 & \frac{dn_0}{d\mu} \omega_s \\ - \frac{dn_0}{d\mu} \omega_s & 1 \end{pmatrix} \frac{m}{n} \frac{c^2}{\omega_s^2 + c^2 k^2} + \\ &+ \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho_0 n_0} & 0 \\ 0 & \frac{1}{8\pi n_0} \frac{1}{\rho_0 n_0} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

отримуємо в явному вигляді рівняння для знаходження спектру:

$$\begin{aligned} (E^2 - c_0^2 k^2 (1 + \frac{37\rho_n}{16\rho} + \frac{15}{42} (\frac{\rho_n}{\rho})^2)) (E^2 - u^2 k^2) - \\ - (\frac{11\rho_n}{4\rho} + \frac{3}{13} (\frac{\rho_n}{\rho})^2) E^2 c_0^2 k^2 = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

де  $c_0^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial p}{\partial \rho}$ ,  $\rho_n = \frac{\beta \langle \varepsilon (\vec{k})^2 \rangle}{3m}$ . Розв'язки цього рівняння мають вигляд

$$\begin{aligned} E_1^2(\vec{k}) &= c_1^2 k^2 = c_0^2 (1 + \frac{29\rho_n}{16\rho} + \frac{9}{42} (\frac{\rho_n}{\rho})^2) k^2, \\ E_2^2(\vec{k}) &= u^2 k^2 = \frac{4}{3} \frac{\langle \varepsilon \varepsilon_1 (\vec{k})^2 \rangle}{\langle \varepsilon \varepsilon_1 \rangle \langle (\vec{k})^2 \rangle} k^2. \end{aligned} \quad (11)$$



## Висновки

Отримані співвідношення дозволяють зробити висновок про те, що при низьких температурах у фононній області врахування взаємодії в досліджуваній системі приводить до поправки квадратичної по відношенню до  $\frac{\rho_n}{\rho}$  у виразі для швидкості першого звуку і не впливає на швидкість другого звуку, вираз для якої є ідентичним до отриманого у випадку слабонеідеального Бозе-газу. Випадок другого (в'язкого) наближення в даній роботі не розглядався і є задачею наступних обчислень.

Усі наведені результати розраховано для малих енергії і імпульсу, що відповідає фононній частині спектру елементарних збуджень. Розрахунок функцій Гріна для більших імпульсів, що відповідатимуть максон-ротонній частині спектру є складним у даному підході, оскільки ефективна дія записана у "гідродинамічних" (хвильових) змінних, є також предметом подальших досліджень.

## Список використаних джерел

- [1] В. Н. Понов. *Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике*. (Атомиздат, М., 1976).
- [2] С. Т. Боляев. *ЖЭТФ Т 34*, 417 (1958).
- [3] С. Т. Боляев. *ЖЭТФ Т 34(2)*, 433 (1958).
- [4] А. Чумаченко, С. Вільчинський, М. Вейраух. Інфрачервона поведінка відгуку для сильновзаємодіючих Бозе систем. *Прийнято до друку у Журнал фізичних досліджень*, 2007.
- [5] Н. Н. Боголюбов. *Журн. Физ. СССР Т 11*, 23 (1947).
- [6] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. (Физматгиз, М., 1962).
- [7] Mahan G. D. *Many-particle physics*. (Plenum Press, 2nd. edition, 1993).

Надійшла до редакції 07.05.07



УДК 512

Гаврюшенко Д.А., канд. фіз-мат. наук, доцент

### Концентрація компонентів бінарного розчину в зовнішньому полі

Для розрахунку концентрації бінарної суміші розглянуто гратчасту модель рідини. Побудовано розклад потенціалу зовнішнього поля у функціональний ряд Тейлора, в наслідок чого було отримано розклад за прямими кореляційними функціями усіх порядків.

Ключові слова: гратчаста модель рідини, неоднорідна система, критична точка, кореляційна функція

E-mail: dm\_g@univ.kiev.ua

Важливим результатом розвитку статистичної фізики є можливість дати кількісний опис бінарного розчину однорідної рідини в широкому інтервалі зміни термодинамічних параметрів, включаючи окіл можливих критичних точок. Стан такої системи можна повністю задати набором інтенсивних параметрів, та загальним числом частинок  $N = N_A + N_B$ , де  $N_A$  та  $N_B$  – кількість частинок сорту "А" та "В" відповідно.

Традиційні методи опису властивостей неоднорідної системи полягає так званому локальному наближенні [1]. Базуючись на цьому підході, для хімічного потенціалу однокомпонентної системи  $\mu(\vec{r})$  у зовнішньому полі можна одержати відому класичну формулу [2]:

$$u(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}), \quad (1)$$

де  $\mu_0$  – хімічний потенціал системи у відсутності зовнішнього поля.

Дж. Лебовицем та Дж. Перкусом було показано [3], що при врахування нелокальних властивостей вираз (1) необхідно записувати у вигляді

$$u(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}) + a \nabla^2 n(\vec{r}) \quad (2)$$

де стала  $a$  визначається через другий просторовий момент так званої прямої кореляційної функції другого порядку. Вираз (2) дозволяє в певному наближенні проводити обчислення просторового розподілу густини

D.A. Gavryushenko, Ph.D.

### Binary solution component concentration under external field

To calculate concentration profile of a binary solution lattice mode of liquid has been revised. An external field potential has been expanded into functional series as functional of liquid density. Expansion on direct correlation functions of any order has been obtained in the result.

Key words: liquid lattice model, nonuniform system, critical point, correlation function.

рідини в широкому окілі зміни термодинамічних параметрів, включаючи критичну точку [4, 5].

Для того, що б дати послідовну термодинамічну теорію, яка описує поведінку однокомпонентної неоднорідної системи, раніше нами був запропонований фундаментальний підхід, що базується на обчисленні внеску від кожного шару між еквіпотенційними поверхнями не у відповідні термодинамічні потенціали, а в гамільтоніан системи [6]. В цьому випадку замість виразів (1) та (2) можна записати

$$u(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}) + \Delta\mu_{cor}(\vec{r}), \quad (3)$$

де  $\Delta\mu_{cor}$  – внесок від кореляційних ефектів, для якого було отримано вираз у вигляді нескінченного ряду [7].

Метою даної роботи є узагальнити запропонований в [7] формалізм на випадок двокомпонентної системи.

Для опису термодинамічної поведінки неоднорідного бінарного флюїду в обмеженій системі застосуємо гратчасту модель рідини, в рамках якої молекули розчину знаходяться у вузлах ґратки, причому загальне число частинок  $N$  співпадає з кількістю вузлів ґратки  $N'$ :

$$N = N' = N_A + N_B. \quad (4)$$

Очевидно, що відсутність незайнятих вузлів ґратки (тобто відсутність «третього компоненту розчину», тобто незайнятих частинами вузлів ґратки – дірок) відповідає випадку достатньо стиснутої рідини. Прості розрахунки вказують на те, що саме така ситуація має місце у випадку так



званого випадкового щільного пакування частинок системи [8], що має місце, зокрема, для рідини в нанооб'єктах, таких як карбонові нанотрубки та фулерени.

Для зручності розіб'ємо об'єм системи на шари товщиною  $l$ , перпендикулярні лініям дії зовнішньої сили. Гамільтоніан такої системи запишемо у вигляді

$$H = H'_0 + \sum_{i=1}^M (N_A^i u_A^i + N_B^i u_B^i), \quad (5)$$

де  $H'_0$  – частина гамільтоніану, яка описує міжчастинкову взаємодію,  $M$  – кількість шарів,  $N_A^i$  та  $N_B^i$  – кількість частинок сорту "А" та "В" відповідно в шарі з номером  $i$ ,  $u_A^i$  та  $u_B^i$  – потенціальна енергія частинок сорту "А" та "В" в зовнішньому полі в цьому шарі. Введемо концентрацію компоненту "В" в  $i$ -му шарі  $x_i$ :

$$x_i = \frac{N_B^i}{N^i}, \quad (6)$$

де  $N^i = \frac{N}{M}$  – загальна кількість частинок в  $i$ -му шарі. В цьому випадку вираз (5) можна подати у вигляді:

$$H = H_0 + \sum_i u_{BA}^i x_i, \quad (7)$$

де  $H_0 = H'_0 + \sum_{i=1}^M N_i u_A^i$ ,  $u_{BA}^i = \frac{u_B^i - u_A^i}{N_i}$ .

Для спрощення далі будемо розглядати систему з кубічною решіткою, у якій вздовж вісі  $Oz$  діє зовнішнє поле  $u(z)$ , крім того, система в цьому напрямку обмежена. В цьому випадку вираз (7) набуває вигляду

$$H = H_0 + \sum_i u_{BA}^i x_i, \quad (8)$$

де  $u_{BA}^i = \frac{u_B^i - u_A^i}{N_i}$ ,  $N_i = N \frac{2L}{l} = \text{const}$ . Для

подальшого опису системи по аналогії з теорією рідин введемо пряму кореляційну функцію  $s$ -го порядку «концентрація-концентрація» у відповідних шарах з урахуванням  $\delta$ -подібних особливостей:

$$C_s(z, z_1, \dots, z_{s-1}) = \frac{\delta^{s-1}(\beta u_{BA}(z))}{\delta x(z_1) \dots \delta x(z_{s-1})} \Big|_{x(z_1)=x^0(z_1), \dots, x(z_{s-1})=x^0(z_{s-1})} \quad (9)$$

Розглядаючи нескінченно тонкі шари як математично нескінченно малі, як це прийнято робити в польових теоріях неоднорідних систем, розкладемо потенціал зовнішнього поля  $u_{BA}(z)$  у функціональний ряд Тейлора за відхиленнями  $\Delta x(z) = x(z) - x^0(z)$  концентрації  $x(z)$  від її значення  $x^0(z)$  у відсутності зовнішнього поля:

$$\begin{aligned} \beta u_{BA}(z) = & \int_{-L}^L dz_1 \frac{\delta(\beta u_{BA}(z))}{\delta x(z_1)} \Big|_{x(z_1)=x^0(z_1)} \Delta x(z_1) + \\ & + \frac{1}{2!} \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 \frac{\delta^2(\beta u_{BA}(z))}{\delta x(z_1) \delta x(z_2)} \Big|_{x(z_1)=x^0(z_1), x(z_2)=x^0(z_2)} \cdot \\ & \cdot \Delta x(z_1) \Delta x(z_2) + \dots \end{aligned} \quad (10)$$

З урахуванням виразу (9) отримаємо:

$$\begin{aligned} \beta u_{BA}(z) = & \int_{-L}^L dz_1 C_2(z, z_1) \Delta x(z_1) + \\ & + \frac{1}{2!} \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) \Delta x(z_1) \Delta x(z_2) + \dots \end{aligned} \quad (11)$$

Записавши для відхилень концентрації формальний вираз

$$\Delta x(z_1) = \Delta x(z) + [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)], \quad (12)$$

і підставивши його у формулу (11), одержимо

$$\begin{aligned} \beta u_{BA}(z) = & \Delta x(z) \int_{-L}^L dz_1 C_2(z, z_1) + \\ & + \int_{-L}^L dz_1 C_2(z, z_1) [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)] + \\ & + \frac{1}{2!} [\Delta x(z)]^2 \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) + \\ & + \Delta x(z) \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)] + \\ & + \frac{1}{2!} \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)] \cdot \\ & \cdot [\Delta x(z_2) - \Delta x(z)] + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

де було враховано симетричність прямих кореляційних функцій однорідної системи відносно перестановки їхніх аргументів.



Застосовуючи розвинуту в роботі [5] процедуру, для  $u_{BA}(z)$  отримаємо вираз, аналогічний виразу (3):

$$u_{BA}(z) = \mu_0 - \mu(z) + \Delta\mu_{cor}(z), \quad (14)$$

де  $\Delta\mu_{cor}$  – внесок в різницю хімічних потенціалів від кореляційних ефектів:

$$\begin{aligned} \beta\Delta\mu_{cor}(z) = & \int_{-L}^L dz_1 C_2(z, z_1) [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)] + \\ & + \Delta n(z) \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)] + \\ & + \frac{1}{2!} \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) [\Delta x(z_1) - \Delta x(z)] \cdot \\ & \cdot [\Delta x(z_2) - \Delta x(z)] + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

Для випадку достатньо плавної просторової зміни густини  $\Delta x(z)$  на відстанях порядку радіусу дії міжмолекулярних сил далеко від критичної точки (саме в цьому випадку “радіус дії” прямих кореляційних функцій має порядок радіусу дії міжмолекулярних сил),  $\Delta x(z_1) - \Delta x(z)$  можна розкласти в ряд Тейлора за ступенями  $(z_1 - z)$ , і тоді вираз (15) можна подати у вигляді:

$$\begin{aligned} \beta\Delta\mu_{cor}(z) = & \frac{1}{2} \frac{d^2 \Delta x(z)}{dz^2} \int_{-L}^L dz_1 C_2(z, z_1) \cdot \\ & \cdot (z_1 - z)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{d \Delta x(z)}{dz} \right)^2 \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 \cdot \\ & \cdot C_3(z, z_1, z_2) (z_1 - z)(z_2 - z) + \\ & + \frac{d \Delta x(z)}{dz} \left[ \int_{-L}^L dz_1 C_2(z, z_1) (z_1 - z) + \right. \\ & \left. + \Delta n(z) \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 C_3(z, z_1, z_2) (z_1 - z) \right] + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

Оскільки в околі точці розшарування на критичній ізотермі, згідно з теорією масштабних перетворень,  $(\mu - \mu_c) \sim |x - x_c|^a$ , де показник  $a$  є нецілим числом, що виражається через критичні індекси, то зрозуміло, що нульові моменти прямих кореляційних функцій порядку п'ять і більше, розбігаються в самій критичній точці, тому рід (16) розбігається.

Одержані результати свідчать про те, що класичну формулу (1) можна застосовувати виключно для опису розподілу концентрації неоднорідних бінарних систем лише у випадку наявності зовнішніх полів з малими просторовими градієнтами далеко від критичної точки.

Але при наближенні до критичної точки роль кореляційних доданків зростає, і тому необхідно користуватись виразом (16), враховуючи все більше число поправочних доданків. Аналогічна ситуація має місце і далеко від критичної точки при наявності великих відхилень концентрації  $\Delta x(z)$ .

#### Список використаних джерел

1. Монстер А. Химическая термодинамика. – М.: Мир, 1971. – 296 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1964. – 587 с.
3. Lebowitz J.L., Percus J.K. Statistical thermodynamic of nonuniform fluids // J. Math. Physics. – 1963. – Vol. 4 (1). – P. 116–123.
4. Sengers J.V., van Leeuwen J.M.J. Gravity effects on the vapor-liquid interface very close to the critical temperature // Physica A. – 1985. – No 132A. – P. 207–232.
5. Булавин Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сысоев В.М. Профиль плотности флюида в плоскопараллельной поре с неидеальными стенками в гравитационном поле // Журнал физической химии. – 2004. – Т. 78 (11). – С. 2039–2042.
6. Булавин Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сысоев В.М. Химический потенциал системы во внешнем поле // Доповіді Академії наук України. – 1997. – №2. – С. 79–83.
7. Булавин Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сысоев В.М. Плотность неоднородной жидкости во внешнем поле // Доповіді Академії наук України. – 1997. – № 7.
8. Berryman J.G. Random close packing of hard spheres and disks // Phys. Rev. A. – 1983. – Vol. 27 (2) – P. 1053–1061.

Надійшла до редколегії 1.02.2007



УДК 534.268-8

Гаркуша Л.М., к.ф.-м.н., ст.н.с.

## В'язкопружні властивості водних розчинів крохмалю з добавками $MgCl_2$

Проаналізовано результати експериментального дослідження густини, коефіцієнта зсувної в'язкості і швидкості поширення звуку в залежності від температури і концентрації водних розчинів крохмалю з добавками  $MgCl_2$  в інтервалі температур 283 – 363 К.

Ключові слова: зсувна в'язкість, густина, швидкість поширення звуку.

L.M.Garkusha, Ph.D.

## Viscoelastic properties of starch aquatic solutions with $MgCl_2$

The results of measurements of density, shear viscosity coefficient, velocity of sound propagation as a function of temperature and composition of starch aquatic solutions with  $MgCl_2$  in the temperature range from 283 to 363 have been analysed.

Key Words: shear viscosity coefficient density, velocity of sound.

\*E-mail: [kirischka@bigmir.net](mailto:kirischka@bigmir.net)

Полісахариди, до яких належить цукор і крохмаль складають основну масу органічних речовин біосфери. Цукор або крохмаль, являються основними компонентами щоденного харчування і поставляють велику частину енергії, необхідної для живого організму. Крім того, вони відіграють велику роль в ряді процесів, що мають місце в клітинах, беруть участь в багатьох біологічних процесах [1]. Тому всестороннє вивчення поведінки фізичних властивостей водних розчинів полісахаридів становить науковий і практичний інтерес.

Мета цієї роботи полягає в дослідженні в'язкопружних властивостей водних розчинів крохмалю і водних розчинів крохмалю з добавками  $MgCl_2$  та встановленні особливостей їх поведінки від температури і концентрації.

### Експеримент

Вздовж кривої рівноваги рідина-пара в інтервалі температур 293 – 383 К досліджено в'язкість, густина і швидкість поширення звуку водних розчинів крохмалю з концентраціями 0,005 – 1,0 мас.% та з добавками  $MgCl_2$  (концентрації від  $10^{-6}$  моль /л  $MgCl_2$  до 1 моль /л  $MgCl_2$ ).

Швидкість поширення звуку ( $c$ ) визначали імпульсно-фазовим методом. Похибка при вимірюванні швидкості поширення звуку складала  $(0,1 \div 0,5) \%$  [2]. Густина ( $\rho$ ) вимірювали пікнометричним методом з похибкою – 0,05 %, а коефіцієнт кінематичної в'язкості ( $\nu$ ) – капілярним віскозиметром з похибкою, що не перевищує 1,0 % [3,4]. Об'єкти дослідження – водні розчини крохмалю та з добавками  $MgCl_2$ . Розчини для досліджень готували розчиненням хімічно чистого картопляного крохмалю в дистильованій воді при її кипінні та інтенсивному перемішуванні з наступним охолодженням. Розчини з добавками  $MgCl_2$  складено на основі розчину 0,25 в %  $H_2O$  + +0,75 в% крохмалю.

### Результати та їх обговорення

Результати експериментального дослідження швидкості поширення звуку, в'язкості і густини вказаних вище розчинів наведено в таблицях 1 та 2 для деяких температур і деяких концентрацій. В табл. 1 вказано також результати розрахунку адіабатичної стисливості та модуля пружності досліджених розчинів.



Таблиця 1

Температурна залежність фізичних властивостей водних розчинів крохмалю

| T, K                | $\rho, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ | $\nu \cdot 10^3, \text{см}$ | $\eta \cdot 10^3, \text{Па} \cdot \text{с}$ | $c, \frac{\text{м}}{\text{с}}$ | $K \cdot 10^{-10}, \text{Па}$ | $\beta, \cdot 10^{11}, \text{Па}^{-1}$ |
|---------------------|--------------------------------------|-----------------------------|---------------------------------------------|--------------------------------|-------------------------------|----------------------------------------|
| 0,05 мас.% крохмалю |                                      |                             |                                             |                                |                               |                                        |
| 293                 | 977,4                                | 1,10                        | 1,08                                        | 1486                           | 21,6                          | 46,3                                   |
| 323                 | 969,2                                | 0,70                        | 0,67                                        | 1543                           | 23,1                          | 43,3                                   |
| 353                 | 953,5                                | 0,49                        | 0,47                                        | 1553                           | 23,0                          | 43,5                                   |
| 0,1 мас.% крохмалю  |                                      |                             |                                             |                                |                               |                                        |
| 293                 | 978,1                                | 1,27                        | 1,24                                        | 1500                           | 22,0                          | 45,5                                   |
| 323                 | 969,2                                | 0,77                        | 0,75                                        | 1554                           | 23,4                          | 42,7                                   |
| 353                 | 954,1                                | 0,60                        | 0,57                                        | 1565                           | 23,4                          | 42,7                                   |
| 0,5 мас.% крохмалю  |                                      |                             |                                             |                                |                               |                                        |
| 293                 | 979,0                                | 8,59                        | 8,41                                        | 1493                           | 21,8                          | 45,8                                   |
| 323                 | 969,9                                | 3,94                        | 3,82                                        | 1552                           | 23,4                          | 42,8                                   |
| 353                 | 954,9                                | 2,20                        | 2,09                                        | 1557                           | 23,1                          | 43,3                                   |
|                     |                                      |                             |                                             |                                |                               |                                        |

Аналіз результатів експерименту свідчить про те, що температурна залежність  $\rho$  всіх досліджених розчинів, як і для води, нелінійна. Значення  $\rho$  досліджених водних розчинів крохмалю менші, ніж для води. Це можна пояснити тим, що, по-перше, крохмаль сам по собі має густину, яка менша густини води, по-друге, при введенні крохмалю в воду відбувається розрихлення структури води, що приводить до меншого значення густини розчину в порівнянні з густиною води. Як видно з табл. 1 з ростом температури густина досліджених розчинів зменшується і зростає з ростом концентрації.

Таблиця 2

Температурна залежність в'язкості і густини водних розчинів крохмалю з добавкою  $\text{MgCl}_2$

| T, K                                            | $\rho \cdot 10^3, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ | $\nu, \text{сст}$ | $\eta \cdot 10^3, \text{Па} \cdot \text{с}$ | $\rho \cdot 10^3, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ | $\nu, \text{сст}$ | $\eta \cdot 10^3, \text{Па} \cdot \text{с}$ |
|-------------------------------------------------|-------------------------------------------------|-------------------|---------------------------------------------|-------------------------------------------------|-------------------|---------------------------------------------|
| 0,25 в% $\text{H}_2\text{O}$ + 0,75 в% крохмал. |                                                 |                   | + $10^{-6}$ моль/л $\text{MgCl}_2$          |                                                 |                   |                                             |
| 293                                             | 0,9811                                          | 12,8              | 12,6                                        | 1,0003                                          | 9,96              | 9,96                                        |
| 313                                             | 0,9756                                          | 4,45              | 4,34                                        | 0,9946                                          | 5,56              | 5,53                                        |
| 343                                             | 0,9618                                          | 2,02              | 1,94                                        | 0,9868                                          | 2,2               | 2,1                                         |
| + $10^{-3}$ моль/л $\text{MgCl}_2$              |                                                 |                   | + $10^{-4}$ моль/л $\text{MgCl}_2$          |                                                 |                   |                                             |
| 293                                             | 1,0009                                          | 4,85              | 4,85                                        | 1,0025                                          | 2,19              | 2,20                                        |
| 313                                             | 0,9969                                          | 3,04              | 3,03                                        | 0,9988                                          | 1,52              | 1,51                                        |
| 343                                             | 0,9907                                          | 1,5               | 1,48                                        | 0,9912                                          | 0,83              | 0,82                                        |
| + $10^{-2}$ моль/л $\text{MgCl}_2$              |                                                 |                   | + $5 \cdot 10^{-2}$ моль/л $\text{MgCl}_2$  |                                                 |                   |                                             |
| 293                                             | 1,0037                                          | 1,82              | 1,83                                        | 1,0044                                          | 1,29              | 1,30                                        |
| 313                                             | 0,9990                                          | 1,42              | 1,41                                        | 0,9997                                          | 0,77              | 0,76                                        |
| 343                                             | 0,9932                                          | 0,7               | 0,69                                        | 0,9944                                          | 0,49              | 0,48                                        |
| + $10^{-1}$ моль/л $\text{MgCl}_2$              |                                                 |                   | 1 моль/л $\text{MgCl}_2$                    |                                                 |                   |                                             |
| 293                                             | 1,0063                                          | 1,83              | 1,84                                        | 1,0798                                          | 3,19              | 3,44                                        |
| 313                                             | 1,0006                                          | 1,21              | 1,21                                        | 1,0767                                          | 2,46              | 2,65                                        |
| 343                                             | 0,9958                                          | 0,60              | 0,59                                        | 1,0609                                          | 1,2               | 1,3                                         |



З табл. 1 і 2 видно, що значення кінематичної в'язкості досліджених водних розчинів крохмалю більші від в'язкості води. З ростом температури  $\nu$  зменшується і зростає з ростом концентрації крохмалю (див. табл. 1).

Залежність  $\ln \nu$  від  $1/T$  водних розчинів крохмалю (див. рисунок 1) в дослідженому інтервалі температур лінійна. Це свідчить про те, що для якісного аналізу температурної залежності  $\nu$  можна скористатися формулою Ейрінга

$$\nu = \frac{\eta_s}{\rho} = \frac{hN_A}{M} \exp\left(\frac{\Delta G_v^*}{RT}\right), \quad (1)$$

де  $\eta_s$  – коефіцієнт зсувної в'язкості,  $h$  і  $N_A$  – стала Планка і число Авогадро відповідно,  $M$  – молекулярна маса розчину,  $\Delta G_v^* = \Delta H_v^* - T\Delta S_v^*$  – вільна ентальпія активації в'язкої течії. Результати розрахунку ентальпії активації в'язкої течії за формулою

$$\Delta H_v^* = - \frac{R \partial \left( \ln \frac{\eta_s}{\rho} \right)}{\partial (T^{-1})} \quad (2)$$

свідчать про те, що ця величина є сталою для досліджених розчинів і дорівнює  $2,7 \times 10^3$  ккал/моль. Ймовірно, що в даному випадку вирішальну роль в процесі течії відіграє ентропійний фактор.

В табл. 3 наведена концентраційна залежність в'язкості і густини досліджених водних розчинів крохмалю з добавками  $MgCl_2$  при 293 К. Як видно з табл. 2 і 3 для всіх досліджених нами розчинів з добавкою  $MgCl_2$  їх густина перевищує значення густини розчину 0,25 в%  $H_2O$  + 0,75 в% крохмалю. До того, ж як видно з табл. 3 з ростом концентрації  $MgCl_2$  в розчині його густина також зростає.

Таблиця 3

Концентраційна залежність коефіцієнта кінематичної в'язкості і густини водних розчинів крохмалю з добавкою  $MgCl_2$  при 293К

| Розчини крохмалю                    | $\nu$ , сст | $\rho$ , кг/м <sup>3</sup> |
|-------------------------------------|-------------|----------------------------|
| 0,25 $H_2O$ + 0,75 крохм.           | 12,8        | 981,1                      |
| + $10^{-6}$ моль/л $MgCl_2$         | 9,96        | 1000,3                     |
| + $10^{-5}$ моль/л $MgCl_2$         | 4,85        | 1000,9                     |
| + $10^{-4}$ моль/л $MgCl_2$         | 2,19        | 1002,5                     |
| + $10^{-3}$ моль/л $MgCl_2$         | 1,82        | 1003,7                     |
| + $5 \cdot 10^{-2}$ моль/л $MgCl_2$ | 1,29        | 1004,4                     |
| + $10^{-2}$ моль/л $MgCl_2$         | 1,83        | 1006,3                     |
| 1 моль/л $MgCl_2$                   | 3,19        | 1079,8                     |

Що стосується коефіцієнта кінематичної в'язкості, то, як видно з таблиць 2 і 3, добавка солі  $MgCl_2$  до розчину 0,25 в %  $H_2O$  + 0,75 в % крохмалю приводить до зменшення його в'язкості. В дослідженому діапазоні концентрацій в'язкість всіх досліджених нами розчинів з добавкою солі менша, ніж в'язкість розчину 0,25 в %  $H_2O$  + 0,75 в % крохмалю, але значно перевищує в'язкість води. Крім того, при сталій температурі (див. табл. 3) з ростом концентрації солі в розчині, його в'язкість зменшується, проходить через мінімум, а потім знову зростає.

Як видно з табл. 1 і рис. 1 швидкість поширення звуку досліджених розчинів збільшується з ростом температури нелінійно і проходить через максимум в інтервалі температур 343 – 353 К. Концентраційна залежність швидкості поширення звуку досліджених розчинів проходить також через максимум при концентрації 0,1 % (мас.) крохмалю в воді. На нашу думку цей експериментальний факт можна пояснити утворенням водневих зв'язків між молекулами води і крохмалю, що в свою чергу приводить до впорядкування структури розчину.



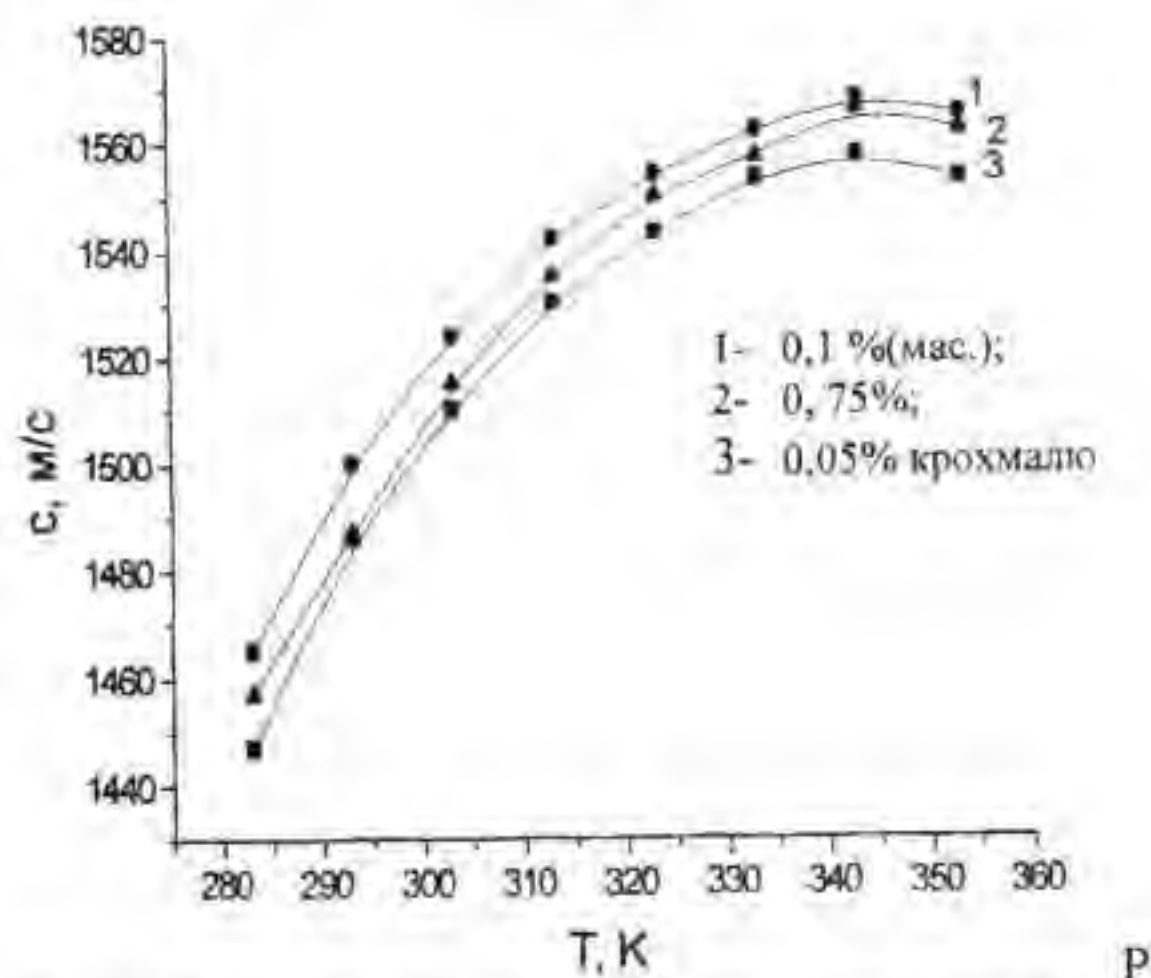


Рис. 1 Температурна залежність швидкості звуку для деяких водних розчинів крохмалю.

### Висновки

Проаналізовано особливості поведінки в'язко-пружних властивостей водних розчинів крохмалю та з добавками  $MgCl_2$  від температури і концентрації. Встановлено, що ентальпія активації не залежить від концентрації крохмалю досліджених водних розчинів. Ймовірно, що вирішальну роль в процесі течії відіграє ентропійний фактор.

### Список використаних джерел

1. Старз Дж. Молекулы жизни. -М.: Атомиздат, -1976, -102 с.
2. Гаркуша Л.Н., Сперкач В.С., Чолпан П.Ф. Экспериментальное определение упругих свойств жидкостей акустическим методом. - Метод. реком. для студ. физ. спец. вузов. -К.: УМК ВО, -1989. -56 с.
3. Чолпан П.Ф., Гаркуша Л.Н. Экспериментальные методы определения плотности жидкостей. Метод. реком. для студ. физ. спец. вузов. -К.: УМК ВО -1987. -19 с.
4. Чолпан П.Ф., Гаркуша Л.Н. Экспериментальные методы определения вязкости жидкостей. Метод. реком. для студ. Физ. спец. вузов. -К.: УМК ВО, -1987. -39 с.

Надійшла до редколегії 12.03.07



УДК 535.3

Гречко Л.Г., докт. фіз.-мат. наук, проф.,  
Лерман Л.Б., канд. техн. наук,  
Водоп'янов Д.Л., аспірант,  
Шостак С.В., канд. фіз.-мат. наук, доцент.

## Поляризованість структурно-неоднорідних кульових частинок

Визначено поляризованість багат шарової кулі з діелектрично ізо тропними та анізотропними шарами, а також кулі, для якої діелектрична проникність є довільною функцією радіальної координати. Для побудови розв'язків задачі електростатики в першому випадку використані трансляційні матриці, а в другому спеціальні чисельні алгоритми. Наводяться приклади тестових розрахунків.

Ключові слова: поляризованість, багат шарові кулі, трансляційні матриці.

\*E-mail: llerman@yandex.ru

### Вступ

Визначення поляризованості малих частинок довільної форми та будови є одним з найбільш важливим етапом при дослідженні оптичних властивостей як окремих частинок або їх сукупностей, так і матрично-дисперсних систем з такими включеннями [1-4]. Відомо [1], що прикладене поле наводить в частинці пропорційний йому дипольний момент. Для потенціалу ідеального диполя  $\Phi$ , який розташований в початку координат, маємо вираз

$$\Phi = \frac{p \cos \theta}{4\pi \epsilon_m r^2},$$

де  $p$  - дипольний момент,  $r$  - відстань до точки спостереження,  $\theta$  - меридіональний кут в сферичній системі координат,  $\epsilon_m$  - діелектрична проникність середовища.

Дипольний момент  $p$  за означенням є величиною

$$p = \epsilon_m \alpha E_0,$$

де  $E_0$  - напруженість сталого електричного поля,  $\alpha$  - поляризованість.

Для суцільної діелектрично-однорідної кулі збурний потенціал  $\Phi_p$ , який виникає в однорідному полі, діючого вздовж осі  $z$  визначається за відомою формулою

Grechko L.G., Dr. Sc., prof.,  
Lerman L.B., Ph. D.,  
Vodopyanov D.L., post gradient,  
Shostak S.V., Ph. D.

## Polarizability of structurally-heterogeneous spherical particles

A polarizability of multi-layer spheres with dielectric isotropic and orthotropic layers is determined. Spheres with any radii-dependent dielectric function are considered also. To construct solutions of electrostatics problems the transmission matrixes are used in the first case, and special numerical algorithms in the second one. Examples of test calculations are presented.

Key Words: polarizability, multi-layer sphere, transmission matrixes.

$$\Phi_p = a^3 E_0 r \cos \theta \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \frac{1}{r^3},$$

а дипольний момент кулі радіуса  $a$  є

$$p = 4\pi \epsilon_m a^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} E_0.$$

Порівняння наведених рівностей дає формулу для обчислення поляризованості кулі  $\alpha$

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m}.$$

Отже поляризованість кульової частинки довільної структури визначається як коефіцієнт при збурному потенціалу, помножений на  $4\pi$ . Тому задача полягає в знаходженні явного виразу для цього потенціалу в кожному конкретному випадку.

У цій статті викладається один з можливих підходів до визначення поляризованості кульових частинок з довільним числом шарів із застосуванням так званих трансляційних матриць [5-13]. Трансляційні матриці дозволяють переносити граничні умови з шару на шар, і для обчислення збурного потенціалу шарових частинок вони виявляються дуже зручними. Зокрема, в електростатичному наближенні розглядаються як багат шарові (концентричні) кулі, так і кулі із неперервною зміною діелектричної функції в радіальному напрямку. При цьому окремо розглянути випадки, коли діелектричні проникності шарів



відрізняється у нормальному і поперечному напрямках (випадок трансверсальної анізотропії).

Замкнуті формули для обчислення поляризованих кулі з покриттям (двошарова куля) добре відомі [1], але задача для багатошарової кулі значно ускладнюється у зв'язку із зростанням кількості рівнянь в граничних умовах. Для кулі із довільним законом зміни діелектричної функції від радіальної координати аналітичні розв'язки можуть бути отримано лише для окремих випадків. Нами запропоновано достатньо загальний алгоритм побудови чисельного розв'язку із врахуванням сингулярності в початку сферичної системи координат.

### 1. Шарувато-неоднорідна куля в електростатичному полі

Нами раніш [12-13] була розв'язана задача електростатики для шаруватого еліпсоїда в однорідному полі. З розв'язку цієї задачі можна отримати і розв'язок задачі для кулі. Але внаслідок важливості випадку кулі має сенс отримати розв'язок задачі для багатошарової кулі безпосередньо. До того ж узагальнення розв'язків на кулі, діелектрична проникність шарів яких має трансверсальну анізотропію, потребує окремого розгляду.

Отже, розглядається частинка (рис.1), яка складається з  $n$  концентричних куль з комплексними діелектричними проникностями  $\varepsilon_j$  і зовнішніми радіусами шарів  $r_j$  ( $j$  - номер шару і  $j=1,2,\dots,n$ ). Для зовнішнього радіусу кулі також будемо використовувати запис  $a=r_n$ . Нумерацію шарів починаємо з центру, тобто для ядра кулі  $j=1$ , а для зовнішнього середовища  $j=n+1$ . Діелектричну проникність зовнішнього середовища позначимо через  $\varepsilon_{n+1}=\varepsilon_m$ .



Рис.1. Багатошарова куля в електричному полі

Задачу розв'язуємо в сферичних координатах  $r, \theta, \varphi$ , пов'язаних з центром кулі. Потенціали електростатичного поля в шарах позначимо через  $u_j = u_j(r, \theta, \varphi)$ , потенціал зовнішнього поля – через  $u_0 = u_0(r, \theta, \varphi)$ , а збурний потенціал, який вносить куля, через  $u_p = u_p(r, \theta, \varphi)$ .

Всі потенціали є розв'язками рівняння Лапласа

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial u_j}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u_j}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_j}{\partial \varphi^2} = 0, \quad (1.1)$$

а на межах шарів при  $r=r_j$ , ( $j=1,2,\dots,n-1$ ) повинні справджуватися умови спряження

$$u_j = u_{j+1}, \quad \varepsilon_j \frac{\partial u_j}{\partial r} = \varepsilon_{j+1} \frac{\partial u_{j+1}}{\partial r}, \quad (1.2)$$

На поверхні кулі, тобто у випадку, коли  $j=n$ , матимемо умови ( $u_{n+1} = u_0 + u_p$ )

$$u_n = u_0 + u_p, \quad \varepsilon_n \frac{\partial u_n}{\partial r} = \varepsilon_m \left( \frac{\partial u_0}{\partial r} + \frac{\partial u_p}{\partial r} \right). \quad (1.3)$$

До умов (1.2), (1.3) додаються умови обмеженості розв'язків в початку координат і на нескінченності, тобто

$$u_1 < \infty \text{ при } r \rightarrow 0 \text{ і } u_p \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (1.4)$$

Розв'язки рівнянь для кожного шару і вираз для збурного потенціалу представимо у вигляді розкладів за сферичними гармоніками  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  при  $j=2,3,\dots,n$

$$u_j(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ A_{lm}^{(j)} \left( \frac{r}{a} \right)^l + B_{lm}^{(j)} \left( \frac{a}{r} \right)^{l+1} \right] Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$u_1(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm}^{(1)} \left( \frac{r}{a} \right)^l Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$u_p(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l B_{lm}^{(n+1)} \left( \frac{a}{r} \right)^{l+1} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1.5)$$

де, як звичайно,  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m=-l}^l P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$ , а

$P_l^{|m|}(\cos \theta)$  - приєднані функції Лежандра. При такому виборі розв'язків умови (1.4) будуть виконані, оскільки для потенціалу в ядрі кулі прийнято  $B_{lm}^{(1)} = 0$ , а для збурного потенціалу -  $A_{lm}^{(n+1)} = 0$ .

На поверхні кулі, тобто при  $r=a$  зовнішній потенціал  $u_0(r, \theta, \varphi)$  та його частинна похідна  $\partial u_0(r, \theta, \varphi) / \partial r$  будуть задавати деякі функції  $F(\theta, \varphi) = u_0(a, \theta, \varphi)$ ,  $G(\theta, \varphi) = \partial u_0(a, \theta, \varphi) / \partial r$ , які



при досить загальних умовах можна розкласти в ряд за сферичними гармоніками

$$F(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm} P_l^{(m)}(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

$$G(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l g_{lm} P_l^{(m)}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (1.6)$$

де коефіцієнти розкладів обчислюються за формулою

$$f_{lm} = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \times$$

$$\times \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} d\varphi \int_0^\pi F(\theta, \varphi) P_l^{(m)}(\cos \theta) \sin \theta d\theta,$$

$$g_{lm} = \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \times$$

$$\times \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} d\varphi \int_0^\pi G(\theta, \varphi) P_l^{(m)}(\cos \theta) \sin \theta d\theta$$

Підстановка розкладів (1.5), (1.6) в умови спряження для кожної пари індексів  $l, m$  приводить при  $j=1, 2, \dots, n-1$  до систем алгебраїчних рівнянь вигляду

$$A_{lm}^{(j)} \left(\frac{r_j}{a}\right)^l + B_{lm}^{(j)} \left(\frac{a}{r_j}\right)^{l+1} = A_{lm}^{(j+1)} \left(\frac{r_j}{a}\right)^l + B_{lm}^{(j+1)} \left(\frac{a}{r_j}\right)^{l+1},$$

$$A_{lm}^{(j)} \varepsilon_j l \left(\frac{r_j}{a}\right)^{l-1} - B_{lm}^{(j)} \varepsilon_j (l+1) \left(\frac{a}{r_j}\right)^{l+2} =$$

$$= A_{lm}^{(j+1)} \varepsilon_{j+1} l \left(\frac{r_j}{a}\right)^{l-1} - B_{lm}^{(j+1)} \varepsilon_{j+1} (l+1) \left(\frac{a}{r_j}\right)^{l+2}, \quad (1.7)$$

а для  $j=n$  матимемо систему

$$A_{lm}^{(n)} + B_{lm}^{(n)} = f_{lm} + B_{lm}^{(n+1)},$$

$$\varepsilon_n (A_{lm}^{(n)} + B_{lm}^{(n)}) = \varepsilon_n (g_{mn} - (l+1) B_{lm}^{(n+1)}). \quad (1.8)$$

При цьому, як вказувалось  $A_{lm}^{(n+1)} = 0, B_{lm}^{(1)} = 0$ .

Для знаходження збурного потенціалу необхідно мати тільки значення сталої  $B_{lm}^{(n+1)}$ . Зайві сталі виключимо з системи за допомогою трансляційних матриць. Як і роботах [10,12,13] після деяких перетворень отримаємо вираз для матриці переходу від  $j$ -го до  $(j+1)$ -го шару

$$T_j^{(l)} = \frac{1}{\Delta_j^{(l)}} \begin{bmatrix} t_{11,j}^{(l)} & t_{12,j}^{(l)} \\ t_{21,j}^{(l)} & t_{22,j}^{(l)} \end{bmatrix}, \quad (1.9)$$

де  $\Delta_j^{(l)} = -\varepsilon_{j+1} (2l+1) (a/r_j)^2$  с точністю до множника  $\varepsilon_{j+1}$  є визначник Вронського відповідних

розв'язків, обчислений на межі поділу шарів, а елементи матриці визначаються за формулами:

$$t_{11,j}^{(l)} = -\varepsilon_{j+1} (l+1) \left(\frac{a}{r_j}\right)^2 - \varepsilon_j l \left(\frac{a}{r_j}\right)^2,$$

$$t_{12,j}^{(l)} = -\varepsilon_{j+1} (l+1) \left(\frac{a}{r_j}\right)^{2l+3} - \varepsilon_j (l+1) \left(\frac{a}{r_j}\right)^{2l+3},$$

$$t_{21,j}^{(l)} = -\varepsilon_{j+1} l \left(\frac{r_j}{a}\right)^{2l-1} + \varepsilon_j l \left(\frac{r_j}{a}\right)^{2l-1},$$

$$t_{22,j}^{(l)} = -\varepsilon_{j+1} l \left(\frac{r_j}{a}\right)^2 + \varepsilon_j (l+1) \left(\frac{r_j}{a}\right)^2.$$

Трансляційна матриця визначається добутком матриць переходу шарів

$$T_l(r_1, r_n) = \begin{bmatrix} t_{11}^{(l)} & t_{12}^{(l)} \\ t_{21}^{(l)} & t_{22}^{(l)} \end{bmatrix} = \prod_{j=1}^{n-1} T_{n-j}^{(l)}. \quad (1.10)$$

Із застосуванням трансляційної матриці будемо мати

$$\begin{bmatrix} A_{lm}^{(n)} \\ B_{lm}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}^{(l)} & t_{12}^{(l)} \\ t_{21}^{(l)} & t_{22}^{(l)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{lm}^{(1)} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}^{(l)} A_{lm}^{(1)} \\ t_{21}^{(l)} A_{lm}^{(1)} \end{bmatrix},$$

і тоді потенціал в останньому шарі буде визначатися формулою

$$u_n^{(l)} = t_{11}^{(l)} A_{lm}^{(1)} \left(\frac{r}{a}\right)^l + t_{21}^{(l)} A_{lm}^{(1)} \left(\frac{a}{r}\right)^{l+1}, \quad (1.11)$$

а граничні умови (1.2) набувають вигляду

$$(t_{11}^{(l)} + t_{21}^{(l)}) A_{lm}^{(1)} - B_{lm}^{(n+1)} = f_{lm},$$

$$\varepsilon_n [t_{11}^{(l)} l - t_{21}^{(l)} (l+1)] A_{lm}^{(1)} + \varepsilon_n (l+1) B_{lm}^{(n+1)} = \varepsilon_n a g_{lm}. \quad (1.12)$$

Після знаходження коефіцієнтів для збурного потенціалу отримаємо вираз

$$u_p(r, \theta, \varphi) =$$

$$= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_n a g_{lm} [t_{11}^{(l)} + t_{21}^{(l)}] - \varepsilon_n f_{lm} [t_{11}^{(l)} l - t_{21}^{(l)} (l+1)]}{\varepsilon_n (l+1) [t_{11}^{(l)} + t_{21}^{(l)}] + \varepsilon_n [t_{11}^{(l)} l - t_{21}^{(l)} (l+1)]} \times$$

$$\times \left(\frac{a}{r}\right)^{l+1} Y_l(\theta, \varphi) \quad (1.13)$$

Розглянемо докладніше однорідне поле з потенціалом  $u_0 = -E_0 z = -E_0 r \cos \theta$ , діюче вздовж вісі  $z$ . В цьому випадку в розкладі потенціалу зовнішнього поля маємо лише один член ( $\cos \theta = P_1(\cos \theta), l=1, m=0$ ), а  $f_{10} = -E_0 a$ ,  $g_{10} = -E_0 a$ . Відповідно за випадком значень індексів  $l=1, m=0$  всі коефіцієнти розкладів інших потенціалів обертаються на нуль. Вираз для збурного потенціалу набуває вигляду (індекс



" $l_m$ " опускаємо, і також позначаємо  $t_{11}^{(1)} = t_{11}, t_{21}^{(1)} = t_{21}$

$$u_p(r, \theta, \varphi) = \frac{\varepsilon_n[t_{11} - 2t_{21}] - \varepsilon_m[t_{11} + t_{21}]}{2\varepsilon_m[t_{11} + t_{21}] + \varepsilon_n[t_{11} - 2t_{21}]} \left(\frac{a}{r}\right)^3 \times \\ \times E_0 r \cos \theta \quad (1.14)$$

Звідси знаходимо вираз для обчислення поляризованості шаруватої кулі

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon_n[t_{11} + 2t_{21}] - \varepsilon_m[t_{11} + t_{21}]}{2\varepsilon_m[t_{11} + t_{21}] + \varepsilon_n[t_{11} - 2t_{21}]} \quad (1.15)$$

Для суцільної кулі ( $n=1$ ) слід прийняти  $t_{11}=1, t_{21}=0$  і тоді отримаємо вираз, наведений вище. Для кулі в оболонці ( $n=2$ ) після деяких перетворень будемо мати

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m)r_2^3 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_m + 2\varepsilon_2)r_1^3}{(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m)r_2^3 + 2(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)r_1^3} \quad (1.16)$$

Цей вираз співпадає з формулою, яка наведена в [1].

## 2. Шарувато-неоднорідна куля з діелектрично-анізотропними шарами в електростатичному полі

Узагальнимо отримані вище результати на шаруваті кулі, діелектрична проникність шарів якої різна в нормальному і тангенціальному напрямках, тобто розглянемо випадок трансвесальної анізотропії діелектричної проникності. В цьому випадку замість рівняння (1.1) будемо мати

$$\varepsilon_r^{(j)} \frac{\partial}{\partial \rho} \left[ \rho^2 \frac{\partial u_j}{\partial \rho} \right] + \\ + \varepsilon_t^{(j)} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u_j}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_j}{\partial \varphi^2} \right\} = 0 \quad (2.1)$$

де  $\varepsilon_r^{(j)}, \varepsilon_t^{(j)}$  - діелектричні проникності  $j$ -го шару в радіальному і тангенціальному напрямках відповідно, і введено безрозмірну координату  $\rho = r/a$ .

Як і в ізотропному випадку, розв'язки будемо шукати у вигляді розкладів за сферичними гармоніками

$$u_j(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l U_{lm}^{(j)}(\rho) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2.2)$$

Для потенціалу зовнішнього поля і збурного потенціалу зберігаються розклади (1.5), (1.6). Підстановка розкладів (2.2) до рівняння (2.1) приводить із врахуванням рівняння для приєдна-

них функцій Лежандра до звичайних диференціальних рівнянь вигляду

$$\rho^2 \frac{d^2 U_{lm}^{(j)}(\rho)}{d\rho^2} + 2\rho \frac{dU_{lm}^{(j)}(\rho)}{d\rho} - \xi_j l(l+1) U_{lm}^{(j)}(\rho) = 0, \quad (2.3)$$

де  $\xi_j = \varepsilon_t^{(j)} / \varepsilon_r^{(j)}$ .

Зауважимо, що у випадку більш загальної діелектричної анізотропії змінні в рівнянні для потенціалів не відокремлюються. Виняток складає однорідне поле, коли розв'язок задачі можливо побудувати для випадку сферичної ортотропії діелектричних характеристик [1].

Загальний розв'язок рівняння (2.3) має вигляд

$$U_{lm}^{(j)}(\rho) = A_{lm}^{(j)} \rho^{v_{1l}^{(j)}} + B_{lm}^{(j)} \rho^{v_{2l}^{(j)}}, \quad (2.4)$$

де

$$v_{1l}^{(j)} = -1/2 + \sqrt{1/4 + \xi_j l(l+1)}, \\ v_{2l}^{(j)} = -1/2 - \sqrt{1/4 + \xi_j l(l+1)}. \quad (2.5)$$

Якщо матеріали шарів діелектрично ізотропні ( $\xi_j = 1$ ), то розв'язок (2.4) переходить у звичайний. В загальному випадку діелектрична проникність може бути комплексною величиною, отже і розв'язки (2.4) будуть комплексними.

Розклади потенціалів в шарах запишуться як

$$u_j(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ A_{lm}^{(j)} \rho^{v_{1l}^{(j)}} + B_{lm}^{(j)} \rho^{v_{2l}^{(j)}} \right] Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ , \quad (j=1, 2, 3, \dots, n), \quad (2.6)$$

при цьому в ядрі кулі слід прийняти  $B_{lm}^{(1)} = 0$ , оскільки при  $\rho \rightarrow 0$  необмежено зростає розв'язок  $B_{lm}^{(1)} = \rho^{-(1/2 + \sqrt{1/4 + \xi_1 l(l+1)})}$

Умови сполучення (1.7) на межах  $\rho_j = r_j/a$  набувають вигляду

$$A_{lm}^{(j)} \rho_j^{v_{1l}^{(j)}} + B_{lm}^{(j)} \rho_j^{v_{2l}^{(j)}} = A_{lm}^{(j+1)} \rho_j^{v_{1l}^{(j+1)}} + B_{lm}^{(j+1)} \rho_j^{v_{2l}^{(j+1)}}, \\ \varepsilon_j [A_{lm}^{(j)} v_{1l}^{(j)} \rho_j^{v_{1l}^{(j)}-1} + B_{lm}^{(j)} v_{2l}^{(j)} \rho_j^{v_{2l}^{(j)}-1}] = \\ = \varepsilon_{j+1} [A_{lm}^{(j+1)} v_{1l}^{(j+1)} \rho_j^{v_{1l}^{(j+1)}-1} + B_{lm}^{(j+1)} v_{2l}^{(j+1)} \rho_j^{v_{2l}^{(j+1)}-1}] \quad (2.7)$$

Відповідно змінюються і матриці переходу  $T_l^{(j)}$ , елементи яких набувають вигляду

$$t_{11,j}^{(l)} = [\varepsilon_{j+1} v_{2l}^{(j+1)} - \varepsilon_j v_{1l}^{(j)}] \rho_j^{[v_{1l}^{(j)} + v_{2l}^{(j+1)} - 1]}, \\ t_{12,j}^{(l)} = [\varepsilon_{j+1} v_{2l}^{(j+1)} - \varepsilon_j v_{2l}^{(j)}] \rho_j^{[v_{2l}^{(j)} + v_{2l}^{(j+1)} - 1]}, \\ t_{21,j}^{(l)} = [-\varepsilon_{j+1} v_{1l}^{(j+1)} + \varepsilon_j v_{1l}^{(j)}] \rho_j^{[v_{1l}^{(j)} + v_{1l}^{(j+1)} - 1]}, \\ t_{22,j}^{(l)} = [-\varepsilon_{j+1} v_{1l}^{(j+1)} + \varepsilon_j v_{2l}^{(j)}] \rho_j^{[v_{2l}^{(j)} + v_{1l}^{(j+1)} - 1]}, \quad (2.8)$$



$$\Delta_l^{(j)} = \varepsilon_{j+1} (v_{2l}^{(j+1)} - v_{1l}^{(j+1)}) / \rho_j^2.$$

В формулах (2.7) – (2.8) під діелектричними проникністями шарів слід розуміти їх значення в тангенціальному напрямку. Ця обставина впливає з умов неперервності тангенціальних складових векторів індукції на межах поділу шарів.

Тепер замість (1.13) для знаходження розкладу збурного потенціалу отримаємо вираз

$$u_p(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_m a g_{lm} [t_{11}^{(l)} + t_{21}^{(l)}] - \varepsilon_n f_{lm} [t_{11}^{(l)} v_{1l}^{(n)} + t_{21}^{(l)} v_{2l}^{(n)}]}{\varepsilon_m (l+1) [t_{11}^{(l)} + t_{21}^{(l)}] + \varepsilon_n [t_{11}^{(l)} v_{1l}^{(n)} + t_{21}^{(l)} v_{2l}^{(n)}]} \times \left(\frac{a}{r}\right)^{l+1} Y_l(\theta, \varphi) \quad (2.9)$$

Проілюструємо розроблену методику прикладами розрахунків. Розглянемо кулю в оболонці в однорідному полі, що діє вздовж вісі  $z$ . Прийmemo, що ядро кулі діелектрично-ізотропне і має дійсну діелектричну проникність, значення якої  $\varepsilon' = 10$ . Матеріал оболонки вважаємо діелектрично трансверсально ізотропним, для якого ступінь анізотропії характеризується відношенням  $\xi = \varepsilon_t / \varepsilon_r$ . Для  $\varepsilon_r$  прийняте значення  $\varepsilon_r = 5 + i$ , а для відношення радіусів значення  $r_1 / r_2 = 0,8$  і при цьому  $a = 1$  умовних одиниць. Залежність дійсної і уявної частин поляризованості від ступеня анізотропії показана на рис. 2, і при цьому уявна частина збільшена в 10 разів. Значення відношення  $\xi = 1$  відповідає ізотропному випадку. На рис 3 наведено таку ж саму залежність, але для значення  $\varepsilon_r = 10 + 2i$ .

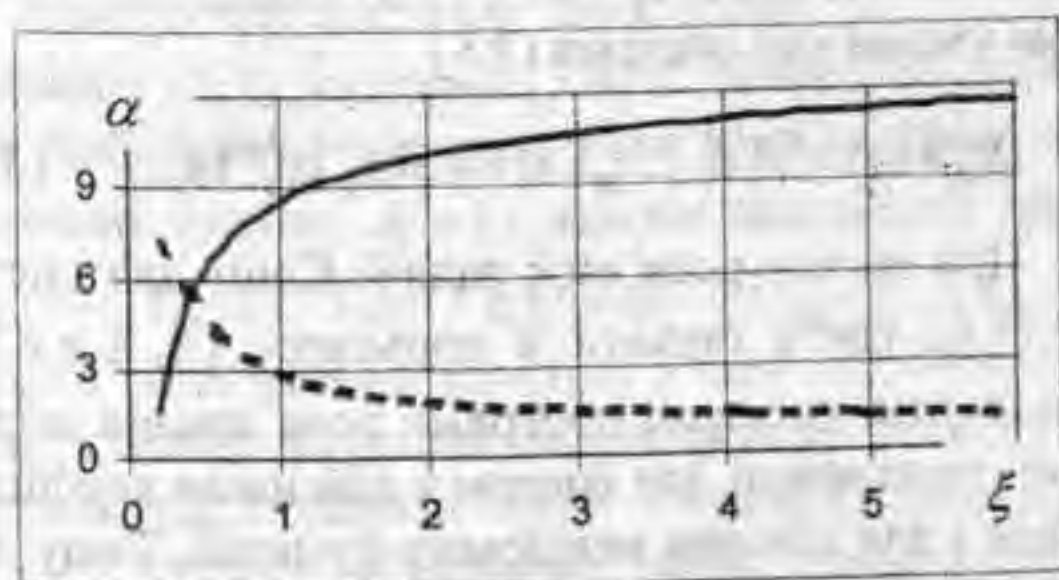


Рис. 2. Залежність поляризованості від ступеня анізотропії діелектричної проникності матеріалу оболонки в двошаровій кулі: для ядра  $\varepsilon = 10$ , для оболонки  $\varepsilon_r = 5 + i$ ;

—  $\text{Re}(\alpha)$ , —  $\text{Im}(\alpha)$ .

цьому, якщо з ростом  $\xi = \varepsilon_t / \varepsilon_r$  дійсна частина поляризованості зростає, то уявна частина зменшується. Із збільшенням абсолютного значення діелектричної проникності оболонки у два рази уявна частина поляризованості зменшується теж приблизно у два рази. Найбільш суттєвий вплив анізотропії спостерігаються в інтервалі зміни  $0 < \xi < 2$ , а коли  $\xi > 4$  значення і дійсної і уявної частин майже не змінюються, але суттєво відрізняються від випадку ізотропії.

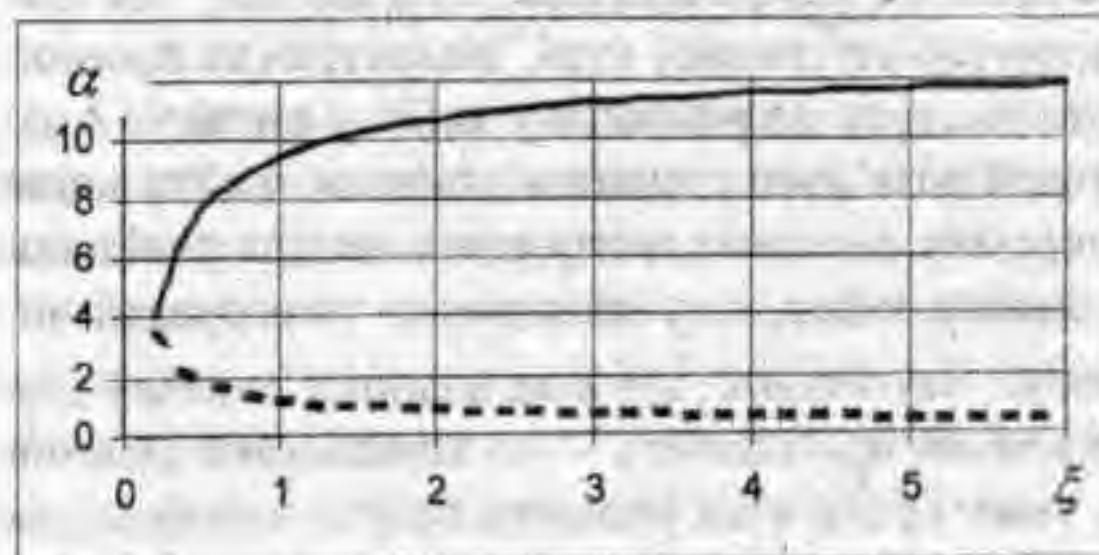


Рис. 3. Залежність поляризованості від ступеня анізотропії діелектричної проникності матеріалу оболонки в двошаровій кулі: для ядра  $\varepsilon = 10$ , для оболонки  $\varepsilon_r = 10 + 2i$ ;

—  $\text{Re}(\alpha)$ , —  $\text{Im}(\alpha)$ .

Отже, розроблена методика дозволяє досліджувати вплив на значення поляризованості, як кількості шарів, так і їх діелектричних властивостей.

### 3. Куля з неперервно-змінною в радіальному напрямку діелектричною проникністю в електростатичному полі

У випадку, коли діелектрична проникність залежить від координат, замість рівняння Лапласа для потенціалу в середині частинки потрібно розглядати більш загальне рівняння

$$\text{div}(\varepsilon \text{grad} u) = 0. \quad (3.1)$$

Далі вважаємо, що діелектрична проникність залежить тільки від радіальної координати  $r$ , тобто  $\varepsilon_1 = \varepsilon(r)$ . Запишемо рівняння (3.1) в розгорнутому вигляді

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[ \varepsilon(r) r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right] + \varepsilon(r) \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \right] = 0 \quad (3.2)$$

Як і раніш, розв'язки рівняння (3.2) шукаємо у вигляді ряду за сферичними гармоніками  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$



$$u(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l y_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.3)$$

Відокремлення змінних в (3.2) приводить до сімейства незалежних звичайних диференціальних рівнянь вигляду

$$\frac{d}{dr} \left[ \varepsilon(r) r^2 \frac{dy_{lm}(r)}{dr} \right] - \varepsilon(r) l(l+1) y_{lm}(r) = 0. \quad (3.4)$$

Рівняння (3.4) – це рівняння другого порядку зі змінними коефіцієнтами, і, на відміну від діелектрично-ізотропної кулі, діелектрична проникність входить до рівняння у явному вигляді. Аналітичні розв'язки рівняння вдається знайти лише в окремих випадках, тому рівняння для довільного закону зміни  $\varepsilon(r)$  доводиться інтегрувати чисельно. Зауважимо, що в загальному випадку діелектрична проникність – це комплексна величина, тому і розв'язки рівняння будуть комплекснозначними функціями дійсного аргументу. Маючи на увазі чисельне інтегрування зручно ввести безрозмірну змінну  $x = r/a$ , де  $a$  – зовнішній радіус кулі, а проміжок інтегрування тоді буде  $0 \leq x \leq 1$ . При цьому  $d/dr = (1/a)(d/dx)$ . Незважаючи на це, що при заміні  $r$  на  $x$  рівняння (3.4) зберігає свій вигляд:

$$\frac{d}{dx} \left[ \varepsilon(x) x^2 \frac{dy_{lm}(x)}{dx} \right] - \varepsilon(x) l(l+1) y_{lm}(x) = 0. \quad (3.5)$$

Для чисельного інтегрування рівняння (3.5) зручно подати як систему двох рівнянь у формі Коші

$$\begin{aligned} \frac{dy_{lm}(x)}{dx} &= \frac{1}{\varepsilon(x) x^2} z_{lm}(x), \\ \frac{dz_{lm}(x)}{dx} &= \varepsilon(x) l(l+1) y_{lm}(x). \end{aligned} \quad (3.6)$$

де введено функцію

$$z_{lm}(x) = \varepsilon(x) x^2 \frac{dy_{lm}(x)}{dx}$$

з тим, щоб не виконувати диференціювання залежності  $\varepsilon(x)$ . Зауважимо, що систему (3.6) можна застосовувати і для кусково-сталіх функцій  $\varepsilon(x)$ , розглянутих вище, оскільки умови неперервності розв'язків і їх похідних будуть виконуватись автоматично. Одночасно похідні від кусково-сталіх функцій будуть мати розриви в точках стрибків функції  $\varepsilon(x)$ , а тому рівняння (3.4) безпосередньо застосовувати неможливо. Цією об-

ставиною і обумовлено запис системи у вигляді (3.6).

Система (3.6) незручна для чисельного інтегрування. Це пов'язано з кількома обставинами. По-перше, гранична умова в початку координат при  $x=0$  потребує, щоб розв'язок був обмежений, тобто  $|y_{lm}| < \infty$ , і її без додаткових міркувань застосувати неможливо. По-друге в цій же точці система стає невизначною, що є загальною обставиною при розгляді диференціальних рівнянь у сферичних (полярних) координатах. Тому на практиці при чисельному інтегруванні застосовують спеціальні прийоми. В цій роботі для можливості застосування чисельного інтегрування поступимо наступним чином.

Виділимо в околиці нуля малу кулю з безрозмірним радіусом  $x_0 \ll 1$ . В цій кулі діелектричну проникність можна вважати сталою, тобто  $\varepsilon(x) \approx \varepsilon(x_0) = \text{const}$ . Тоді в рівнянні (3.5)  $\varepsilon(x_0)$  можна винести за знак диференціювання і скоротити, а обмежений в початку координат розв'язок отриманого рівняння Лапласа буде мати вигляд  $A_l x^l$ , де  $A_l$  – деяка стала. На поверхні цієї виділеної кулі повинні виконуватись умови спряження, які матимуть вигляд

$$A_l x_0^l = y_{lm}(x_0), \quad \varepsilon(x_0) l x_0^{l-1} A_l = \varepsilon(x_0) \frac{\partial y_{lm}}{\partial x} \Big|_{x=x_0}, \quad (3.7)$$

або враховуючи означення функції  $z_{lm}(x)$  та скорочуючи на  $\varepsilon(x_0)$  отримаємо

$$l x_0^{l-1} A_l = \varepsilon(x_0) x_0^2 z_{lm}(x_0). \quad (3.8)$$

Отже з рівностей (3.7), (3.8) знаходимо початкові умови для системи (3.6)

$$y_{lm}(x_0) = A_l x_0^l, \quad z_{lm}(x_0) = \varepsilon(x_0) x_0^{l+1} l A_l. \quad (3.9)$$

При цьому розв'язок задачі Коші для системи (3.6) треба шукати в проміжку  $(x_0 \leq x \leq 1)$ . Стандартні чисельні програми розв'язання задачі Коші призначені для систем з дійсними коефіцієнтами і для дійсних невідомих функцій. Тому для їх застосування перейдемо від комплексної системи (3.6) до дійсної. Для цього покладемо

$$\begin{aligned} y_{lm} &= y_{lm}^{(1)} + i y_{lm}^{(2)}, \quad z_{lm} = z_{lm}^{(1)} + i z_{lm}^{(2)}, \\ \varepsilon(x) &= \varepsilon'(x) + i \varepsilon''(x). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Відокремлюючи дійсну і уявну частини в системі (3.6) будемо мати систему четвертого порядку (штрихом позначаємо похідну по  $x$ )



$$\begin{aligned}\frac{dy_{lm}^{(1)}}{dx} &= \frac{1}{x^2} \frac{\varepsilon'(x)z_{lm}^{(1)} - \varepsilon''(x)z_{lm}^{(2)}}{[\varepsilon'(x)]^2 + [\varepsilon''(x)]^2}, \\ \frac{dy_{lm}^{(2)}}{dx} &= \frac{1}{x^2} \frac{\varepsilon'(x)z_{lm}^{(2)} + \varepsilon''(x)z_{lm}^{(1)}}{[\varepsilon'(x)]^2 + [\varepsilon''(x)]^2}, \\ \frac{dz_{lm}^{(1)}}{dx} &= l(l+1)[\varepsilon'(x)y_{lm}^{(1)} - \varepsilon''(x)y_{lm}^{(2)}], \\ \frac{dz_{lm}^{(2)}}{dx} &= l(l+1)[\varepsilon'(x)y_{lm}^{(2)} + \varepsilon''(x)y_{lm}^{(1)}].\end{aligned}\quad (3.11)$$

Відповідним чином змінюються і початкові умови, а замість (3.9) матимемо

$$y_{lm}^{(1)}(x_0) = A_l x_0^l, y_{lm}^{(2)}(x_0) = 0, \\ z_{lm}^{(1)}(x_0) = \varepsilon'(x_0) l x_0^{l+1} A_l, z_{lm}^{(2)}(x_0) = \varepsilon''(x_0) l x_0^{l+1} A_l. \quad (3.12)$$

Як і раніш, позначимо потенціал довільного зовнішнього електростатичного поля через  $u_0(r, \theta, \varphi)$ . Тоді на поверхні кулі він буде задавати деяку функцію  $F(\theta, \varphi) = u_0(a, \theta, \varphi)$ , яку можна записати у вигляді (1.6), а збурний потенціал у вигляді (1.5), де слід опустити верхній індекс.

На поверхні кулі повинні справджуватись умови спряження

$$u(a, \theta, \varphi) = u_p(a, \theta, \varphi) + u_0(a, \theta, \varphi),$$

$$\varepsilon(a) \frac{\partial u(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \Big|_{r=a} = \varepsilon_m \left[ \frac{\partial u_p(r, \theta, \varphi)}{\partial r} + \frac{\partial u_0(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \right]_{r=a}. \quad (3.13)$$

Підставляючи відповідні розклади потенціалів за сферичними гармоніками у рівняння (3.13) отримаємо для кожного члену розкладу відповідну алгебраїчну систему. Зауважимо, що оскільки рівняння (3.5), системи (3.6) є лінійні, то достатньо побудувати чисельні розв'язки системи при значенні сталих  $A_l = 1$ , які ми позначимо через  $\bar{y}_{lm}(x)$ ,  $\bar{z}_{lm}(x)$ . Тоді і функції  $A_l \bar{y}_{lm}(x)$ ,  $A_l \bar{z}_{lm}(x)$  будуть розв'язками рівнянь, а певний вибір значень сталих дозволяє задовольнити граничним умовам на поверхні кулі. Отримані розв'язки  $\bar{y}_{lm}(x)$ ,  $\bar{z}_{lm}(x)$  відіграють роль трансляційних матриць, які передають початкові умови з початкової точки інтервалу інтегрування на останню.

Отже, з умов на поверхні кулі матимемо сукупність незалежних лінійних алгебраїчних систем для знаходження невідомих коефіцієнтів розкладів шуканих потенціалів

$$A_l y_{lm}(1) - B_{lm} = f_{lm},$$

$$\varepsilon(1) \frac{d\bar{y}_{lm}(x)}{dx} \Big|_{x=1} A_l + \varepsilon_m(l+1)B_{lm} = \varepsilon_m a g_{lm}, \quad (3.14)$$

де, як і раніш,  $g_{lm}$  - коефіцієнти розкладу похідної  $\partial u_0 / \partial r$  потенціалу зовнішнього поля, обчисленої на поверхні кулі.

Враховуючи вираз для похідної  $d\bar{y}_{lm}/dx$ , перепишемо систему (3.14) у вигляді

$$\bar{y}_{lm}(1)A_l - B_{lm} = f_{lm},$$

$$\bar{z}_{lm}(1)A_l + \varepsilon_m(l+1)B_{lm} = \varepsilon_m a g_{lm}. \quad (3.15)$$

Система (3.15) повністю визначає коефіцієнти розкладів потенціалу всередині кулі і збурного потенціалу. Отже задача розв'язана.

Зауважимо, що на відміну від діелектрично-однорідної кулі в систему для визначення сталих діелектрична проникність кулі в явному вигляді не входить. Коефіцієнти розкладу збурного потенціалу будуть

$$B_{lm} = \frac{\varepsilon_m a g_{lm} - f_{lm} \bar{z}_{lm}(1)}{\varepsilon_m(l+1)\bar{y}_{lm}(1) + \bar{z}_{lm}(1)}. \quad (3.16)$$

Розглянемо докладніше однорідне поле з потенціалом  $u_0 = -E_0 z = -E_0 r \cos \theta$ , діюче вздовж вісі  $z$ . Тоді вираз для збурного потенціалу набуває вигляду (індекс "lm" опускаємо)

$$\begin{aligned}u_p &= -E_0 a \cos \theta \frac{\varepsilon_m - \bar{z}(1)}{2\varepsilon_m \bar{y}(1) + \bar{z}(1)} \left(\frac{1}{x}\right)^2 = \\ &= (E_0 r \cos \theta) a^3 \frac{\bar{z}(1) - \varepsilon_m}{2\varepsilon_m \bar{y}(1) + \bar{z}(1)} \left(\frac{1}{r}\right)^3.\end{aligned}\quad (3.17)$$

Звідси знаходимо вираз для поляризованості діелектрично-неоднорідної кулі

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\bar{z}(1) - \varepsilon_m}{2\varepsilon_m \bar{y}(1) + \bar{z}(1)}. \quad (3.18)$$

Для діелектрично-однорідної кулі при  $\varepsilon(x) = \varepsilon_1$  з тим, щоб формула (3.18) переходила у формулу для обчислення поляризованості діелектрично-однорідної кулі, повинно бути  $\bar{y}(1) = 1$ ,  $\bar{z}(1) = \varepsilon_1$ .

Зауважимо, що отримані результати безпосередньо узагальнюються на випадок трансверсальної анізотропії діелектричної проникності. Для цього досить виходити не з рівняння (3.5), а з рівняння

$$\frac{d}{dx} \left[ \varepsilon_r(x) x^2 \frac{dy_{lm}(x)}{dx} \right] - \varepsilon_r(x) l(l+1) y_{lm}(x) = 0, \quad (3.19)$$



яке зводиться до системи

$$\begin{aligned} \frac{dy_{lm}(x)}{dx} &= \frac{1}{\varepsilon_r(x)x^2} z_{lm}(x), \\ \frac{dz_{lm}(x)}{dx} &= \varepsilon_l(x)l(l+1)y_{lm}(x). \end{aligned} \quad (3.20)$$

При цьому інші формули повністю зберігають свій вигляд, але сталу  $A_l$  слід вважати комплексним числом.

Точність розрахунків буде залежати від якості обчислювальної програми та вибору радіуса центральної кулі  $x_0$ . Про точність, яка при цьому досягається дозволяють судити результати, які наведені в табл. 1, 2. Розглядалася однорідна куля з двома значеннями діелектричної проникності. В таблицях для порівняння наведені точні значення поляризованості  $\alpha$  та знайдені шляхом чисельного інтегрування поляризованості  $\alpha_c$ . В таб-

лицях також наведені значення функцій  $\tilde{y}(1)$  та  $\tilde{z}(1)$ , які, як вказувалось вище повинні приймати значення  $\tilde{y}(1) = 1$ ,  $\tilde{z}(1) = \varepsilon_1$ . Розрахунки виконані за допомогою програми, яка реалізує метод Рунге-Кутта-Мерсона з контрольованою точністю.

З наведених даних випливає, що похибка знаходження поляризованості чисельним методом практично не залежить від значення уявної частини діелектричної проникності, але досить суттєво залежить від значення  $x_0$ , причому ця залежність не монотонна, і найбільша похибка має місце при  $x_0 = 0,05$ , а при  $x_0 = 0,10$  усі цифри співпадають. Але і в самому поганому випадку відносна похибка досить мала. Також і функції  $\tilde{y}(x)$  та  $\tilde{z}(x)$  приймають правильні значення.

Таблиця 1

Значення поляризованості діелектрично-однорідної кулі з  $\varepsilon = 10 + i$  при різному виборі розмірів центрального ядра.

| $x_0$ | $\alpha_c$        | $\alpha$         | $\tilde{y}(1)$  | $\tilde{z}(1)$    |
|-------|-------------------|------------------|-----------------|-------------------|
| 0,01  | 9,4825 + i 0,2574 | 9,4464 + i 0,600 | 1,010 + i 0,000 | 10,201 + i 1,0201 |
| 0,05  | 9,6191 + i 0,2476 | 9,4464 + i 0,600 | 1,050 + i 0,000 | 11,025 + i 1,1025 |
| 0,10  | 9,4464 + i 0,600  | 9,4464 + i 0,600 | 1,000 + i 0,000 | 10,000 + i 1,0000 |

Таблиця 2

Значення поляризованості діелектрично-однорідної кулі з  $\varepsilon = 10 + 2i$  при різному виборі розмірів центрального ядра.

| $x_0$ | $\alpha_c$        | $\alpha$          | $\tilde{y}(1)$  | $\tilde{z}(1)$    |
|-------|-------------------|-------------------|-----------------|-------------------|
| 0,01  | 9,5452 + i 0,5044 | 9,5097 + i 0,5095 | 1,010 + i 0,000 | 10,201 + i 2,0402 |
| 0,05  | 9,6798 + i 0,4850 | 9,5097 + i 0,5095 | 1,050 + i 0,000 | 11,025 + i 2,2051 |
| 0,10  | 9,5097 + i 0,5095 | 9,5097 + i 0,5095 | 1,000 + i 0,000 | 10,000 + i 1,0000 |

Наведені приклади свідчать про можливість практичної реалізації розробленої методики, що дозволяє оцінити вплив неоднорідності діелектричної проникності. Як приклад приймемо залежність діелектричної проникності у вигляді кусочно-сталогої функції вигляду

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_1, & \text{якщо } x \leq x_1 \\ \varepsilon_2, & \text{якщо } x > x_1 \end{cases} \quad (3.21)$$

Отже розглядається куля в оболонці, для якої маємо аналітичний розв'язок, який дається формулою (1.16). Результати розрахунків для деяких значень відношення  $x_1/x_2 = r_1/r_2$ , де  $r_1$  - радіус

ядра,  $r_2 = a$  - зовнішній радіус кулі, наведено в табл. 3. При розрахунках прийнято, що  $\varepsilon_1 = 10 + 1,5i$ ,  $\varepsilon_2 = 8 + i$ ,  $x_0 = 0,1$ .

Таблиця 3

Поляризованість кулі в оболонці (порівняння чисельного і аналітичного розв'язку).

| $r_1/r_2$ | Чисельний розв'язок $\alpha_c$ | Аналітичний розв'язок $\alpha$ |
|-----------|--------------------------------|--------------------------------|
| 0,5       | 9,0060 + 0,3770 i              | 8,9212 + 0,3752 i              |
| 0,8       | 9,2230 + 0,3804 i              | 9,1776 + 0,3830 i              |
| 0,9       | 9,3373 + 0,3851 i              | 9,3126 + 0,3851 i              |



З наведених результатів випливає, що і в цьому випадку розроблена методика дає добре узгодження з аналітичним розв'язком, і похибка визначення як дійсної, так і уявної частин поляризованості не перевищує 3%.

### Висновки

Таким чином, в роботі запропоновано і практично реалізовано методику розрахунку поляризованості структурно-неоднорідних кульових частинок, в тому числі з діелектрично трансвесально анізотропними шарами та з довільною залежністю діелектричної функції від радіальної координати.

Наведені приклади тестових розрахунків підтверджують її високу ефективність. Це відкриває можливість теоретичних досліджень (проведення чисельних експериментів) для визначення як характеристик взаємодії електромагнітного випромінювання з окремими частинками або їх ансамблями так і діелектричної функції матрично-дисперсних систем з такими включеннями. Така обставина є особливо суттєвою при дослідженні біологічних об'єктів (клітин, бактерій) методами оптичної або діелектричної спектроскопії, моделями яких можуть служити структурно неоднорідні кулі із врахуванням діелектричної анізотропії.

### Список використаних джерел

1. Борн К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света маленькими частицами. М: Мир, 1986. - 664 с.
2. Grechko L.G, Malnev V.N., Shkoda N.G, Shostak S.V. Electrodynamical properties of the matrix disperse systems with two-layered inclusions // Chemistry, Physics and Technology of Surfaces. - 2002, V.7. - P. 89-95.
3. Гречко Л.Г., Лерман Л. Б., Покотило О.Я., Шкода Н. Г., Шостак С. В. Узагальнений метод ефективного середовища для розрахунку діелектричної проникності неоднорідних середовищ // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. - 2005. - №3. - С.402-412.
4. Гончарук Ю.С., Гречко Л.Г., Гришук О.Ю., Лерман Л.Б., Шостак С.В. Максвелл-Вагнерівська поляризація матричних дисперсних систем з кульовими напівпровідниковими включеннями в електричному полі // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. - 2006. - №2. - С. 376-384.

5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. - М.: «Наука», 1970. - 856 с.
6. Moroz A. A recursive transfer-matrix solution for a dipole radiating and outside a stratified sphere // Annals of Physics. - 2005. - 315. - P. 352-418.
7. Hongxing Xu. Surface plasmon Photonics. - Thesis for the degree of doctor of philosophy. - Goteborg University, 2002. - 92 p.
8. Wu Z.S., Wang Y.P. Electromagnetic scattering for multi-layered sphere: recursive algorithm // Radio Sci. - 1991, V. 26. - P. 1393-1401.
9. Лерман Л.Б. Применение уравнений плоской задачи теории упругости к исследованию колебаний протяженных слоистых плит с внутренними линейными опорами // Прикл. механика, 1994. - 30, № 6. С. 66 - 69.
10. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Шкода Н.Г. Розсіювання електромагнітного випромінювання на багат шаровій кулі // Вісник Київського університету. Сер.фіз.-мат. - 2004. - №3. - С. 376-384.
11. Gurwich I., Kleiman M., Shiloah N., Cohen A. Scattering of electromagnetic radiation by multilayered spheroidal particles: recursive procedure // Applied optics. - 2000. - Vol. 39, No. 3. - P. 470-477.
12. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Шкода Н.Г. Багат шаровий еліпсоїд в електростатичному полі // Вісник Київського університету. Сер.фіз.-мат. - 2004. - №1. - С. 386-394.
13. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Білокриницька Л.М., Шостак С.В. Поверхневі моди в багат шарових частинках еліпсоїдальної форми // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. - 2006. - №4. - С.416-425.

Надійшла до редколегії 22.03.07



УДК 535.375.54

Губанов В.О.,<sup>1\*</sup> канд. ф.-м. н., доц.,  
Скіпа Т.А.,<sup>2</sup> докт. природн. н.,  
Білий М.М.,<sup>1</sup> канд. ф.-м. н., с.н.с.,  
Дмитренко О.П.,<sup>1</sup> канд. ф.-м. н., доц.,  
Ковригін С.В.,<sup>3</sup>  
Комарова Л.О.,<sup>1</sup>  
Куліш М.П.,<sup>1</sup> докт. ф.-м. н., проф.,  
Лізунова С.В.,<sup>1</sup>  
Покропивний В.В.<sup>3</sup>

### Вплив хіральності на симетрію коливальних мод нітридборних нанотрубок та його прояв у спектрах комбінаційного розсіювання світла

Вперше аналітично розраховано форми фундаментальних нормальних коливань нескінченних двокомпонентних крісельних (3, 3) та зигзагних (3, 0) нітридборних одностінних нанотрубок (BN-SWNT). Виявлено ефект хіральної анізотропії коливальних мод BN-SWNT. Він призводить до виникнення дублету в спектрі КР світла в області  $1380.4 \text{ см}^{-1}$ , що відповідає двократно виродженому коливанию  $(E_1)_2$  нітридборенового шару. Величина хірального розщеплення визначається діаметрами крісельних та зигзагних NT.

З даних комп'ютерних розрахунків зроблено висновок, що компонента дублету  $1377.5 \text{ см}^{-1}$  обумовлена коливанням  $(A_1^*)_4$  крісельних NT, де зміщення атомів перпендикулярні осям трубок, а компонента  $1359.0 \text{ см}^{-1}$  – коливанням  $(A_1)_2$  зигзагних NT, при якому зміщення атомів паралельні осям трубок.

Показано, що співвідношення інтенсивностей компонент хірального дублету можна використовувати для діагностики хірального складу NT, а величини хірального розщеплення – для діагностики їх діаметрів.

Ключові слова: крісельні та зигзагні нанотрубки, форми фундаментальних нормальних коливань, хіральне розщеплення, нітридборен, макромолекулярний клас.

\* E-mail: gubanov@univ.kiev.ua

<sup>1</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

<sup>2</sup> Institut für Festkörperphysik Forschungszentrum, Karlsruhe, Germany

<sup>3</sup> Ін.-т проблем матеріалознавства ім. І.М.

Gubanov V.O.,<sup>1\*</sup> Ph. D., docent,  
Skipa T.A.,<sup>2</sup> Ph. D.,  
Biliy M.M.,<sup>1</sup> Ph. D., senior researcher,  
Dmytrenko O.P.,<sup>1</sup> Ph. D., docent,  
Kovrygin C.V.,<sup>3</sup>  
Komarova L.O.,<sup>1</sup>  
Kulish M.P.,<sup>1</sup> Ph.D., professor,  
Lizunova S.V.,<sup>1</sup>  
Pokropyvnyi V.V.<sup>3</sup>

### The chiral effect on vibrational mode symmetry of boron nitride nanotubes and its manifestation in Raman spectra

For the first time the forms of fundamental normal vibrations of infinite two component armchair (3, 3) and zigzag (3, 0) boron nitride single-walled nanotubes (BN-SWNT) have been calculated analytically. The effect of chiral anisotropy of vibrational modes of BN-SWNT symmetry has been discovered. It causes the appearance of doublet near  $1380.4 \text{ cm}^{-1}$  in Raman spectrum that corresponds to the two-fold degenerated  $(E_1)_2$  vibration of nitrideborene layer. The value of chiral splitting is determined by diameters of armchair and zigzag NT.

From the computer calculations it is concluded that the doublet component of  $1377.5 \text{ cm}^{-1}$  is caused by  $(A_1^*)_4$  vibration of armchair NT, where the displacements of atoms are perpendicular to the tube axis, and the component of  $1359.0 \text{ cm}^{-1}$  – by  $(A_1)_2$  vibration of zigzag NT with the displacements of atoms parallel to the tube axis.

It is shown that the intensity relationship of chiral doublet components can be used for of the NT chiral content diagnostics and the chiral splitting values – for diagnostics of their diameters.

Key words: armchair and zigzag nanotubes, forms of fundamental normal vibrations, chiral splitting, nitrideborene, macromolecular class.



Хіральна анізотропія коливальних мод однокомпонентних вуглецевих одностінних нанотрубок, C-SWNT, за спектрами комбінаційного розсіяння світла (КРС) досліджена в [1]. В даній роботі на прикладі нітридборних одностінних нанотрубок, BN-SWNT, розглянуто вплив хіральності на симетрію коливальних мод двокомпонентних нанотрубок, що так само, як і для однокомпонентних нанотрубок, також проявляється у спектрах КРС.

Симетрія нескінчених BN-SWNT, а відтак симетрія та розподіл нормальних коливальних мод за незвідними представленнями груп симетрії, ще більше, ніж у випадку нескінчених C-SWNT залежать від їх діаметра та хіральності – напрямку осі згортання при утворенні BNNT нітридборенового шару (нітридборену), що є нітридборним аналогом графенового шару (графену).

Ми вперше звертаємо увагу на те, що, як і у випадку C-SWNT, розподіл фундаментальних коливальних мод за типами симетрії, що визначаються групами макромoleкулярного класу, є суттєво різним для груп з непарним і парним  $n$  в індексах хіральності:  $(n, n)$  – для крісельних і  $(n, 0)$  – для зигзагних BN-SWNT. При цьому структури груп з парним  $n$ , як і у випадку груп макромoleкулярних класів C-SWNT, дещо відрізняються для парних і непарних значень  $n/2$ .

В даній роботі розглянемо розподіл фундаментальних коливальних мод крісельної і зигзагної BN-SWNT з непарним  $n$  за незвідними представленнями груп  $C_{2nh}$  і  $C_{2nv}$ , відповідно, та побудуємо форми коливань для кожної з цих мод.

В якості крісельної BN-SWNT з непарним  $n$  виберемо, як приклад, NT(3, 3), а в якості зигзагної з непарним  $n$  – NT(3, 0).

На рис. 1 представлені: фрагмент структури у двох проекціях крісельної NT (3, 3) (а, б), розгортка фрагменту крісельної NT (3, 3) (в), фрагмент структури у двох проекціях зигзагної NT (3, 0) (г, д) та розгортка фрагменту зигзагної NT (3, 0) (е). Фрагменти структур крісельної NT (3, 3) та зигзагної NT (3, 0) наведені на рис. 1 в одному й тому ж масштабі. Розгортки крісельної NT (3, 3) і зигзагної NT (3, 0) також представлені в одному масштабі, що однак відрізняється від масштабу зображення фрагментів структур. На фрагментах структур і розгортках фрагментів вказані номери атомів бору (зображені темними кружками) та атомів азоту (зображені світлим кружками), що формують елементарні комірки. Самі ж елементарні комірки обрані як такі, що обмежені перпендикулярними до осей NT

площинами, які містять центр інверсії для крісельної NT (3, 3) і проходять через атом бору 1 для зигзагної NT (3, 0). Перпендикулярні до осей трубки площини, що містять точки інверсії і для NT (3, 3) на рис. 1 позначені символом  $\sigma(i)$ . Ці площини не є площинами симетрії. Площини симетрії  $\sigma_h$  розташовані перпендикулярно до осей трубок паралельно площинам  $\sigma(i)$  на однакових відстанях  $|\vec{a}_1|/4$  від сусідніх з ними площин  $\sigma(i)$ . Елементарні комірки на рис. 1 виділені тонкими лініями. Для NT (3, 3) вони проходять через площини  $\sigma(i)$ , що містять точку інверсії, а для NT (3, 0) – через атом бору 1. На рис. 1 (б і д) зображені також ортогональні базисні вектори зміщень атомів з положень рівноваги  $\vec{z}_i$ ,  $\vec{u}_i$  та  $\vec{v}_i$ , що направлені вздовж осей NT, вздовж радіусів NT та перпендикулярно обом з вищезазначених напрямків (на рис. 1, б і рис. 1, д вони нарисовані для атомів бору 1, 2 і 3, і атомів азоту 1, 2 і 3).

Розподіли фундаментальних коливальних мод крісельної BN-NT (3, 3) та зигзагної BN-NT (3, 0) за незвідними представленнями груп  $C_{6h}$  і  $C_{6v}$ , відповідно, як неважко бачити, будуть наступними:

$$\Gamma_{\text{кр}}(3, 3) = 4A_1^+ + 2A_1^- + 2A_2^+ + 4A_2^- + 4(B_1^+ + B_1^-) + 2(B_1^+ + B_1^-) + 2(B_2^+ + B_2^-) + 4(B_2^+ + B_2^-)$$

або

$$\Gamma_{\text{кр}}(3, 3) = 4A_1^+ + 2A_1^- + 2A_2^+ + 4A_2^- + 4E_1^+ + 2E_1^- + 2E_2^+ + 4E_2^-$$

(комплексно спряжені одновимірні представлення  $B_i^+$  і  $B_{i+2}^-$  ( $i=1, 2$ ), що записані в круглих дужках, за рахунок інваріантності енергетичних станів до інверсії часу об'єднуються в двовимірні  $E_i^{\pm}$ )

і

$$\Gamma_{\text{зг}}(3, 0) = 4A_1 + 4A_2 + 2A_3 + 2A_4 + 6E_1 + 6E_2,$$

в тому числі для мод невластних коливань акустичного типу (трьох мод, що відповідають для  $\mathbf{k}=0$  зміщенням трубок або їх трансляціям вздовж координатних осей  $0z$ ,  $0x$  і  $0y$ )

$$\Gamma_{\text{кр}}(3, 3) = A_1^- + (B_2^+ + B_4^-) = A_1^- + E_2^-,$$

$$\Gamma_{\text{зг}}(3, 0) = A_1 + E_2,$$

де моди  $E_1^+$  і  $E_2^-$  є двократно виродженими, для моди невластних коливань торсійного типу (однієї моди, яка відповідає для  $\mathbf{k}=0$  поворотам трубок або ротаціям навколо їх осей, що співпадають з осями згортки нітридборенових шарів або, в нашому випадку, навколо координатної осі  $0z$ )



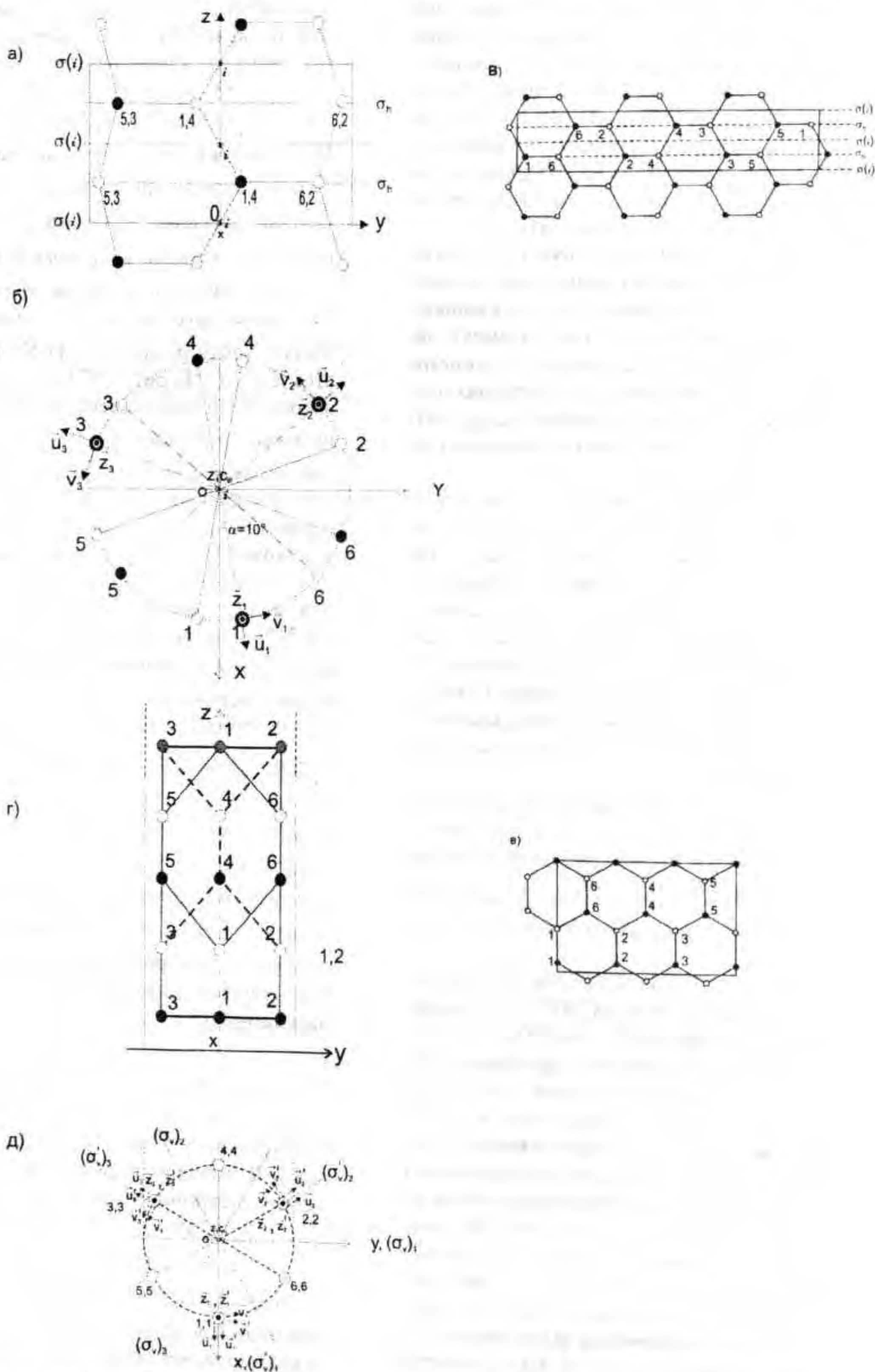


Рис. 1. Структура крісельної та зигзагної BN-SWNT з  $n=3$ : а, б – фрагмент структури крісельної NT (3, 3) у двох проекціях; в – розгортка фрагменту структури крісельної NT (3, 3); г, д – фрагмент структури зигзагної NT (3, 0) та е – розгортка фрагменту структури зигзагної NT (3, 0).



$$\Gamma_{tors}(3, 3) = A_1^-(rot),$$

$$\Gamma_{tors}(3, 0) = A_3^-(rot)$$

і для оптичних коливальних мод –

$$\Gamma_{opt}(3, 3) = 3A_1^+ + A_1^- + 2A_2^+ + 4A_2^- + 4(B_1^+ + B_3^+) + \\ + 2(B_1^- + B_3^-) + 2(B_2^+ + B_4^+) + 3(B_2^- + B_4^-)$$

або

$$\Gamma_{opt}(3, 3) = 3A_1^+ + A_1^- + 2A_2^+ + 4A_2^- + 4E_1^+ + 2E_1^- + 2E_2^+ + \\ + 3E_2^-$$

і

$$\Gamma_{opt}(3, 0) = 3A_1 + 4A_2 + A_3 + 2A_4 + 6E_1 + 5E_2.$$

Підкреслимо, що для одноперіодичних кристалів, якими є нескінченні нанотрубки або нескінченні полімерні ланцюги, існують не тільки невласні фундаментальні торсійні моди, а цілі дисперсійні гілки коливальних мод торсійного типу (одна гілка для однієї нанотрубки або для одного полімерного ланцюга), що для  $k \neq 0$  характеризуються частотами  $\omega_{tors}(k) \neq 0$ .

Згідно з правилами відбору в спектрах КР крісельної BN-NT (3, 3), активні 9 фундаментальних нормальних коливань (з урахуванням кратностей виродження – 15 фундаментальних коливальних мод):

$$\Gamma_{Rum}(3, 3) = 3A_1^+ + 4(B_1^+ + B_3^+) + 2(B_2^+ + B_4^+) = \\ = 3A_1^+ + 4E_1^+ + 2E_2^+,$$

а в спектрах КР зигзагної BN-NT (3, 0) активні 14 фундаментальних нормальних коливань (з урахуванням кратностей виродження – 25 фундаментальних коливальних мод):

$$\Gamma_{Rum}(3, 0) = 3A_1^+ + 6E_1^+ + 5E_2^+.$$

В спектрах ІЧ-поглинання крісельної BN-NT (3, 3), активні 4 фундаментальних нормальних коливання:

$$\Gamma_{IR}(3, 3) = A_1^- + 3(B_2^- + B_4^-) = A_1^- + 3E_2^-,$$

а зигзагної BN-NT (3, 0) – 8 фундаментальних нормальних коливань:

$$\Gamma_{IR}(3, 0) = 3A_1 + 5E_2$$

(з урахуванням кратностей виродження в спектрі ІЧ-поглинання крісельної BN-NT (3, 3) активні 7 фундаментальних коливальних мод, а в спектрі ІЧ-поглинання зигзагної BN-NT (3, 0) – 13 фундаментальних коливальних мод).

Цікаво відмітити, що для зигзагних BN-SWNT (3, 0) 8 фундаментальних коливань ( $3A_1 + 5E_2$ ) активні одночасно і в спектрах КР, і в спектрах ІЧ-поглинання.

Обчислимо тепер форми фундаментальних нормальних коливань. Це неважко зробити, скориставшись стандартною методикою застосування оператора проектування на незвідні представлення групи макромoleкулярного класу [1] для ортогональних базисних наборів твірних функцій – векторів в просторі

зміщень атомів елементарних комірок BN-SWNT, що зображені на рис. 1 для крісельної NT (3, 3) і зигзагної NT (3, 0).

Спочатку розрахуємо форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної крісельної BN-SWNT (3, 3), симетрія макромoleкулярного класу якої описується точковою групою  $C_{6h}$ . За допомогою оператора проектування на незвідні представлення групи  $C_{6h}$  визначимо симетризовані зміщення або, що те ж саме, координати симетрії – інваріантні векторні функції, що перетворюються за незвідними представленнями групи  $C_{6h}$ . Число лінійно незалежних симетризованих зміщень для кожного типу симетрії дорівнює числу коливальних мод даного типу симетрії, але симетризовані зміщення для кожного з типів симетрії не обов'язково повинні бути ортогональними – вони можуть бути і не ортогональними. Далі для кожного типу симетрії будеться ортогональна система лінійних комбінацій симетризованих зміщень, і вже ця система представляє собою форми нормальних коливань.

Перш за все врахуємо, що підґратки двокомпонентних BN-SWNT симетрично рівноправні. Це означає, що самі по собі вони мають однакові форми нормальних коливань. Отже, кожне сумарне нормальне коливання NT буде або симетричною лінійною комбінацією нормальних коливань підґраток (тобто синфазним коливанням підґраток), або їх антисиметричною комбінацією (коливанням підґраток в протифазі).

При побудові форм фундаментальних нормальних коливань кожної з підґраток двокомпонентних крісельних BN-NT з симетрією макромoleкулярних класів, що описується точковими групами  $C_{2nh}$ , двократно вироджені коливання, на відміну від нормальних коливань однокомпонентних C-SWNT [1], утворюються при врахуванні інваріантності енергетичних станів до інверсії часу і їх симетрія, як двократно вироджених коливань, визначається в результаті об'єднання комплексно спряжених одновимірних незвідних представлень абелевих груп  $C_{2nh}$ .

Для знаходження форм нормальних коливань із зміщеннями атомів в перпендикулярних до осей трубок напрямках зручно скористатись операторним рівнянням

$$\hat{R}_s \psi(\mathbf{r}) = \psi(S^{-1}\mathbf{r}), \quad (1)$$

де  $\hat{R}_s$  – оператор, що діє на хвильову функцію  $\psi(\mathbf{r})$  і  $S$  – операція перетворення аргументу



Для нашого випадку з рівняння (1) маємо

$$\hat{R}_S \mathbf{r} = S^{-1} \mathbf{r} \quad (2)$$

і, якщо зважити на те, що для оператора повороту на кут  $\varphi$

$$\hat{R}_S \psi(\mathbf{r}) = e^{i\varphi} \psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

то в нашому випадку

$$\hat{R}_S \mathbf{r} = e^{i\varphi} \mathbf{r}, \quad (4)$$

звідки одержимо

$$e^{i\varphi} \mathbf{r} = S^{-1} \mathbf{r}, \quad (5)$$

тобто, наприклад, для зміщень атомів В

$$e^{i\varphi} \mathbf{u}_2 = S^{-1} \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_2', \quad (6)$$

де  $\mathbf{u}_2' \parallel \mathbf{u}_1$ .

Очевидно також, що при побудові функцій-партнерів акустичного двократно виродженого коливання BN-SWNT (3, 3), а, відповідно, і інших двократно вироджених коливань, в лінійних комбінаціях з перпендикулярних осям трубок симетризованих зміщень необхідно також врахувати комплексні множники  $e^{i2\pi/36}$  для зміщень атомів В і  $e^{-i2\pi/36}$  для зміщень атомів N (наприклад, для атомів В  $e^{i2\pi/36}(\mathbf{u}_1')^B = (\mathbf{u}_1'')^B$ , де  $(\mathbf{u}_1'')^B \parallel OX$ , і для атомів N  $e^{-i2\pi/36}(\mathbf{u}_1')^N = (\mathbf{u}_1'')^N \parallel OX$ , причому коефіцієнт  $e^{-i2\pi/36}$  є комплексно спряженим до коефіцієнту  $e^{i2\pi/36}$ ).

Для нескінченної крісельної BN-SWNT (3, 3) аналітичні вирази для форм фундаментальних нормальних коливань будуть наступними (коливальні моди, що є функціями-партнерами двократно вироджених коливань, позначені додатковими індексами  $\alpha$  і  $\beta$ ):

для симетрії  $A_1^+$

$$Q_1^{(A_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{u}_1^B + \mathbf{u}_2^B + \mathbf{u}_3^B + \mathbf{u}_4^B + \mathbf{u}_5^B + \mathbf{u}_6^B +$$

$$+ \mathbf{u}_1^N + \mathbf{u}_2^N + \mathbf{u}_3^N + \mathbf{u}_4^N + \mathbf{u}_5^N + \mathbf{u}_6^N),$$

$$Q_2^{(A_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{u}_1^B + \mathbf{u}_2^B + \mathbf{u}_3^B + \mathbf{u}_4^B + \mathbf{u}_5^B + \mathbf{u}_6^B -$$

$$- \mathbf{u}_1^N - \mathbf{u}_2^N - \mathbf{u}_3^N - \mathbf{u}_4^N - \mathbf{u}_5^N - \mathbf{u}_6^N),$$

$$Q_3^{(A_1^+)}(rot) = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{v}_1^B + \mathbf{v}_2^B + \mathbf{v}_3^B + \mathbf{v}_4^B + \mathbf{v}_5^B +$$

$$+ \mathbf{v}_6^B + \mathbf{v}_1^N + \mathbf{v}_2^N + \mathbf{v}_3^N + \mathbf{v}_4^N + \mathbf{v}_5^N + \mathbf{v}_6^N),$$

$$Q_4^{(A_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{v}_1^B + \mathbf{v}_2^B + \mathbf{v}_3^B + \mathbf{v}_4^B + \mathbf{v}_5^B + \mathbf{v}_6^B -$$

$$- \mathbf{v}_1^N - \mathbf{v}_2^N - \mathbf{v}_3^N - \mathbf{v}_4^N - \mathbf{v}_5^N - \mathbf{v}_6^N);$$

для симетрії  $A_1^-$

$$Q_1^{(A_1^-)}(ac) = \frac{1}{2\sqrt{3}} (z_1^B + z_2^B + z_3^B + z_4^B + z_5^B + z_6^B +$$

$$+ z_1^N + z_2^N + z_3^N + z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_2^{(A_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (z_1^B + z_2^B + z_3^B + z_4^B + z_5^B + z_6^B -$$

$$- z_1^N - z_2^N - z_3^N - z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

для симетрії  $A_2^+$

$$Q_1^{(A_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (z_1^B + z_2^B + z_3^B - z_4^B - z_5^B - z_6^B +$$

$$+ z_1^N + z_2^N + z_3^N - z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_2^{(A_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (z_1^B + z_2^B + z_3^B - z_4^B - z_5^B -$$

$$- z_6^B - z_1^N - z_2^N - z_3^N + z_4^N + z_5^N + z_6^N);$$

для симетрії  $A_2^-$

$$Q_1^{(A_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{u}_1^B + \mathbf{u}_2^B + \mathbf{u}_3^B - \mathbf{u}_4^B - \mathbf{u}_5^B - \mathbf{u}_6^B +$$

$$+ \mathbf{u}_1^N + \mathbf{u}_2^N + \mathbf{u}_3^N - \mathbf{u}_4^N - \mathbf{u}_5^N - \mathbf{u}_6^N),$$

$$Q_2^{(A_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{u}_1^B + \mathbf{u}_2^B + \mathbf{u}_3^B - \mathbf{u}_4^B - \mathbf{u}_5^B - \mathbf{u}_6^B -$$

$$- \mathbf{u}_1^N - \mathbf{u}_2^N - \mathbf{u}_3^N + \mathbf{u}_4^N + \mathbf{u}_5^N + \mathbf{u}_6^N),$$

$$Q_3^{(A_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{v}_1^B + \mathbf{v}_2^B + \mathbf{v}_3^B - \mathbf{v}_4^B - \mathbf{v}_5^B - \mathbf{v}_6^B +$$

$$+ \mathbf{v}_1^N + \mathbf{v}_2^N + \mathbf{v}_3^N - \mathbf{v}_4^N - \mathbf{v}_5^N - \mathbf{v}_6^N),$$

$$Q_4^{(A_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\mathbf{v}_1^B + \mathbf{v}_2^B + \mathbf{v}_3^B - \mathbf{v}_4^B - \mathbf{v}_5^B - \mathbf{v}_6^B -$$

$$- \mathbf{v}_1^N - \mathbf{v}_2^N - \mathbf{v}_3^N + \mathbf{v}_4^N + \mathbf{v}_5^N + \mathbf{v}_6^N);$$

для симетрії  $(B_1^+ + B_3^+)(E_1^+)$

$$Q_{1\alpha}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_3^B +$$

$$+ \mathbf{u}_4^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_5^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_2^N +$$

$$+ \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_3^N + \mathbf{u}_4^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_5^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{1\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^B + \mathbf{v}_4^B +$$

$$+ \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^N +$$

$$+ \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^N + \mathbf{v}_4^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^N)],$$

$$Q_{2\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^B +$$

$$+ \mathbf{v}_4^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^N +$$

$$+ \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^N + \mathbf{v}_4^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^N)],$$

$$Q_{3\alpha}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^B +$$

$$+ \mathbf{u}_4^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N +$$

$$+ \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^N + \mathbf{u}_4^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{1\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^B +$$

$$+ \mathbf{v}_4^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^N +$$

$$+ \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^N + \mathbf{v}_4^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^N)],$$



$$Q_{4\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^B + \mathbf{u}_4^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^N + \mathbf{u}_4^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{4\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^B + \mathbf{v}_4^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^N + \mathbf{v}_4^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^N)];$$

для симетрії  $(B_1^- + B_3^-)(E_1^-)$

$$Q_{1\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} (2z_1^B - z_2^B - z_3^B + 2z_4^B - z_5^B - z_6^B + 2z_1^N - z_2^N - z_3^N + 2z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{1\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (z_2^B - z_3^B + z_5^B - z_6^B + z_2^N - z_3^N + z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{2\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} (2z_1^B - z_2^B - z_3^B + 2z_4^B - z_5^B - z_6^B - 2z_1^N + z_2^N + z_3^N - 2z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_{2\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (z_2^B - z_3^B + z_5^B - z_6^B - z_2^N + z_3^N - z_5^N + z_6^N);$$

для симетрії  $(B_2^+ + B_4^+)(E_2^+)$

$$Q_{1\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} (2z_1^B - z_2^B - z_3^B - 2z_4^B + z_5^B + z_6^B + 2z_1^N - z_2^N - z_3^N - 2z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_{1\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (z_2^B - z_3^B - z_5^B + z_6^B + z_2^N - z_3^N - z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_{2\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} (2z_1^B - z_2^B - z_3^B - 2z_4^B + z_5^B + z_6^B - 2z_1^N + z_2^N + z_3^N + 2z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{2\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (z_2^B - z_3^B - z_5^B + z_6^B - z_2^N + z_3^N + z_5^N - z_6^N);$$

для симетрії  $(B_2^- + B_4^-)(E_2^-)$

$$Q_{1\alpha}^{(E_2^-)}(ac) = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_3^B - \mathbf{u}_4^B - \varepsilon_3 \mathbf{u}_5^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_2^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_3^N - \mathbf{u}_4^N - \varepsilon_3 \mathbf{u}_5^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{1\beta}^{(E_2^-)}(ac) = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^B - \mathbf{v}_4^B - \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^N - \mathbf{v}_4^N - \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^N)],$$

$$Q_{2\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_3^B - \mathbf{u}_4^B - \varepsilon_3 \mathbf{u}_5^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_2^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_3^N - \mathbf{u}_4^N - \varepsilon_3 \mathbf{u}_5^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{2\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^B - \mathbf{v}_4^B - \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_2^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_3^N - \mathbf{v}_4^N - \varepsilon_3 \mathbf{v}_5^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_6^N)],$$

$$Q_{3\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^B - \mathbf{u}_4^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^B - \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^N - \mathbf{u}_4^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^N - \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{3\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^B - \mathbf{v}_4^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^B - \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^B) + e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^N - \mathbf{v}_4^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^N - \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^N)],$$

$$Q_{4\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^B - \mathbf{u}_4^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^B - \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{u}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3^N - \mathbf{u}_4^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{u}_5^N - \varepsilon_3 \mathbf{u}_6^N)],$$

$$Q_{4\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} [e^{i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^B + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^B + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^B - \mathbf{v}_4^B - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^B - \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^B) - e^{-i2\pi/36} (\mathbf{v}_1^N + \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_2^N + \varepsilon_3 \mathbf{v}_3^N - \mathbf{v}_4^N - \varepsilon_3^{-1} \mathbf{v}_5^N - \varepsilon_3 \mathbf{v}_6^N)].$$

На рис. 2 (а, б) наведено графічне зображення форм фундаментальних нормальних коливань двокомпонентної нескінченної крісельної BN-SWNT (3, 3).

З рисунку легко бачити, що одна з фундаментальних коливальних мод симетрії  $A_1^+$  [мода  $(A_1^+)_1$ ] відповідає "дыхальному" коливанню, коли всі атоми бору і азоту, що формують елементарну комірку BN-SWNT, рухаються синфазно перпендикулярно осі NT від її центра вздовж радіусів, на яких вони знаходяться. Одна з фундаментальних коливальних мод симетрії  $A_1^+$  [мода  $(A_1^+)_3(rot)$ ] відповідає невластому ротаційному коливанню, що є фундаментальним (при  $\mathbf{k}=0$ ) невластим коливанням торсійної гілки коливань  $\omega_{tors}$ , одна з фундаментальних мод симетрії  $A_1^-$  [мода  $(A_1^-)_1(ac)$ ] відповідає невластому трансляційному (вздовж осі трубки) коливанню, що є фу



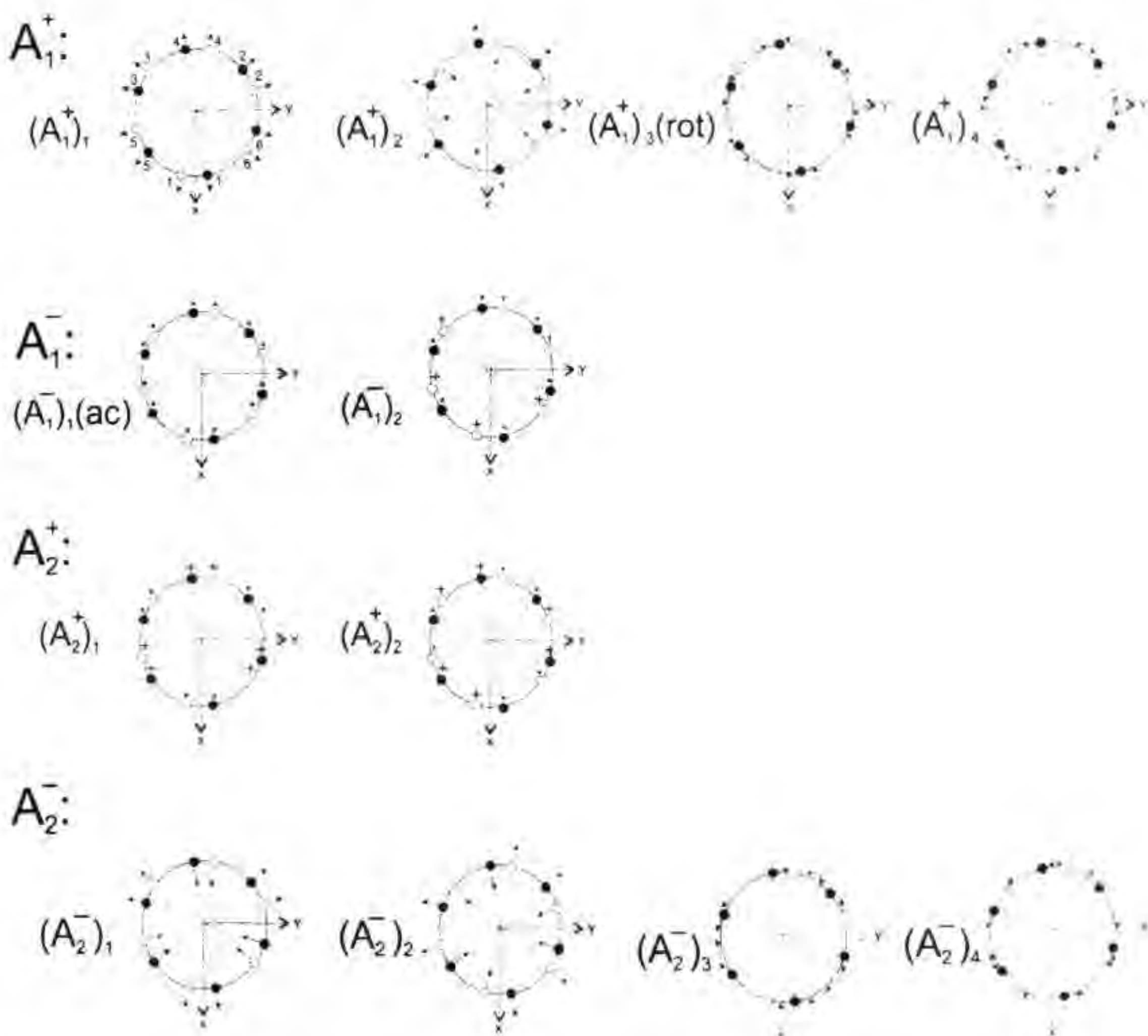


Рис. 2, а. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної крісельної BN-SWNT (3, 3) для не вироджених коливань.

ндаментальним невластним коливанням акустичної гілки коливань  $\omega_{LO}(ac)$ . Фундаментальні моди симетрій  $E_1^+$  і  $E_2^-$  відповідають коливанням, що формуються зміщеннями атомів, перпендикулярними до осі трубки [моди  $(E_2^-)_{1\alpha}$  і  $(E_2^-)_{1\beta}$  є компонентами трансляційного двократно виродженого коливання, що є фундаментальним невластним коливанням акустичної гілки коливань  $\omega_{TO}(ac)$ ], а фундаментальні моди симетрій  $E_1^-$  і  $E_2^+$  – коливанням, які формуються зміщеннями атомів вздовж осі NT.

Тепер розрахуємо форми фундаментальних нормальних коливань двокомпонентної нескінченної зигзагної BN-SWNT (3, 0). Симетрія макромолекулярного класу цієї нанотрубки

описується точковою групою  $C_{6v}$ .

Аналітичні вирази для форм фундаментальних нормальних коливань BN-SWNT (3, 0), як неважко бачити, будуть наступними: для симетрії  $A_1$

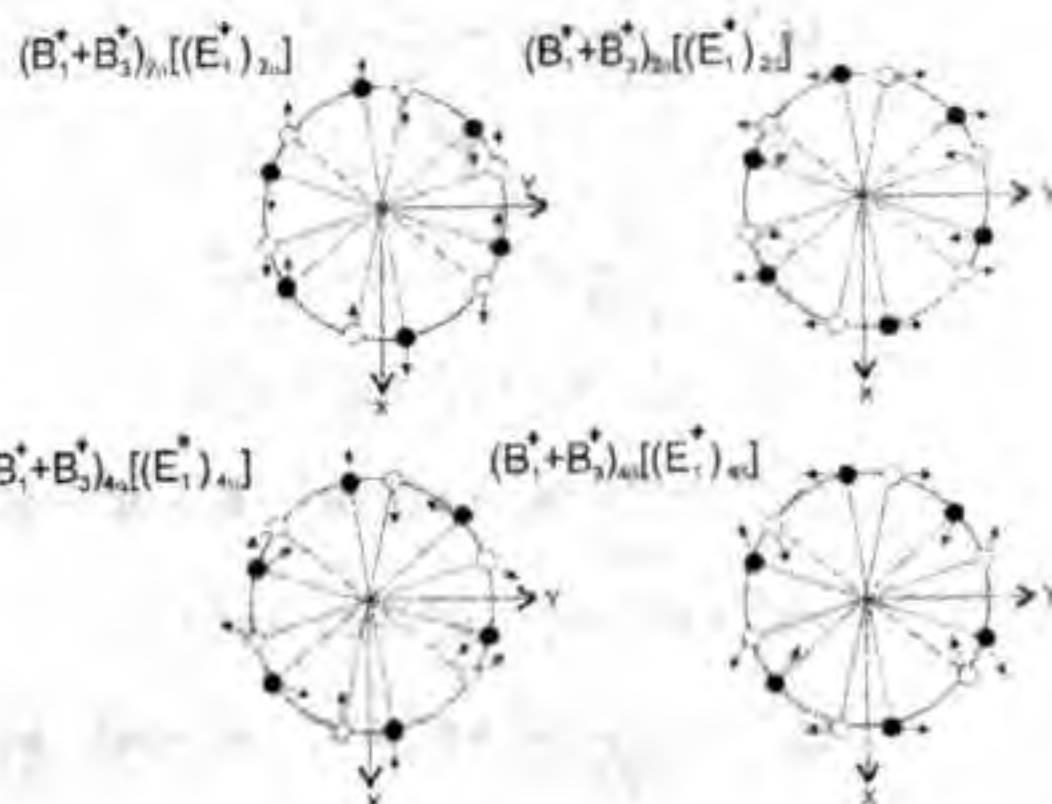
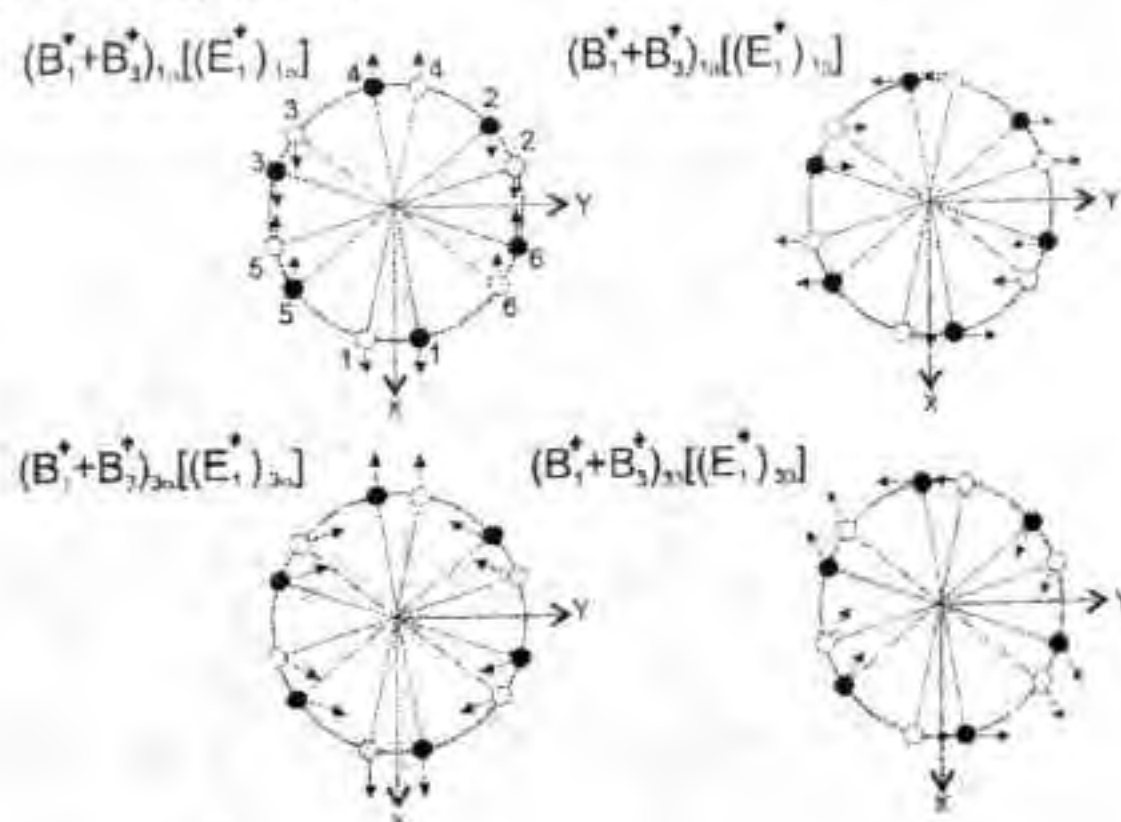
$$Q_1^{(A_1)}(ac) = \frac{1}{2\sqrt{3}} (z_1^B + z_2^B + z_3^B + z_4^B + z_5^B + z_6^B + z_1^N + z_2^N + z_3^N + z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_2^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (z_1^B + z_2^B + z_3^B + z_4^B + z_5^B + z_6^B - z_1^N - z_2^N - z_3^N - z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

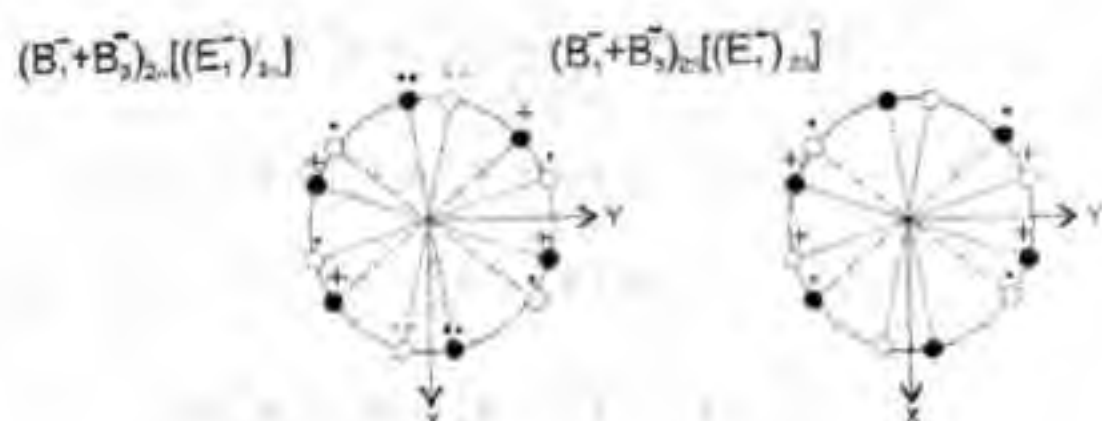
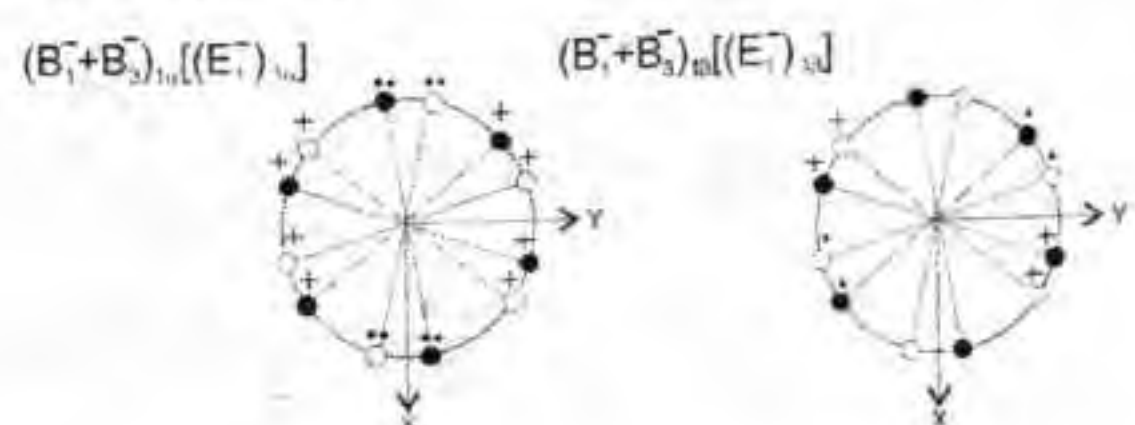
$$Q_4^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (u_1^B + u_2^B + u_3^B + u_4^B + u_5^B + u_6^B - u_1^N - u_2^N - u_3^N - u_4^N - u_5^N - u_6^N),$$



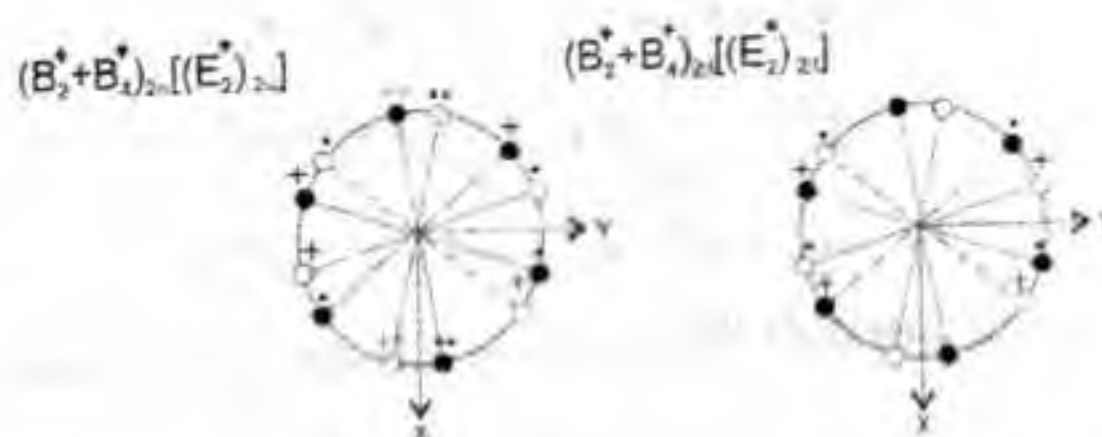
$$(B_1^+ + B_3^+)(E_1^+):$$



$$(B_1^- + B_3^-)(E_1^-):$$



$$(B_2^+ + B_4^+)(E_2^+):$$



$$(B_2^- + B_4^-)(E_2^-):$$

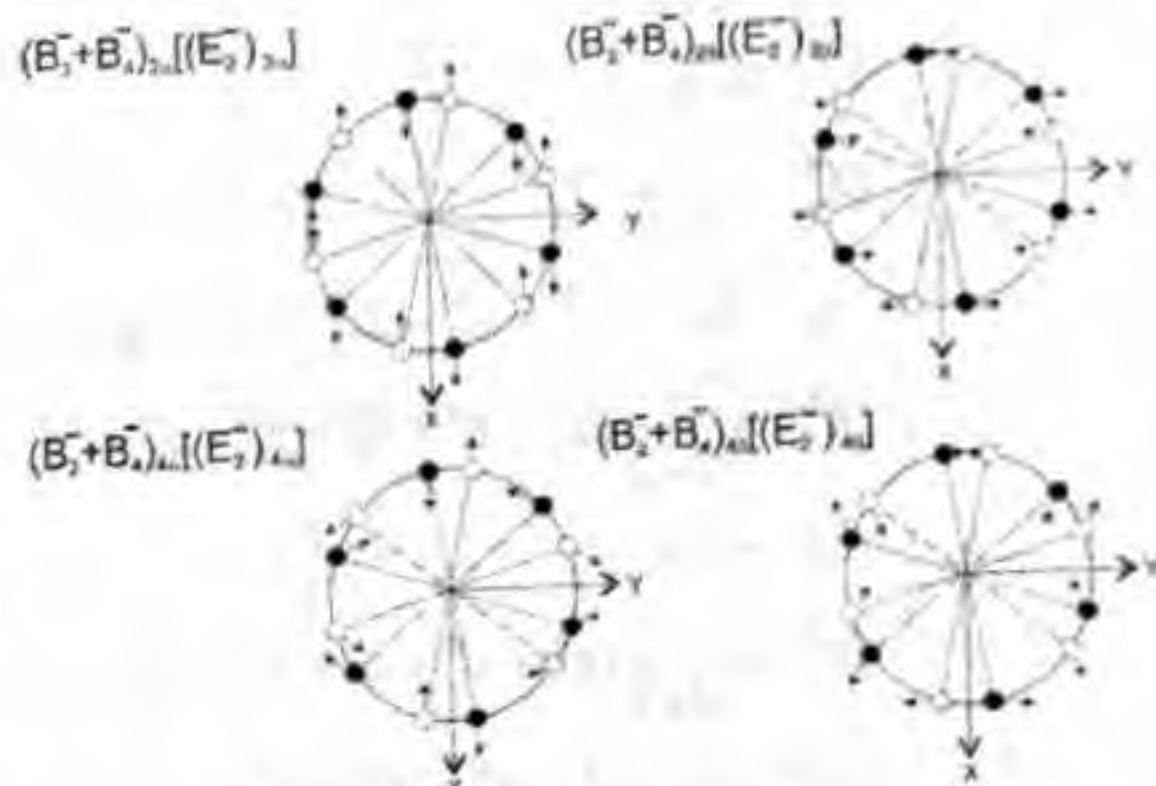
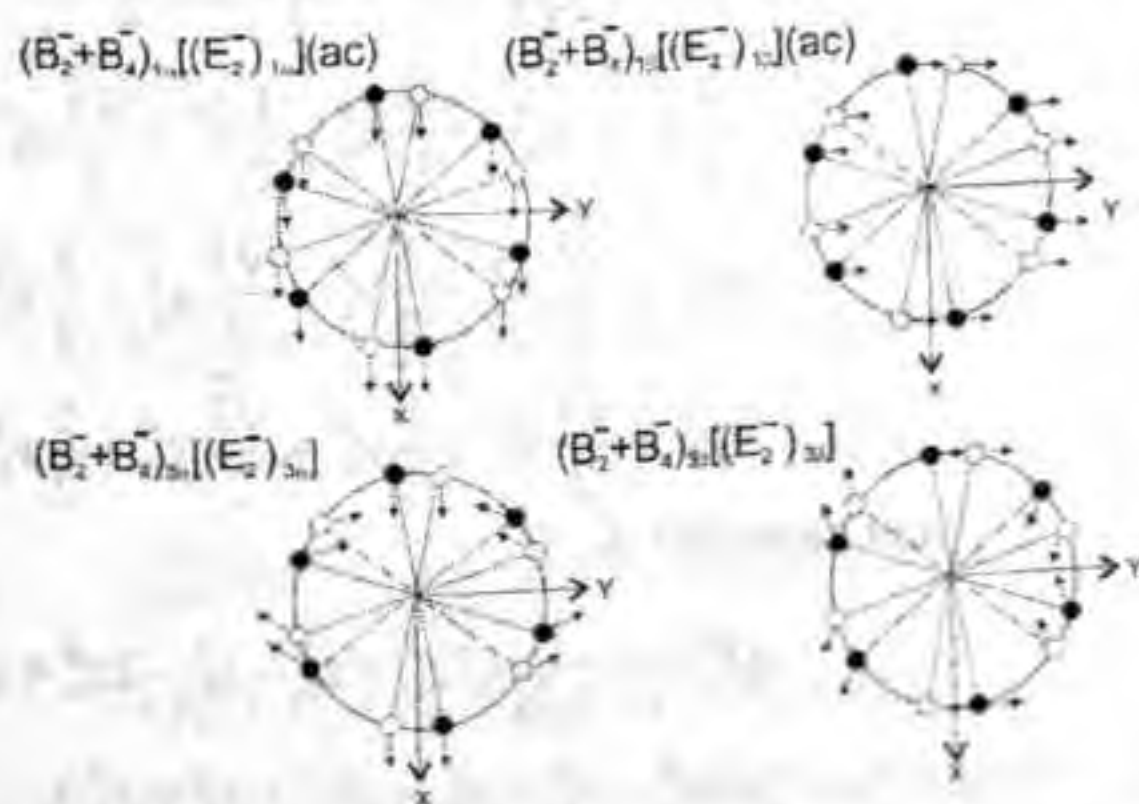


Рис. 2, б. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної крісельної BN-SWNT (3, 3) для двократно вироджених коливань.



для симетрії  $A_2$

$$Q_1^{(A_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1^B + z_2^B + z_3^B - z_4^B - z_5^B - z_6^B + \\ + z_1^N + z_2^N + z_3^N - z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_2^{(A_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1^B + z_2^B + z_3^B - z_4^B - z_5^B - z_6^B - \\ - z_1^N - z_2^N - z_3^N + z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_3^{(A_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1^B + u_2^B + u_3^B - u_4^B - u_5^B - u_6^B + \\ + u_1^N + u_2^N + u_3^N - u_4^N - u_5^N - u_6^N),$$

$$Q_4^{(A_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1^B + u_2^B + u_3^B - u_4^B - u_5^B - u_6^B - \\ - u_1^N - u_2^N - u_3^N + u_4^N + u_5^N + u_6^N),$$

для симетрії  $A_3$

$$Q_1^{(A_3)}(rot) = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1^B + v_2^B + v_3^B + v_4^B + v_5^B + \\ + v_6^B + v_1^N + v_2^N + v_3^N + v_4^N + v_5^N + v_6^N),$$

$$Q_2^{(A_3)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1^B + v_2^B + v_3^B + v_4^B + v_5^B + v_6^B - \\ - v_1^N - v_2^N - v_3^N - v_4^N - v_5^N - v_6^N);$$

для симетрії  $A_4$

$$Q_1^{(A_4)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1^B + v_2^B + v_3^B - v_4^B - v_5^B - v_6^B + \\ + v_1^N + v_2^N + v_3^N - v_4^N - v_5^N - v_6^N),$$

$$Q_2^{(A_4)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1^B + v_2^B + v_3^B - v_4^B - v_5^B - v_6^B - \\ - v_1^N - v_2^N - v_3^N + v_4^N + v_5^N + v_6^N);$$

для симетрії  $E_1$

$$Q_{1a}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(2z_1^B - z_2^B - z_3^B + 2z_4^B - z_5^B - z_6^B + \\ + 2z_1^N - z_2^N - z_3^N + 2z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{1b}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2^B - z_3^B + z_5^B - z_6^B + z_2^N - z_3^N + \\ + z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{2a}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(2z_1^B - z_2^B - z_3^B + 2z_4^B - z_5^B - \\ - z_6^B - 2z_1^N + z_2^N + z_3^N - 2z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_{2b}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2^B - z_3^B + z_5^B - z_6^B - z_2^N + z_3^N - \\ - z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_{3a}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1^B + x_2^B + x_3^B - x_4^B - x_5^B - x_6^B + \\ + x_1^N + x_2^N + x_3^N - x_4^N - x_5^N - x_6^N),$$

$$Q_{3b}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1^B + y_2^B + y_3^B - y_4^B - y_5^B - y_6^B + \\ + y_1^N + y_2^N + y_3^N - y_4^N - y_5^N - y_6^N),$$

$$Q_{4a}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1^B + x_2^B + x_3^B - x_4^B - x_5^B - x_6^B - \\ - x_1^N - x_2^N - x_3^N + x_4^N + x_5^N + x_6^N),$$

$$Q_{4b}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1^B + y_2^B + y_3^B - y_4^B - y_5^B - y_6^B - \\ - y_1^N - y_2^N - y_3^N + y_4^N + y_5^N + y_6^N),$$

$$Q_{5a}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1^B - \frac{1}{2}x_2^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^B - \frac{1}{2}x_3^B + \\ + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^B - x_4^B + \frac{1}{2}x_5^B + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^B + \frac{1}{2}x_6^B - \\ - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^B + x_1^N - \frac{1}{2}x_2^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^N - \frac{1}{2}x_3^N + \\ + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^N - x_4^N + \frac{1}{2}x_5^N + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^N + \frac{1}{2}x_6^N - \\ - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^N),$$

$$Q_{5b}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-y_1^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^B + \frac{1}{2}y_2^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^B + \\ + \frac{1}{2}y_3^B + y_4^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^B - \frac{1}{2}y_5^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^B - \frac{1}{2}y_6^B - \\ - y_1^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^N + \frac{1}{2}y_2^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^N + \frac{1}{2}y_3^N + \\ + y_4^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^N - \frac{1}{2}y_5^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^N - \frac{1}{2}y_6^N),$$

$$Q_{6a}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1^B - \frac{1}{2}x_2^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^B - \frac{1}{2}x_3^B + \\ + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^B - x_4^B + \frac{1}{2}x_5^B + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^B + \frac{1}{2}x_6^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^B - \\ - x_1^N + \frac{1}{2}x_2^N + \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^N + \frac{1}{2}x_3^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^N + x_4^N - \\ - \frac{1}{2}x_5^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^N - \frac{1}{2}x_6^N + \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^N),$$

$$Q_{6b}^{(E_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-y_1^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^B + \frac{1}{2}y_2^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^B + \\ + \frac{1}{2}y_3^B + y_4^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^B - \frac{1}{2}y_5^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^B - \frac{1}{2}y_6^B + \\ + y_1^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^N - \frac{1}{2}y_2^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^N - \frac{1}{2}y_3^N - \\ - y_4^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^N + \frac{1}{2}y_5^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^N + \frac{1}{2}y_6^N);$$

для симетрії  $E_2$

$$Q_{1a}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(2z_1^B - z_2^B - z_3^B - 2z_4^B + z_5^B + z_6^B + \\ + 2z_1^N - z_2^N - z_3^N - 2z_4^N + z_5^N + z_6^N),$$

$$Q_{1b}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2^B - z_3^B - z_4^B + z_6^B + z_2^N - z_3^N - \\ - z_5^N + z_6^N),$$



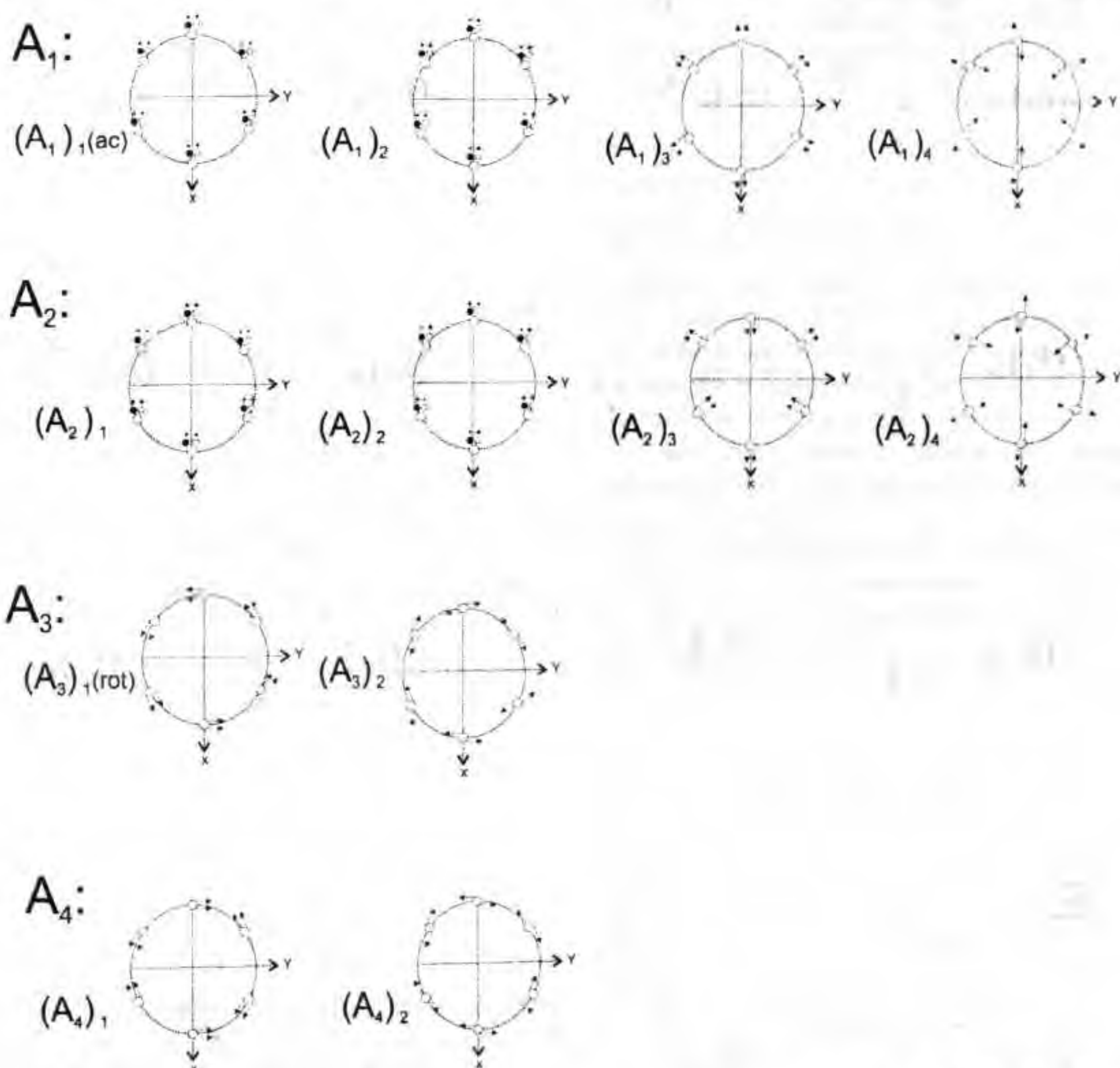


Рис. 3, а. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної зигзагної BN-SWNT (3, 0) для не вироджених коливань.

$$Q_{2a}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} (2z_1^B - z_2^B - z_3^B - 2z_4^B + z_5^B + z_6^B -$$

$$- 2z_1^N + z_2^N + z_3^N + 2z_4^N - z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{2\beta}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (z_2^B - z_3^B - z_5^B + z_6^B - z_2^N +$$

$$+ z_3^N + z_5^N - z_6^N),$$

$$Q_{3a}^{(E_2)}(ac) = \frac{1}{2\sqrt{3}} (x_1^B + x_2^B + x_3^B + x_4^B + x_5^B +$$

$$+ x_6^B + x_1^N + x_2^N + x_3^N + x_4^N + x_5^N + x_6^N),$$

$$Q_{3\beta}^{(E_2)}(ac) = \frac{1}{2\sqrt{3}} (y_1^B + y_2^B + y_3^B + y_4^B + y_5^B +$$

$$+ y_6^B + y_1^N + y_2^N + y_3^N + y_4^N + y_5^N + y_6^N),$$

$$Q_{4a}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (x_1^B + x_2^B + x_3^B + x_4^B + x_5^B + x_6^B -$$

$$- x_1^N - x_2^N - x_3^N - x_4^N - x_5^N - x_6^N),$$

$$Q_{4\beta}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (y_1^B + y_2^B + y_3^B + y_4^B + y_5^B + y_6^B -$$

$$- y_1^N - y_2^N - y_3^N - y_4^N - y_5^N - y_6^N),$$

$$Q_{3a}^{(E_3)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} (x_1^B - \frac{1}{2}x_2^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^B - \frac{1}{2}x_3^B +$$

$$+ \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^B + x_4^B - \frac{1}{2}x_5^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^B - \frac{1}{2}x_6^B +$$

$$+ \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^B + x_1^N - \frac{1}{2}x_2^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^N - \frac{1}{2}x_3^N +$$

$$+ \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^N + x_4^N - \frac{1}{2}x_5^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^N - \frac{1}{2}x_6^N + \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^N),$$



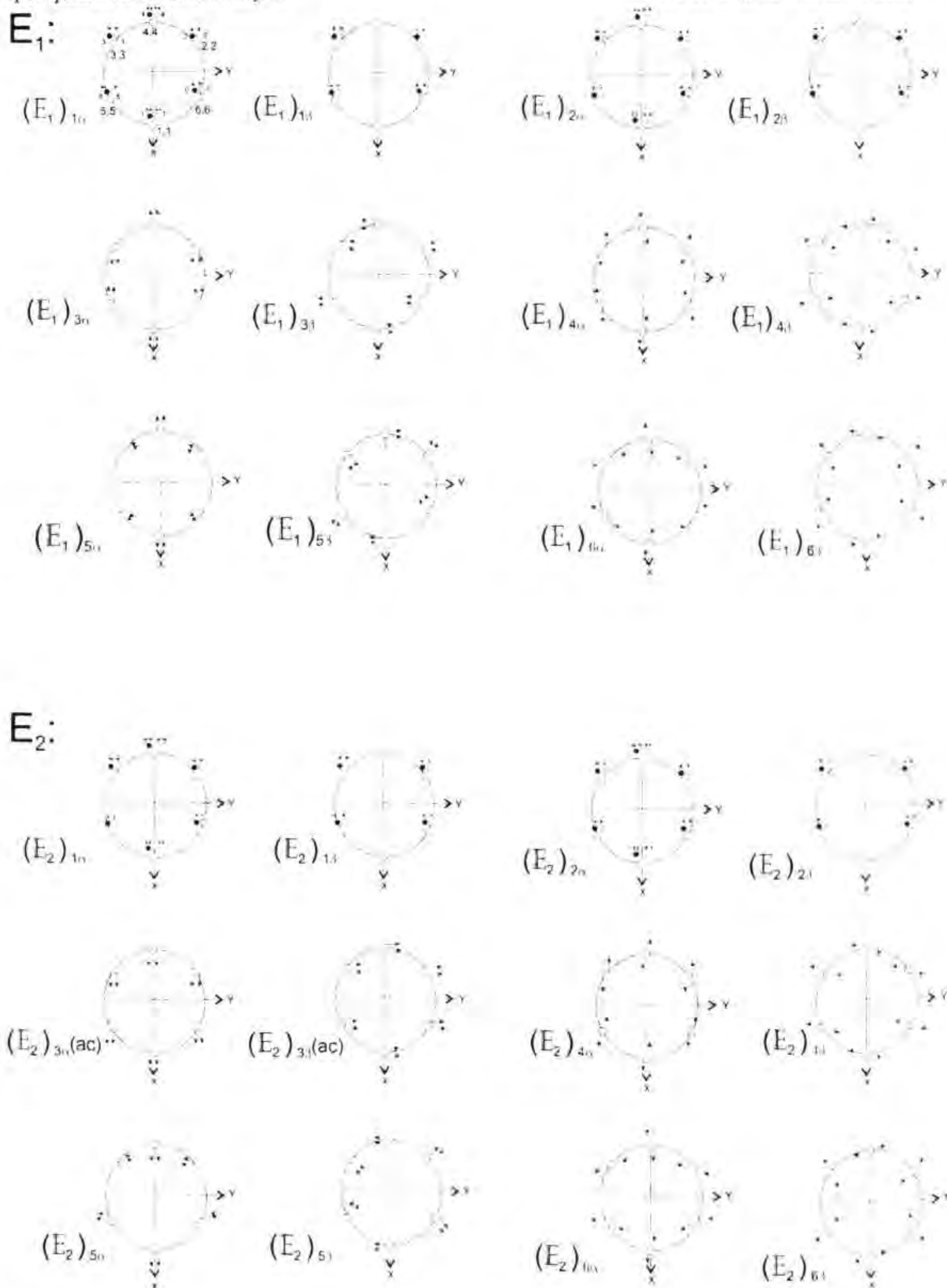


Рис. 3, б. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної зигзагної BN-SWNT (3, 0) для двократно вироджених коливань.



$$Q_{5\beta}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-y_1^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^B + \frac{1}{2}y_2^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^B + \frac{1}{2}y_3^B - y_4^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^B + \frac{1}{2}y_5^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^B + \frac{1}{2}y_6^B - y_1^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^N + \frac{1}{2}y_2^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^N + \frac{1}{2}y_3^N - y_4^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^N + \frac{1}{2}y_5^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^N + \frac{1}{2}y_6^N),$$

$$Q_{6a}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1^B - \frac{1}{2}x_2^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^B - \frac{1}{2}x_3^B + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^B + x_4^B - \frac{1}{2}x_5^B - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^B - \frac{1}{2}x_6^B + \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^B - x_1^N + \frac{1}{2}x_2^N + \frac{\sqrt{3}}{2}y_2^N + \frac{1}{2}x_3^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_3^N - x_4^N + \frac{1}{2}x_5^N + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5^N + \frac{1}{2}x_6^N - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6^N),$$

$$Q_{6\beta}^{(E_2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-y_1^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^B + \frac{1}{2}y_2^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^B + \frac{1}{2}y_3^B - y_4^B - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^B + \frac{1}{2}y_5^B + \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^B + \frac{1}{2}y_6^B + y_1^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_2^N - \frac{1}{2}y_2^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_3^N - \frac{1}{2}y_3^N + y_4^N + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5^N - \frac{1}{2}y_5^N - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6^N - \frac{1}{2}y_6^N).$$

Графічне зображення форм фундаментальних нормальних коливань двокомпонентної нескінченної зигзагної BN-SWNT (3, 0) наведено на рис. 3 (а, б).

З рисунку також легко бачити, що фундаментальна коливальна мода  $(A_1)_3$  відповідає «дихальному» коливанню, мода  $(A_1)_2$  – «валентному» коливанню, моди  $(A_1)_1$ ,  $(E_2)_{3a}$  і  $(E_2)_{3\beta}$  – трансляційні [фундаментальні моди гілок  $\omega_{LO}(ac)$  і  $\omega_{TO}(ac)$ ], а мода  $(A_3)_1(rot)$  – ротаційна (фундаментальна мода торсійної гілки  $\omega_{tors}$ ).

На рис. 4 зображено експериментально зареєстрований спектр КР монокристалу BN та одностінних нітридборних нанотрубок, а на рис. 5 представлено оброблені спектри з розділенням контурів смуг.

Спектр КР BN-NT містить дублетну смугу в області  $1370 \text{ cm}^{-1}$  з компонентами  $1359.0$  та  $1377.5 \text{ cm}^{-1}$ , а також вузьку смугу з частотою  $805 \text{ cm}^{-1}$  [2]. Інші широкі смуги спектру (з частотами  $345$ ,  $657$ ,  $1077$  та  $1574 \text{ cm}^{-1}$ ) скоріш за все відносяться до спектру другого порядку. Смуга з частотою  $1574 \text{ cm}^{-1}$  може бу-

ти віднесена або до складеного тону (валентне та «дихальні» коливання), або до обертоу смуги  $805 \text{ cm}^{-1}$ , забороненої в дипольному наближенні.

Дублетна смуга  $1359.0$  та  $1377.5 \text{ cm}^{-1}$  за своїм спектральним положенням відповідає спектральному положенню смуги ( $1366.2 \text{ cm}^{-1}$ ) валентних коливань монокристалу  $\gamma$ -BN [1]. Це означає, що розглядувана дублетна смуга дійсно відноситься до спектру КР нітридборних нанотрубок і пов'язана з їх валентними коливаннями. Неспівпадіння частот валентних коливань нанотрубки з частотою валентного коливання монокристалу обумовлене впливом на частоту коливання BN-зв'язку атомного оточення, що є суттєво різним для монокристалу та нанотрубки.

Зроблений висновок про те, що спектр, приведений на рисунку, відноситься до спектру нанотрубок, підтверджується подібністю спектрів другого порядку досліджуваного спектру і спектру монокристала BN.

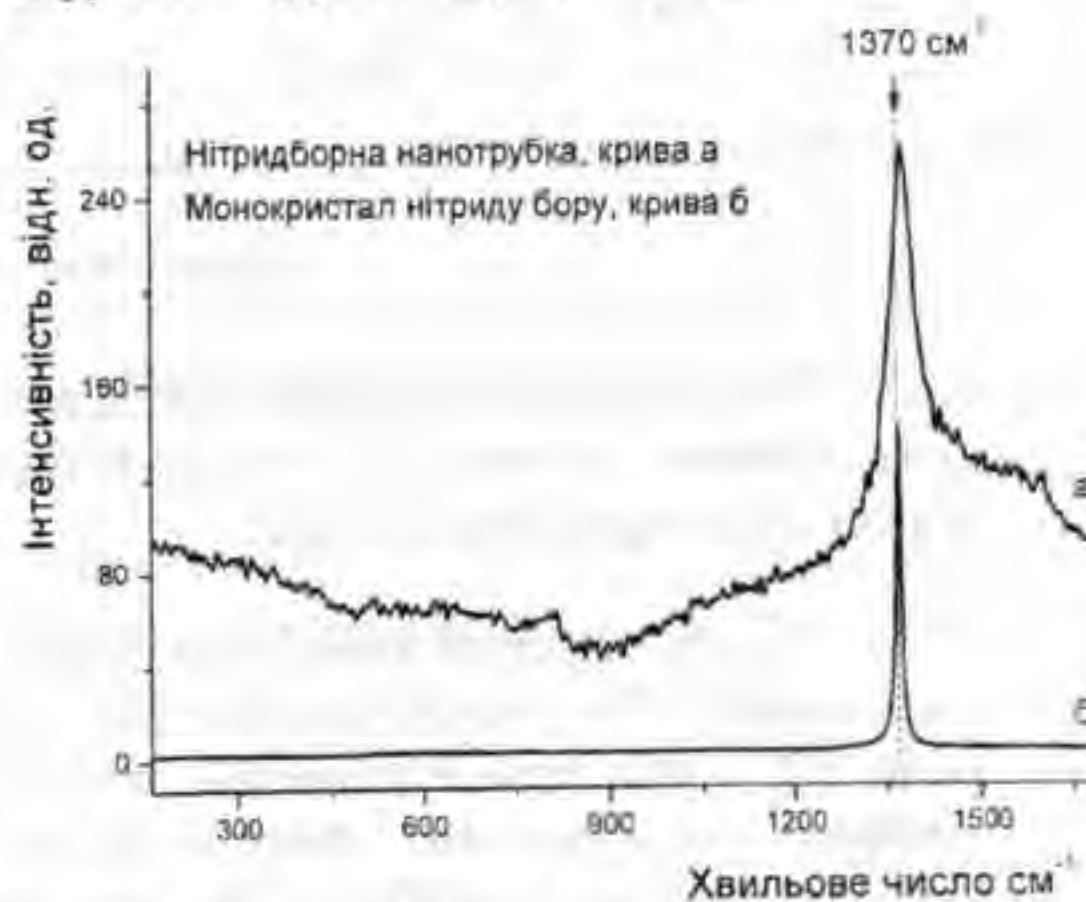


Рис. 4. Спектр КР світла нітридборних нанотрубок (BN-NT) та кристалу BN.

На рис. 5 зображена тонка структура дублетної смуги нітридборних нанотрубок  $1359.0$  та  $1377.5 \text{ cm}^{-1}$ . Аналогічний за природою дублет для вуглецевих нанотрубок має компоненти з частотами  $1560.5$  та  $1584.4 \text{ cm}^{-1}$  [1]. Ці дублети будемо називати «хіральними дублетами», а відповідне розщеплення – «хіральним розщепленням».

Хіральне розщеплення, на відміну, наприклад, від давидівського, не є, власне, розщепленням в результаті додаткової взаємодії. Хіральне розщеплення – це різниця частот, що виникає між аналогічними за характером зміщень атомів коливаннями в крісельних та зигзагних нанотрубках. Ця різниця частот обумовлена різним оточенням валентних зв'язків в трубках різної хіральності.



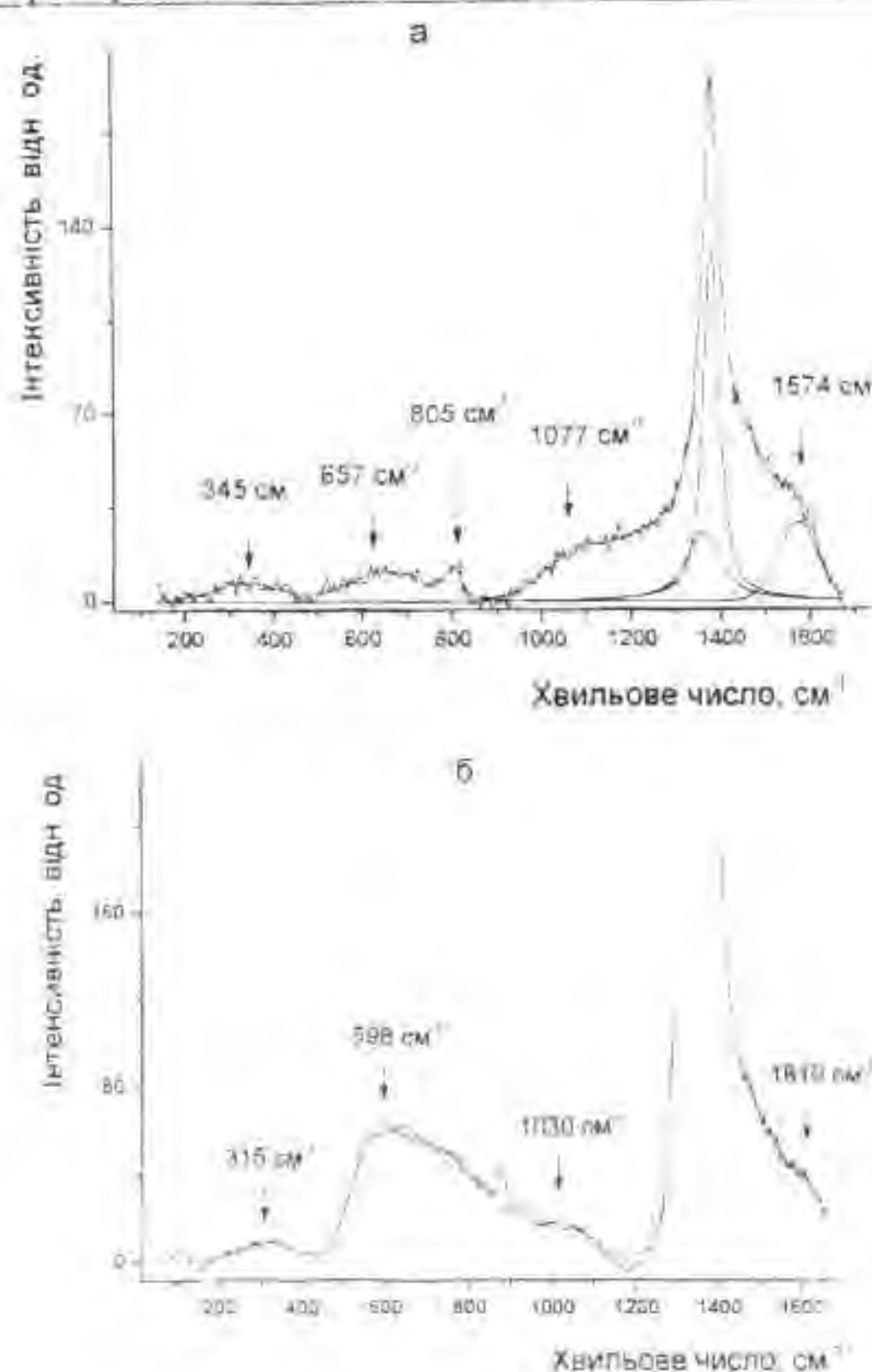


Рис. 5. Тонка структура спектру КР світла першого порядку та спектр КР другого порядку BN-NT (а) та кристалу BN (б).

Тонка структура компонент дублету, як і величини розщеплення, визначається діаметрами NT – чим менше діаметри, тим більше розщеплення компонент дублету. В нашому випадку діаметри C-SWNT в грубому наближенні групуються в околі двох їх значень, тому тонка структура кожної з компонент дублету складається з двох смуг.

Добре відомо [3], що завдяки  $sp^2$ -гібридації атомних орбіталей бору і азоту утворюється така алотропна форма нітриду бору, як кристалічний нітридборит або графітоподібний нітрид бору, що відноситься до структури з гексагональною ґраткою (позначається символами  $h$ -BN або  $\gamma$ -BN [1]).

Нітридборит є шаруватим кристалом, що складається з макромолекул однакових нескінчених двоперіодичних шарових пакетів – шарів з атомів бору і азоту, які впорядковані в площині в двокомпонентну структуру «бджолиних сот» таким чином, що найближчими сусідніми атомами завжди є атоми різних елементів. Цим гексагональним шаровим пакетам – розташованим в одній площині двокомпонентним шарам або моно шарам з атомів бору і азоту – можна надати, як це зроблено

для розташованих в одній площині вуглецевих моношарів графіту, що мають назву «графен» ( $C_{plane}$  або  $C_{pl}$ ), спеціальну назву – нітридборен [ $(BN)_{plane}$  або  $(BN)_{pl}$ ].

На відміну від кристалічного графіту, що має багато структурних форм з гексагональними ґратками (позначаються загальними символами  $h$ -C або  $\gamma$ -C [1]) [в тому числі найбільш поширену двошарову форму – графіт Бернала ( $\gamma$ -C або  $\gamma_1$ -C [1])], всі з яких є шаруватими кристалами, завдяки кулонівській взаємодії між атомами бору і азоту сусідніх шарів нітридборит кристалізується лише в одній двошаровій структурній формі  $\gamma_1$ -BN або просто  $\gamma$ -BN, елементарна комірка якої містить атоми двох однакових, але трансляційно нееквівалентних нітридборенових шарів.

Симетрія нітридборенового шару (нітридборену)  $(BN)_{pl}$  за рахунок двокомпонентності структури є нижчою, ніж симетрія графенового шару (графену)  $C_{pl}$ . Вона характеризується диперіодичною просторовою групою  $DG78(P\bar{6}m2)$  [4], графік якої (геометричне взаємне розташування елементів симетрії) співпадає з графіком триперіодичної просторової групи  $D_{3h}^1(P\bar{6}m2)$ . Симетрія ж макромолекулярного класу  $(BN)_{pl}$  описується точковою групою  $D_{3h}(\bar{6}m2)$ .

Класифікація коливальних мод  $(BN)_{pl}$  за незвідними представленнями групи  $D_{3h}$  є наступною:

$$\Gamma_{ac} = 2A_1 + 2E_1,$$

в тому числі для акустичних коливань

$$\Gamma_{ac} = A_2 + E_2$$

і для оптичних

$$\Gamma_{opt} = A_2 + E_1.$$

Два оптичних фундаментальних коливання шарового пакету ґратки  $\gamma$ -BN (нітридборену)  $(BN)_{pl}$  розділяються на одне невинроджене  $A_2$ , якому відповідає одна фундаментальна коливальна мода і одне двократно винроджене  $E_1$ , що складається з двох винроджених фундаментальних коливальних мод. Всі три оптичні фундаментальні коливальні моди нітридборену  $(BN)_{pl}$  ( $A_2$  і  $E_1$ ) активні в спектрах ІЧ-поглинання, а дві з них ( $E_1$ ) активні ще й в КР.

Валентним коливанням BN-зв'язку в монокристалах  $\gamma$ -BN відповідає давидівський дублет з розщепленням смуг  $\Delta_{\gamma-BN} \approx 17 \text{ cm}^{-1}$ , одна з компонент якого активна в спектрі КР і заборонена в спектрі ІЧ-поглинання – відпові-



дас коливанню  $(E_1^-)_2$  з  $\omega_{(E_1^-)_2} = 1366,2 \text{ см}^{-1}$ , а інша – заборонена в КР і активна в спектрі ІЧ-поглинання – відповідає коливанню  $(E_2^-)_2$  з  $\omega_{(E_2^-)_2} = 1383 \text{ см}^{-1}$  [1]. Давидівський дублет з валентних коливальних смуг виникає за рахунок розщеплення валентного коливання нітридборену в результаті міжшарової частково вандер-ваальсівської і частково електричної іонної взаємодії, при врахуванні якої визначним є те, що елементарна комірка монокристалу  $\gamma$ -BN містить атоми двох трансляційно нееквівалентних шарових пакетів (нітридборенових шарів), частота валентного коливання нітридборену  $(E_1)_2$ , яку експериментально можна виміряти лише досліджуючи ізольований нітридбореновий моношар, за розрахунками [5] становить  $\omega_{(E_1)_2} = 1380,4 \text{ см}^{-1}$ . Це значення лежить всередині експериментально виміряного для монокристалів  $\gamma$ -BN за спектрами КР і ІЧ-поглинання світла інтервалу давидівського розщеплення для валентних коливань BN зв'язку і, на наш погляд, є цілком прийнятним.

На рис. 6 зображено форми нормальних коливань двох функцій-партнерів (суцільні вектори та пунктирні), що відповідають частоті  $\omega_{(E_1)_2} \approx 1380,4 \text{ см}^{-1}$  нітридборену.

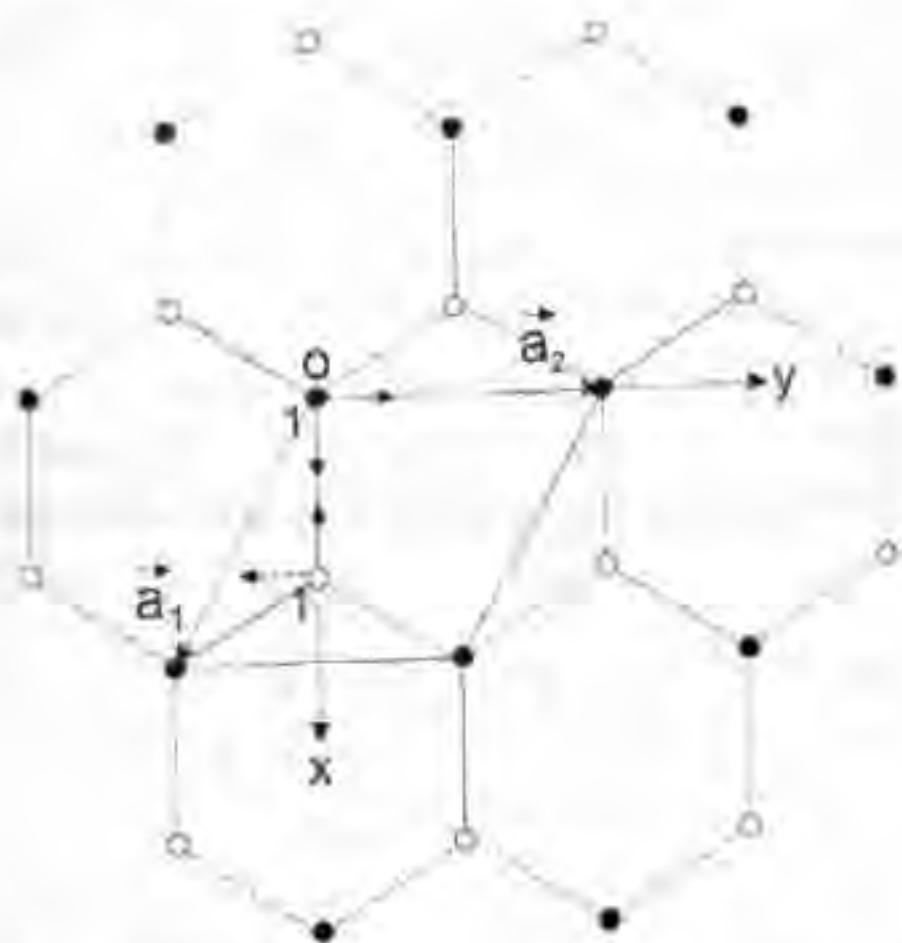


Рис. 6. Форми двократно виродженого коливання  $(E_1)_2$  нітридборенового шару. Дві вироджені коливальні моди описуються ортогональними функціями-партнерами: одна – з векторами зміщень вздовж осі Ох, друга – з векторами зміщень вздовж осі Оу.

При утворенні нанотрубок або згортанні нітридборенового шару відбувається розщеплення моди  $(E_1)_2$  на моди  $(A_1^+)_4$  і  $(A_1^-)_2$  в крісельних нанотрубках і на

моди  $(A_1)_2$  і  $(A_3)_2$  – в зигзагних нанотрубках. При цьому зміщення атомів бору і азоту в крісельних NT відбувається перпендикулярно осі згортання нітридборенового шару, а в зигзагних NT – паралельно осі згортання нітридборенового шару. Оскільки в обох випадках, для крісельних і зигзагних NT, моди  $(A_1^+)_4$  і  $(A_1^-)_2$  не активні в спектрах КР світла, то розщеплення смуги  $1380,4 \text{ см}^{-1}$ , що характеризує коливання  $(E_1)_2$  в  $(\text{BN})_{pl}$ , на дублет з компонентами  $\omega_{(A_1^+)_4} = 1377,5 \text{ см}^{-1}$  для крісельних NT і  $\omega_{(A_1^-)_2} = 1359,0 \text{ см}^{-1}$  для зигзагних NT можна інтерпретувати як хіральну анізотропію коливальних мод нітридборених нанотрубок.

На рис. 7 наведено схему розщеплення двократно виродженого коливання нітридборенового шару  $(E_1)_2$  для крісельних та зигзагних BN-SWNT. На цьому ж рисунку значками  $\perp$  і  $\parallel$  позначені напрямки векторів зміщень атомів, що формують коливання  $(A_1^+)_4$  і  $(A_1^-)_2$ , відносно осей нанотрубок  $\hat{c}$ . Різниця частот фундаментальних коливань  $(A_1^+)_4$  і  $(A_1^-)_2$  обумовлена їх хіральною анізотропією. Дані проведеного нами комп'ютерного розрахунку свідчать про те, що частоти коливань  $(A_1^+)_4$  більші, ніж частоти коливань  $(A_1^-)_2$ . Про це свідчать і інтенсивності компонент хірального дублету: крісельні NT більш стабільні за зигзагні, їх концентрація в суміші, як правило, вища, і інтенсивність їх коливальних мод  $(A_1^+)_4$  більша за інтенсивність мод  $(A_1^-)_2$  зигзагних NT.

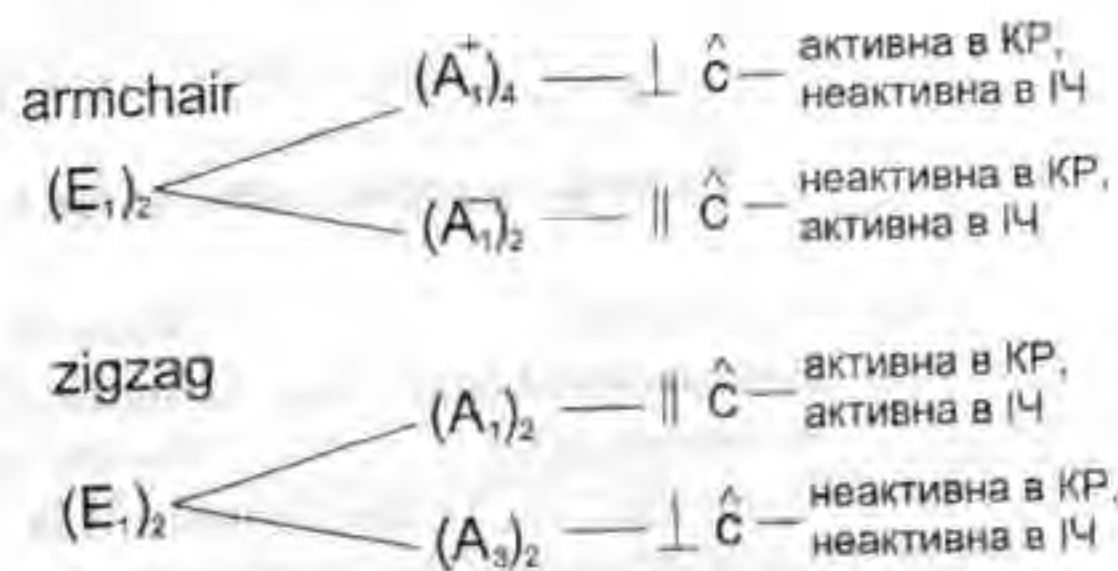


Рис. 7. Схема розщеплення двократно виродженого коливання нітридборенового шару  $(E_1)_2$  в крісельних та зигзагних BN-SWNT.

В кінці роботи можна зробити наступні висновки:



1. Вперше аналітично розраховано форми фундаментальних нормальних коливань крісельної BN-SWNT (3, 3) та зигзагної BN-SWNT (3, 0). Виявлено, що ці коливання формуються із зміщень атомів бору та азоту або виключно перпендикулярно до осей NT, або виключно вздовж осей NT. Особливістю розрахунку є визначення форм двократно вироджених коливань, що виникають як наслідок об'єднання комплексно спряжених одновимірних представлень абелевої групи макромолекулярного класу при врахуванні інваріантності енергетичних станів до інверсії часу.

2. Вперше виявлено ефект хіральної анізотропії коливальних мод, що зокрема для мод  $(A_1^*)_4$  і  $(A_1)_2$  для крісельних і зигзагних NT призводить до виникнення дублету в спектрі КР світла в області  $1380.4 \text{ cm}^{-1}$ . Таким чином вперше встановлено фізичну природу спостережуваного експериментально (для BN-SWNT) дублету, як такого, що обумовлений хіральною анізотропією коливальних мод.

3. З даних комп'ютерних розрахунків зроблено висновок про те, що компонента хірного дублету  $1377.5 \text{ cm}^{-1}$  обумовлена коливанням  $(A_1^*)_4$  крісельних NT, де зміщення атомів перпендикулярні осям трубок, а компонента дублету  $1359.0 \text{ cm}^{-1}$  обумовлена коливанням  $(A_1)_2$  зигзагних NT, при якому зміщення атомів паралельні осям трубок.

5. Інтенсивності компонент цього дублету відображають вміст крісельних та зигзагних NT в їх суміші, що дає можливість використовувати співвідношення інтенсивностей компонент дублету для хіральної діагностики NT, а величини хірного розщеплення дублету – для діагностики їх діаметрів.

ев. 1979, 188 с.

4. E.A.Wood. The 80 diperiodic groups in three dimensions. Bell System Techn. J., 43, №1, 541-559 (1964).
5. R. Arenal, A.C. Ferrari, S. Reich, L. Wirtz, J.-Y. Mevellec, S. Lefrant, A. Rubio, A. Loiseau. Nano Lett., 6 (8), 1812-1816 (2006).

Надійшла до редколегії 08.04.2007.

#### Список використаних джерел

1. Губанов В.О., Білий М.М., Дмитренко О.П., Ковригін С.В., Комарова Л.О., Куліш М.П., Лізунова С.В., Покропивний В.В. Вісник Київського університету, серія: фіз.-мат. науки, №2, 385-406 (2006).
2. I. Wirtz, A. Rubio, R.A. Concha, A. Loiseau. Phys. Rev. B, 68, 045425-1-045425-13 (2003).
3. А.В. Курдюмов, А.Н. Пилякевич. Фазовые превращения в углероде и нитриде бора. Изд. «Наукова думка», Ки-



УДК 519.9

Дзисюк\* Н.Р., Каденко І.М., доктор фіз.-мат наук, завідувач кафедри ядерної фізики, Майданюк В.К. кандидат фіз.-мат наук

## Особливості визначення перерізу ядерної реакції $^{72}\text{Ge}(n,2n)^{71}\text{Ge}$

З використанням активаційного методу експериментально визначено переріз ядерної реакції  $^{72}\text{Ge}(n,2n)^{71}\text{Ge}$  та зроблено теоретичну оцінку функції збудження даної реакції. Для зменшення статистичної похибки враховано ефекти самопоглинання гамма-квантів у зразку. Дана реакція викликає інтерес з точки зору відсутності подібної інформації у сучасних експериментальних базах ядерних даних.

Ключові слова: нейтронно-ативаційний метод, переріз реакції, самопоглинання

N.R. Dzysiuk\*, Dr. I.M. Kadenko, Head of Nuclear physics department, PhD V.K. Maidanyuk

## Peculiarity of cross section's determination of $^{72}\text{Ge}(n,2n)^{71}\text{Ge}$ nuclear reaction

Cross section for nuclear reaction  $^{72}\text{Ge}(n,2n)^{71}\text{Ge}$  has been determined with using of neutron-activation method and excitation function for this nuclear reaction has been calculated as well. The self-absorption effects have been taken into account. The information concerning nuclear reaction considered is interesting from the point of view of absence of such experimental information in modern nuclear data bases.

Key Words: neutron-activation, cross-section, self-absorption

\*E-mail: dzysiuk@univ.kiev.ua

Ядерно-фізичні вимірювання як з методичної точки зору, так і шляхом використання отриманих результатів відіграють помітну роль у багатьох сферах людської діяльності. Дослідження взаємодії нейтронів у широкому енергетичному діапазоні є важливими з точки зору вдосконалення теорії ядерних реакцій та необхідності високо надійних експериментальних даних для перевірки

що знаходять своє місце і для реєстрації швидких нейтронів [2,3].

Переріз досліджуваної ядерної реакції визначався з використанням нейтронно-активаційного методу [4] відносно опорного перерізу ядерної реакції  $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$ .

Для розрахунку перерізу реакції, що досліджувалась, використовувався наступний вираз (1):

$$\sigma_x = \frac{S_x \cdot \varepsilon_m \cdot (1 - e^{-\lambda_m t_{opr}}) e^{-\lambda_m t_{vitr\_m}} (1 - e^{-\lambda_m t_{вим\_m}}) N_m n_\gamma \lambda_x}{S_m \cdot \varepsilon_x \cdot (1 - e^{-\lambda_x t_{opr}}) e^{-\lambda_x t_{vitr\_x}} (1 - e^{-\lambda_x t_{вим\_x}}) N_x n_\gamma \lambda_m} \sigma_m \quad (1)$$

теоретичних моделей та практичних застосувань. Ядерна реакція  $^{72}\text{Ge}(n,2n)^{71}\text{Ge}$  викликає інтерес через відсутність інформації в експериментальній базі ядерних даних EXFOR [1], а також у зв'язку з актуальністю, відміченою у [2], де обґрунтовано необхідність саме експериментально визначених перерізів по вказаній реакції. Така необхідність пов'язана з тенденцією розвитку сучасного реакторобудування ядерних енергоблоків нового покоління та широким використанням детекторів на основі германію,

$\sigma_x$  - переріз досліджуваної реакції;

$\sigma_m$  - переріз опорної реакції на моніторі;

$t_{opr}$  - час опромінювання зразка та монітора;

$t_{vitr\_x}, t_{vitr\_m}$  - час витримки зразка та монітора;

$t_{вим\_x}, t_{вим\_m}$  - час вимірювання спектрів зразка та монітора;

$N_x, N_m$  - кількість ядер матеріалу зразка та монітору;



$n_{\gamma x}, n_{\gamma m}$  - вихід  $\gamma$ -квантів на розпад  
для відповідної  $\gamma$ -лінії спектру зразка  
та монітора;  
 $\epsilon_x, \epsilon_m$  - відносна ефективність реєстрації  
 $\gamma$ -квантів детектором по піку повного  
поглинання для ліній зразка та монітора;  
 $S_x, S_m$  - площі піків повного поглинання  
 $\gamma$ -квантів зразка та монітора;  
 $\lambda_x, \lambda_m$  - постійна розпаду радіоактивних  
ядер- продуктів активації зразка та монітора,  
( $\lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}}$ ).

Експерименти підготовлено та проведено  
на кафедрі ядерної фізики. Джерелом  
нейтронів слугував нейтронний генератор НГ-  
300/15 [5], що являє собою електростатичний  
низьковольтний прискорювач заряджених  
частинок - дейтронів (легких ізотопів водню).  
Енергія дейтронів становила  $\sim 220$  кеВ.  
Нейтрони з енергією  $\sim 14$  МеВ генерувалися в  
реакції  $T(d,n)^4He$ .

В експерименті використано зразки із  
природного германію діаметром 10 мм та  
товщиною 0.7 мм. Час опромінювання  
становив 140хв. Досліджувані фольги із  
природного германію опромінювали  
нейтронним потоком впритул до тритісвої  
мішені, забезпечивши кут  $120^\circ$  та  $150^\circ$  між  
напрямком вісі зразка та пучка дейтронів.  
Зразки обгорталися фольгами з індію та  
кадмію для зменшення впливу фонових  
нейтронів, що виникають при розсіянні  
швидких нейтронів на конструкційних  
матеріалах генератора та стінках  
вимірювальної зали. Бралися дві фольги  
алюмінію, між якими розміщували зразок  
германію для усереднення нейтронного  
потoku. Середня енергія нейтронів при  
такій геометрії становила 13.67МеВ та  
13.32МеВ, що додатково було  
експериментально встановлено з  
використанням Zr/Nb методу [6]. Густина  
нейтронного потоку експериментально  
визначалася по гамма-спектрам продуктів  
активації і на момент опромінювання  
германієвих фольг становила

$1.6 \cdot 10^8 \frac{\text{нейтронів}}{\text{см}^2 \cdot \text{с}}$ . При цьому вихід  
нейтронів у НГ-300/15 підтримувався  
стабільним у часі з похибкою  $\leq 5\%$ .

В результаті ядерної реакції  
 $^{72}Ge(n,2n)^{71}Ge$  утворюється ядро - продукт-  
активації  $^{71}Ge$ , має короткоживучий ізомер з  
періодом напіврозпаду 20 мс, що розпадається  
безпосередньо в основний стан ядра  $^{71}Ge$ .  
Основний стан з періодом напіврозпаду 11,4  
днів розпадається внаслідок К-захоплення в  
ядро  $^{71}Ga$  (Рис.1). Оскільки час життя ядра

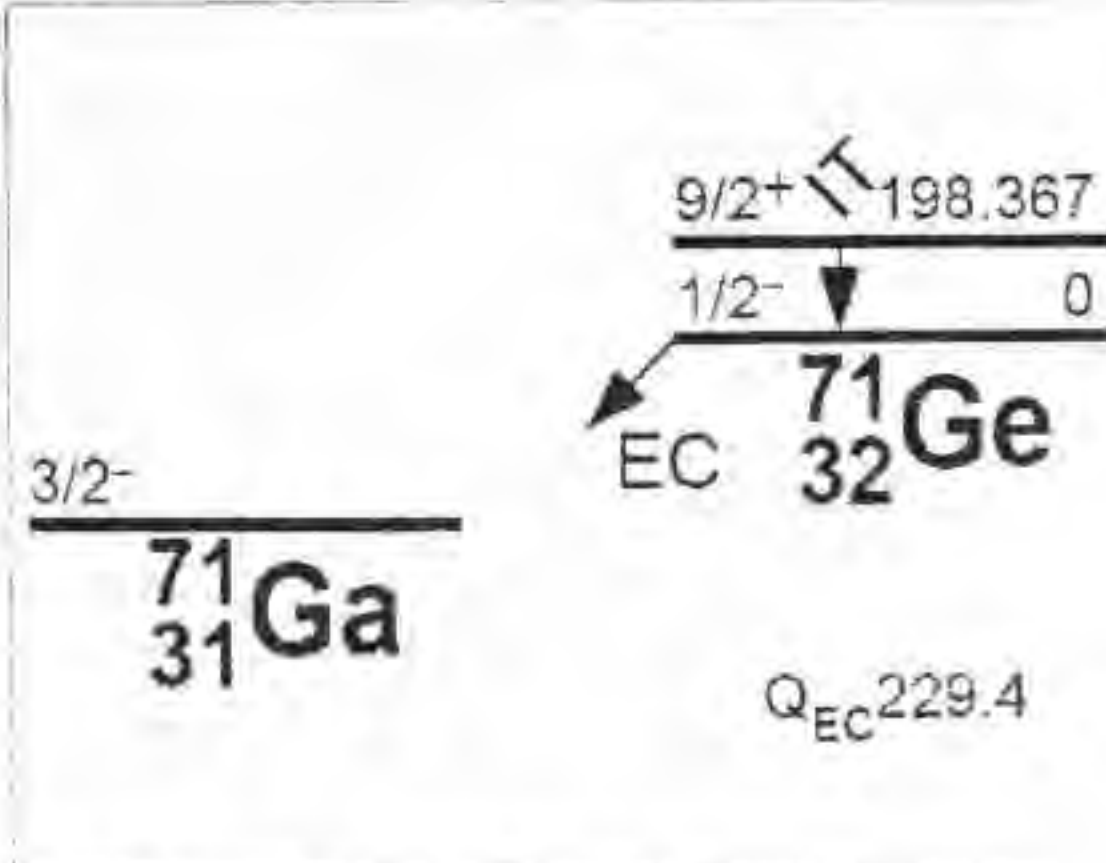


Рис 1. Схема розпаду ядра  $^{71}Ge$ .

$^{71}Ge$  в ізомерному стані є малим, переріз його  
утворення виміряти не вдалося, тому в  
експерименті фактично здійснено  
вимірювання перерізу реакції  
 $^{72}Ge(n,2n)^{71(g+m)}Ge$ . Для визначення цього  
перерізу вимірювалися аналітичні спектри  
характеристичного випромінювання атома  
галію. При цьому використано спектрометр на  
основі планарного германієвого детектора з  
тонким входним берилієвим вікном (діаметр -  
10мм, товщина кристалу - 0,7мм, товщина  
берилієвого вікна - 127 мкм). Спектри  
вимірювалися в неперервному режимі  
протягом 5 діб, після чого їх обробка  
проводилася спектрометричним пакетом  
WinSpectrum-2.2 [7]. На Рис.2 представлено  
один із результатів обробки спектру. Після  
калібровки по енергії, форми піків та  
ефективності реєстрації квантів проведено  
декомпозицію піків, що відповідають  
характеристичним квантам К-серії атома  
галію. При визначенні перерізу реакції  
використано відповідну суму ( $k_{\alpha 1} + k_{\alpha 2}$ )



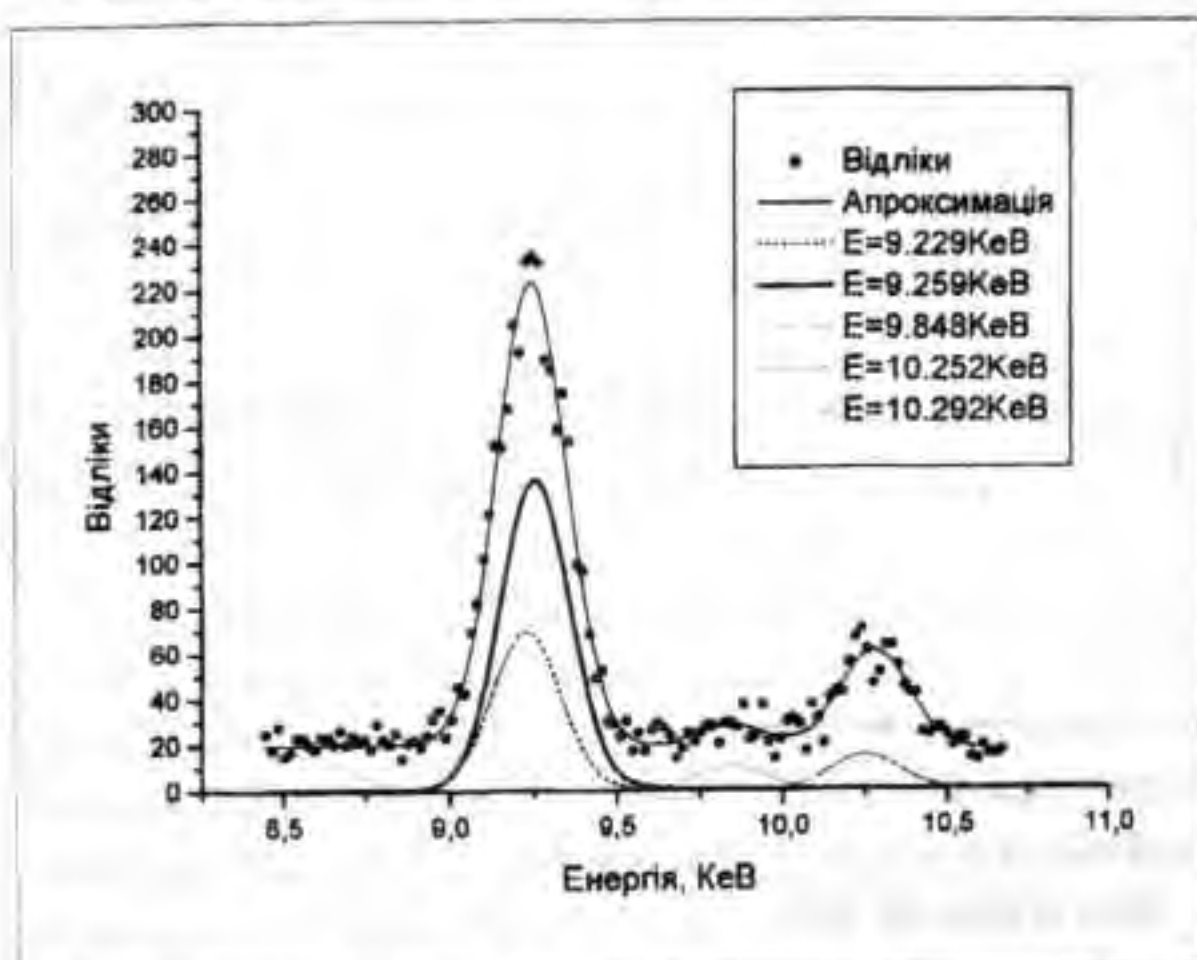


Рис.2 Ділянка апаратного спектру характеристичного випромінювання ядра галію

Оскільки зразки є неточковими джерелами та мають скінченні розміри, треба враховувати ефект самопоглинання характеристичних квантів у зразку, тим більше, – що при енергії квантів 9.2 KeV цей ефект є

ефективність реєстрації квантів з урахуванням самопоглинання має вигляд:  $\varepsilon = \varepsilon_{\text{exp}} \cdot \frac{\varepsilon_{\text{point}}}{\varepsilon_{\text{score}}}$ ,

де:  $\varepsilon_{\text{point}}$  – розрахована ефективність для точкового джерела;

$\varepsilon_{\text{score}}$  – розрахована ефективність для об'ємного джерела;

$\varepsilon_{\text{exp}}$  – експериментально визначена ефективність.

Для порівнювання експериментально отриманих значень перерізів також теоретично розраховано функцію збудження реакції в діапазоні енергій 11-16 MeV з використанням сучасного програмного коду TALYS-0.64 [8], що дозволяє проводити

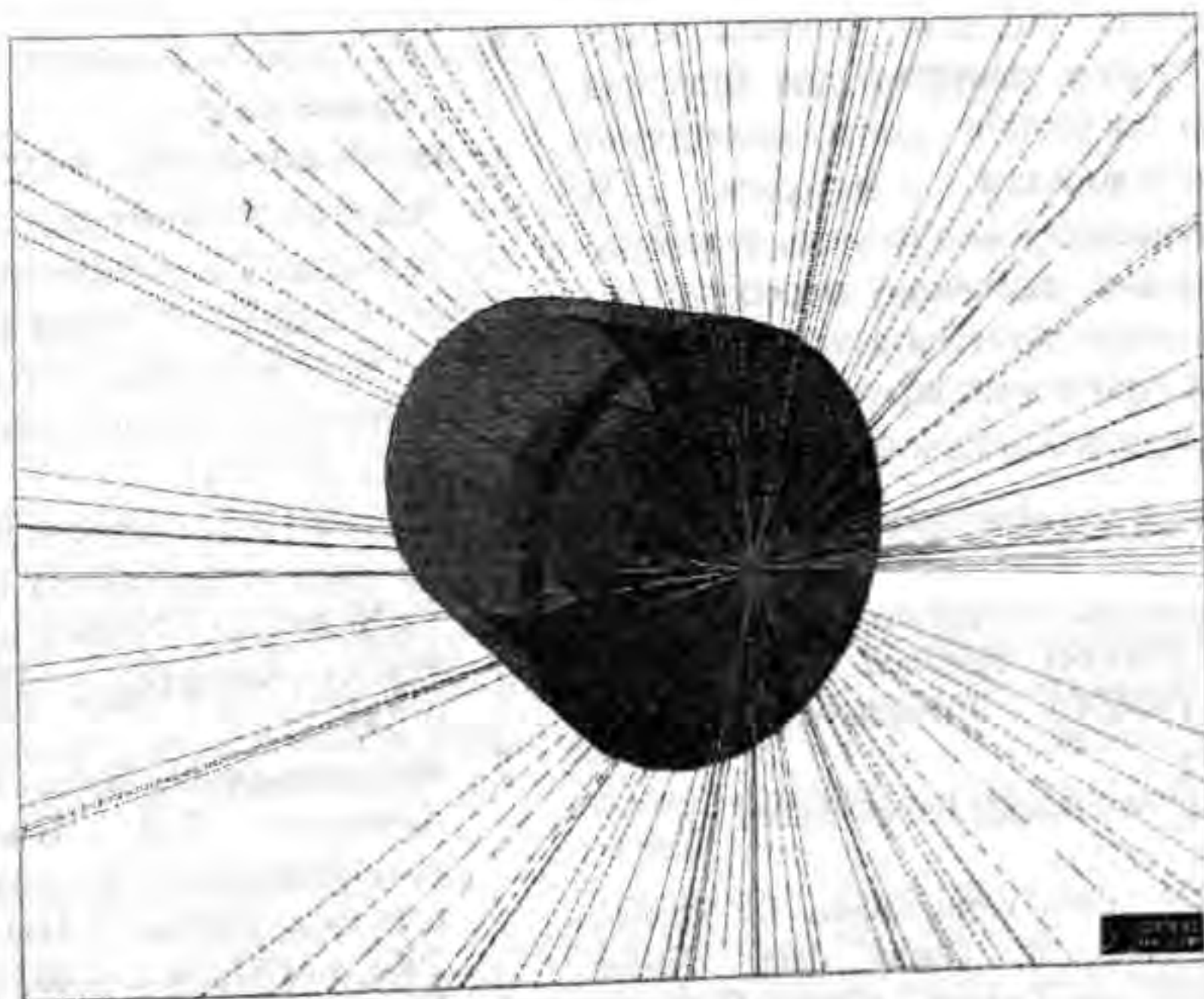


Рис.3 Модель планарного детектора створена кодом Geant4

особливо помітним. Для врахування цього використано модель детектора (Рис.3). Валідацію використаної моделі виконано по експериментально визначеним значенням ефективності ( $^{241}\text{Am}$ ). На першому етапі розраховувалася ефективність точкового джерела, а потім виконувався перехід до реального об'ємного джерела. Поправка на

аналіз ядерних реакцій при взаємодії нейтронів з ядрами в широкому енергетичному діапазоні. На Рис.4 представлено розраховану функцію збудження реакції  $^{72}\text{Ge}(n,2n)^{71}\text{Ge}$  в діапазоні енергій нейтронів 11-16 MeV за допомогою коду TALYS 0.64,



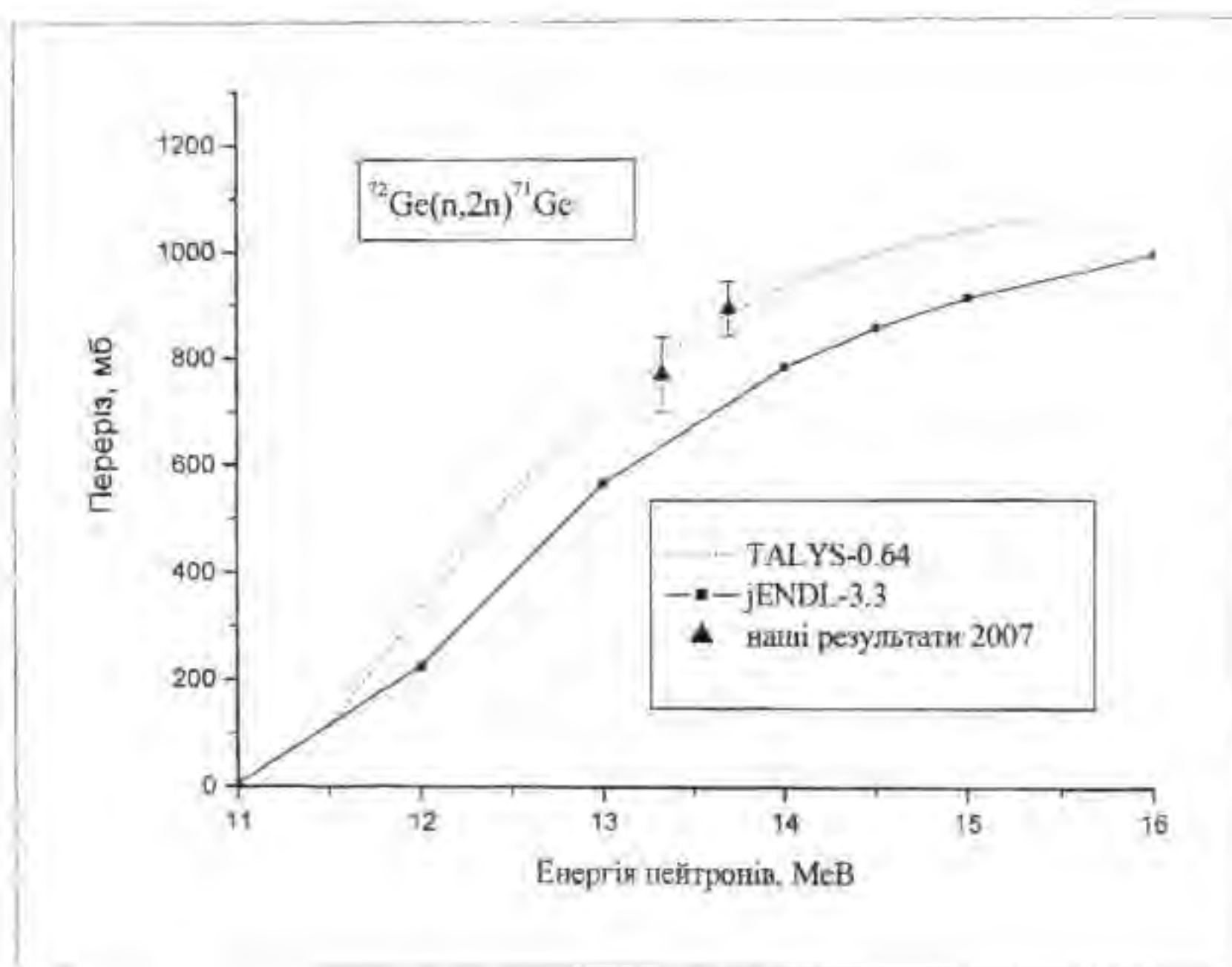


Рис.4 Експериментальні результати з теоретично розрахованими

дані взяті із бази оцінених ядерних даних JENDL 3-3; також наведено два значення перерізів, що визначені експериментально нейтронно-активаційним методом. В результаті проведених вимірювань отримано два оригінальних значення перерізу, які досить добре узгоджуються з теоретичними розрахунками, при цьому використовувалась статистична модель Хаузера-Фешбаха [8].

#### Список використаних джерел

1. Cross section information storage and retrieval system (EXFOR) National Nuclear Data Center (NNDC), Brookhaven National Laboratory, USA. – <http://www.nndc.bnl.gov/index.jsp> (online).
2. Forrest R.A. Data requirements for neutron activation Part II: Decay data // Fusion Engineering and Design. -2006, -V.81 –P. 2157-2174
3. Koning A.J, Duijvestijn M.C New nuclear data evaluations for Ge isotopes // Nucl.Instr.and Meth. In Physics ResearchB// - 2006,- Vol.248.-P.197-224

4. Маслов И.А., Лукницкий В.А. Справочник по нейтронному активационному аналізу// Л.: Изд-во "Наука", Ленингр.отд., – 1971, –с. 312
5. Применко Г.И., Майданюк В.К., Неплюев В. М., Седов Ю.А., Тараканов В.К. Генератор 14 МэВ нейтронов с потоком  $5 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$  // Приборы и техника эксперимента, – 1989, № 6, –с. 39–41
6. Agrawal H.M., Pepelnik R. Determination of the mean neutron energy using the Zr/Nb and the Ni method // Nuclear Instrum. and Meth. in Physics Research, – 1995, Vol. A366, – P. 349–353
7. Желтоножский В.А., Стрильчук Н.В., Хоменков В.П. Изучение эффектов проникновения в l-запрещенном M1-переходе  $^{147}\text{Pm}$ . // Изв. РАН, сер.физ., - 2003, том 67, № 5, -с.683-685
8. Koning A.J., Hilaire S. and M.C. Duijvestijn "Talys:Comprehensive nuclear reaction modeling" // Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology-ND –2004, Sep 26-Oct.1, Santa Fe, USA

Надійшла до редколегії 30.03.2007



УДК 539.213

Захаренко\* М. І., канд.фіз.-мат.наук, доцент,  
Семен'ко<sup>о</sup> М. П., канд.фіз.-мат.наук, доцент

### Структурна релаксація аморфних сплавів в неізотермічних умовах

На основі існуючих уявлень про релаксацію аморфних структур при ізотермічних відпадах одержано рівняння, яке описує ці процеси в умовах неперервного нагріву з постійною швидкістю. Дане рівняння добре описує процеси релаксації аморфного сплаву Co-Si-B. Одержані параметри узгоджуються з наявними в літературі даними.

Ключові слова: аморфні сплави, релаксація, енергія активації.

\*E-mail: zakharenko@univ.kiev.ua; <sup>о</sup>E-mail: smp@univ.kiev.ua

Аморфні тверді тіла, в тому числі і аморфні металеві сплави (АМС), є метастабільними системами. Дослідження їх структурного стану показало, що незалежно від методу отримання ці системи не знаходяться в стані метастабільної рівноваги. Перехід до стану метастабільної рівноваги, характерної для даної аморфної системи при визначених зовнішніх умовах, супроводжується зміною фізичних властивостей. Наприклад, при неперервному нагріванні або ізотермічному відпаді нижче температури склування спостерігається збільшення густини, зміна пружних властивостей і магнітних властивостей, тощо. [1]. Зміна цих та інших властивостей зумовлена безпосередньо з процесами структурної релаксації, тобто поступовим досягненням структурою стану метастабільної рівноваги [2]. Такі процеси можуть суттєво змінювати функціональні параметри виробів з АМС і є актуальними для вивчення.

Швидкість наближення нерівноважної структури до стану метастабільної рівноваги при певній температурі  $T$  можна прийняти пропорційною ступеню нерівноважності структури. Якщо взяти за міру нерівноважності структури різницю  $(r-r_\infty)$ , де  $r$  та  $r_\infty$  – значення структурних параметрів (а, відповідно, певної фізичної величини) аморфної структури в момент часу  $t$  і в стані метастабільної рівноваги при температурі  $T$ , відповідно, то

$$\frac{d(r-r_\infty)}{dt} = -\frac{(r-r_\infty)}{\tau}, \quad (1)$$

M. I. Zakharenko\*, Ph.D.,  
M. P. Semen'ko<sup>o</sup>, Ph.D.

### Structural relaxation of the amorphous alloys under non-isothermal conditions

Reasoning from the available ideas concerning the relaxation of amorphous structures the equation describing these processes under continuous heating with the steady rate has been derived. This equation has been used to describe the relaxation processes in Co-Si-B amorphous alloys. The obtained parameters are in a fairly good agreement with reference data.

Key Words: amorphous alloys, relaxation, activation energy.

де,  $\tau$  – час релаксації, який залежить від температури як:

$$\tau(T) = \tau_0 \exp\left[\frac{E}{kT}\right]. \quad (2)$$

Тут  $\tau_0$  – передекспоненційний множник,  $E$  – енергія активації процесу релаксації.

У більшості випадків дослідження релаксації проводиться в ізотермічних умовах ( $T=\text{const}$ ). В цьому випадку розв'язком рівн.(1) є:

$$r(t) = r_0 + A \cdot \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{t}{\tau(T)}\right] \right\}, \quad (3)$$

де  $r_0$  – значення фізичної величини в початковий момент часу,  $A$  – амплітуда релаксаційного процесу ( $A=r_\infty-r_0$ ). В загальному випадку значення величин  $r_\infty$ ,  $r_0$ , а отже і  $A$ , є функціями температури.

Рівняння в такому вигляді та дещо модифіковане рівняння, яке враховує існування розподілу енергій активацій, досить часто використовується для аналізу релаксаційних процесів [2-4].

Однак цілком логічним є той факт, що релаксація структури може відбуватися і в умовах неперервного нагрівання. Зокрема, у випадку нагріву з постійною швидкістю  $v$  температура  $T=T_0+vt$ , де  $T_0$  – температура в початковий момент часу. Тоді рівн. (1) набуде вигляду:

$$\frac{d(r-r_\infty)}{dT} = -\frac{(r-r_\infty)}{v\tau}. \quad (4)$$



Його розв'язок:

$$r(T) = r_0 + A \left( 1 - \exp \left[ - \frac{J}{v\tau_0} \right] \right), \quad (5)$$

де,  $A = r_\infty - r_0$ , але  $r_0$  – значення структурного фактору, або фізичної величини при кімнатній температурі.  $J$  – означає інтеграл:

$$J = \int_{T_0}^T dT' \exp \left[ - \frac{E}{kT'} \right],$$

Легко показати, що

$$J = \frac{E}{k} \left\{ \frac{kT}{E} \exp \left[ - \frac{E}{kT} \right] - \frac{kT_0}{E} \exp \left[ - \frac{E}{kT_0} \right] \right\} + \\ + \frac{E}{k} \left\{ Ei \left[ - \frac{E}{kT} \right] - Ei \left[ - \frac{E}{kT_0} \right] \right\},$$

де  $Ei(x)$  – інтегральна показникова функція, яка є габульована [5] і визначається рівнянням:

$$Ei(x) = \int_0^x \frac{e^y}{y} dy,$$

а  $x = E/kT$ .

Енергія активації  $E$  для релаксацийних процесів складає величину 1-2 еВ [3,4]. Врахувавши що  $E/kT$  та  $E/kT_0 \gg 1$ , використавши для цього випадку розклад  $Ei(x)$  в ряд у вигляді [5],

$$Ei(x) = e^x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} x^{-n-1}$$

та обмежившись лише двома членами ряду легко отримати:

$$r \approx r_0 + A \left\{ 1 - \exp \left[ - \frac{(kT^2)/(vE)}{\tau_0 \exp(E/kT)} \right] \right\}. \quad (6)$$

Порівнюючи дане рівняння та рівн. (3), видно, що аналогом часу у випадку неперервного нагріву є величина  $(kT^2)/(vE)$ . Відмітимо, що таку ж аналогію було отримано при аналізі кінетики кристалізації в неізотермічних умовах [6].

Експериментальну перевірку рівн. (6) було проведено шляхом дослідження впливу таких релаксацийних відпалів на електричний опір при

кімнатній температурі АМС  $\text{Co}_{0.83}\text{Fe}_{0.5}\text{Si}_{1.8}\text{B}_{1.0}$ . Для цього проводили вимірювання електричного опору зразків у вихідному стані та після нагрівання зі швидкістю  $v=20$  К/хв до певної температури  $T$  з наступним швидким охолодженням ( $\sim 150$  К/хв). Оскільки електричний опір безпосередньо пов'язаний з особливостями атомної структури, то його зміни в цьому випадку однозначно зв'язані з процесами релаксації. Через те, що значення опору визначали при кімнатній температурі, то параметр  $A$  є сталим для всіх зразків, незалежно від температури релаксації. В цьому випадку можемо записати:

$$x = \frac{r - r_0}{r_\infty - r_0} = 1 - \exp \left[ - \frac{(kT^2)/(vE)}{\tau_0 \exp(E/kT)} \right] \quad (7)$$

На рис.1 показана залежність експериментального значення  $x$  від температури відпалу. Як видно з рис. 1, характерною особливістю отриманої залежності є наявність двох температурних інтервалів росту електричного опору. Така поведінка дає можливість припустити існування двох фізичних механізмів структурної релаксації, які відрізняються параметрами. Вважаючи, що кожен релаксацийний процес проходить незалежно один від одного, легко показати, що:

$$x = A_1 \left\{ 1 - \exp \left[ - \frac{(kT^2)/(vE_1)}{\tau_{01} \exp(E_1/kT)} \right] \right\} + \\ + A_2 \left\{ 1 - \exp \left[ - \frac{(kT^2)/(vE_2)}{\tau_{02} \exp(E_2/kT)} \right] \right\} \quad (9)$$

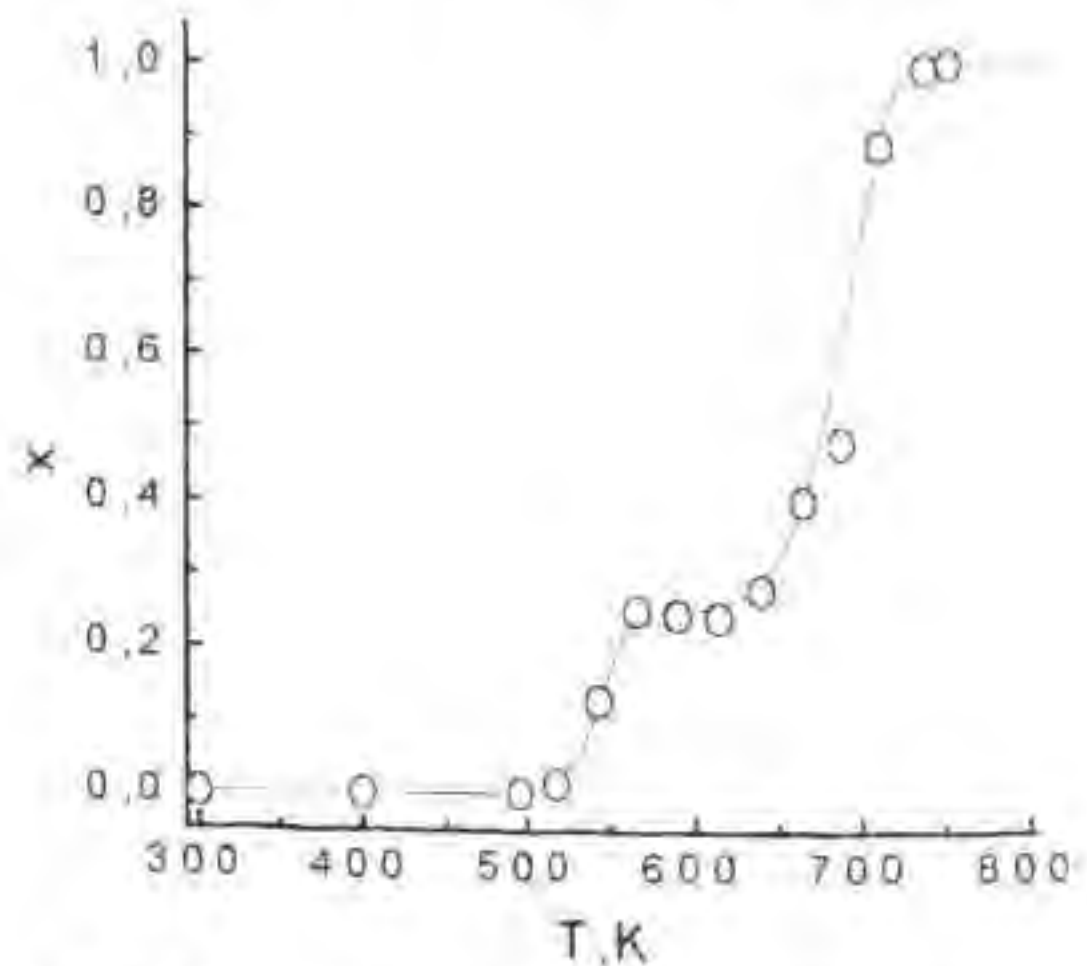


Рис.1. Залежність  $x$  від температури відпалу  $T$  (значки – експеримент, ліня – розрахункова залежність з параметрами, наведеними в тексті).



де,  $A_1$  та  $A_2$  – відносні амплітуди кожного релаксацийного механізму, причому  $A_1 + A_2 = 1$ . Для залежності, наведеної на рис. 1,  $A_1 = 0.25$ ,  $A_2 = 0.75$ .

Методом найменших квадратів нами були одержані такі параметри для двох механізмів релаксації:  $E_1 = 1.8 \pm 0.2$  еВ,  $\tau_{01} = (4 \pm 2) \cdot 10^{-15}$  с та  $E_2 = 1.8 \pm 0.1$  еВ,  $\tau_{02} = (4 \pm 1) \cdot 10^{-12}$  с. Кожен з механізмів аналізувався нами окремо, причому для зручності проводився аналіз залежностей  $\ln(-\ln(1-x))$ . Розрахована з урахуванням амплітуд  $A_1$  та  $A_2$  залежність  $x(T)$  показана на рис. 1 суцільною лінією. Як видно, одержано цілком узгодження між експериментальними та розрахованими значеннями.

Наведені значення  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $\tau_{01}$  і  $\tau_0$  цілком коректні і добре узгоджуються з результатами, одержаними при ізотермічних відпадах [3,4]. Різниця між часовими константами для двох релаксацийних процесів також може знайти цілком логічне пояснення. Дійсно, при високих  $T$  процес структурної релаксації проходить шляхом зміни хімічного ближнього порядку в результаті перескоків атомів, а при низьких – за рахунок змін міжатомних віддалей [2,3]. У першому випадку  $\tau_0$  за порядком величини дорівнює оберненій дебаєвській частоті ( $10^{-12} \div 10^{-13}$  с) [2], а в другому – може бути значно меншим [3]. Питання про те, чому значення  $E_1$  та  $E_2$  виявилися практично однаковими, є доволі складним і потребує додаткових експериментальних досліджень.

## Список використаних джерел

1. Аморфные металлические сплавы. Под ред. Люборского Ф.Е.. – М.: Металлургия, 1987. – 464с.
2. Золотухин И.В., Калинин Ю.Е. Аморфные металлические сплавы // УФН. – 1990. – вып.9. – С.75-110.
3. Andrejco R., Vojtanik P. Influence of Cr on some structural and magnetic properties of amorphous Co-based alloys // J.Magn.Magn.Mater. – 1999. – 196-197. – P.230-232.
4. Csach K., Haruyama O., Ocelik V., Kasadova A. Isothermal structural relaxation of  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$  metallic glass in the relaxation times spectrum model // Mater.Sci.Eng. – 1997. – A226-A228. – P.192-196.
5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1984. – 832 с.
6. Набережных В.П., Лимановский А.И., Ткач В.И., и др. Влияние скорости нагрева на размер зерна и кинетику кристаллизации аморфного сплава  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$  // ФММ – 1988. – 66, вып.1. – С.169-177.

Надійшла до редколегії 20.10.2006



УДК 537.32

Копань Ю.В.,  
Хуторянська Н.В.,  
Копань В.С.

## Деформування металевого скла шліфуванням

Пластична деформація  $\Delta l/l \approx 0,6\%$  аморфного сплаву  $Fe_{73}Si_{15.8}B_{7.2}Cu_1Nb_3$  зростає до  $\Delta l/l \approx 2\%$  після шліфування. Це обумовлено тим, що канавки від шліфування поверхні є зародками смуг ковзання. У процесі шліфування одної сторони стрічки аморфного сплаву вона згортається в циліндр.

Ключові слова: аморфний сплав, пластична деформація, шліфування.

U. Kopan,  
N. Hutoryanska,  
V. Kopan

## The deformation of amorphous alloy by grinding.

The plastic deformation  $\Delta l/l \approx 0,6\%$  of amorphous alloy  $Fe_{73}Si_{15.8}B_{7.2}Cu_1Nb_3$  rise to  $\Delta l/l \approx 2\%$  after grinding. This is because scratch of grinding is by origin of deformation band. In the process of grinding one surface the tape roll up in an cylinder.

Key Words: amorphous alloy, plastic deformation, grinding.

\*E-mail: kopa@pulsary.com.ua

В роботі [1] повідомлялось, що, при поступально - зворотньому шліфуванні паралельно довільно вибраному напрямку ОХ стрічка аморфного сплаву згортається в циліндр з твірною, паралельною ОХ, причому шліфована поверхня розташовується назовні циліндру. Діаметр циліндра тим менший, чим довше шліфується поверхня. Шліфування поверхні по колу спричинює утворення сегменту кулі.

Внаслідок згравлювання шліфованої поверхні або відпаду зразок знову приймає початкову плоску форму.

Мета роботи: дослідити явище пластичного деформування аморфного металевого скла (АМС), спричинене шліфуванням.

АМС номінального складу  $Fe_{73}Si_{15.8}B_{7.2}Cu_1Nb_3$  були виготовлені у формі стрічок шириною 17 мм і товщиною 0,023 мм методом спінітування розплаву. Автори висловлюють вдячність Маслову В.В. і Носенку В.К. (ІМФ НАН України) за надані нам зразки.

## Експериментальні результати та їх обговорення

Деформація шліфуванням здійснювалась наступним чином. Відрізок стрічки АМС прикріпляли на одному кінці механічним затискачем до латунної пластини товщиною 5 мм. Вона служила опорою і радіатором. Тому температура стрічки при шліфуванні не перевершувала 100°C. Шліфування фетровим кругом, на який наносилась алмазна паста, здійснювалось впоперек поздовжньої вісі

стрічки. Внаслідок цього вона закручувалась у циліндр так, що мікроканавки шліфування служили твірною циліндра. Якщо шліфована поверхня залишалась зовні циліндру, то деформацію згинання вважали додатною (з додатнім радіусом кривини  $R$ ).

Густина канавок шліфування (їх кількість на  $cm^2$  поверхні)  $\rho$  - це важливий параметр, що впливає на пластичну деформацію АМС. При розтягуванні, наприклад, стрічок АМС пластична деформація здійснюється в умовах площинного напруженого стану [2, 3], коли на поверхні виникають смуги ковзання. Вони зароджуються на одному ребрі стрічки і поширюються до другого. При цьому утворюється смуга-лідер, в якій і зосереджується деформація. Тому зразок руйнується при малій відносній деформації, тобто - крихко. Щоб збільшити деформацію, і наблизити її до пластичної, необхідно на поверхні стрічки утворити зародки смуг ковзання. Чим більше смуг, тим більша пластична деформація. Зародками смуг можуть бути канавки шліфування. Тому їх густину  $\rho$  необхідно контролювати. Із загальних міркувань механіки шліфування впливає, що

$$\rho = \frac{2\pi\alpha v r t}{vd} \quad (1)$$

де  $v$  - частота абразивного круга радіуса  $r$ ,  $v$  - швидкість подачі круга паралельно вісі обертання,  $d$  - розмір зерна абразиву,  $t$  - час,  $\alpha$  - технологічний параметр станка.



З формули (1) випливає, що необхідно контролювати щонайменше 5 параметрів ( $v$ ,  $r$ ,  $t$ ,  $v$ ,  $d$ ).

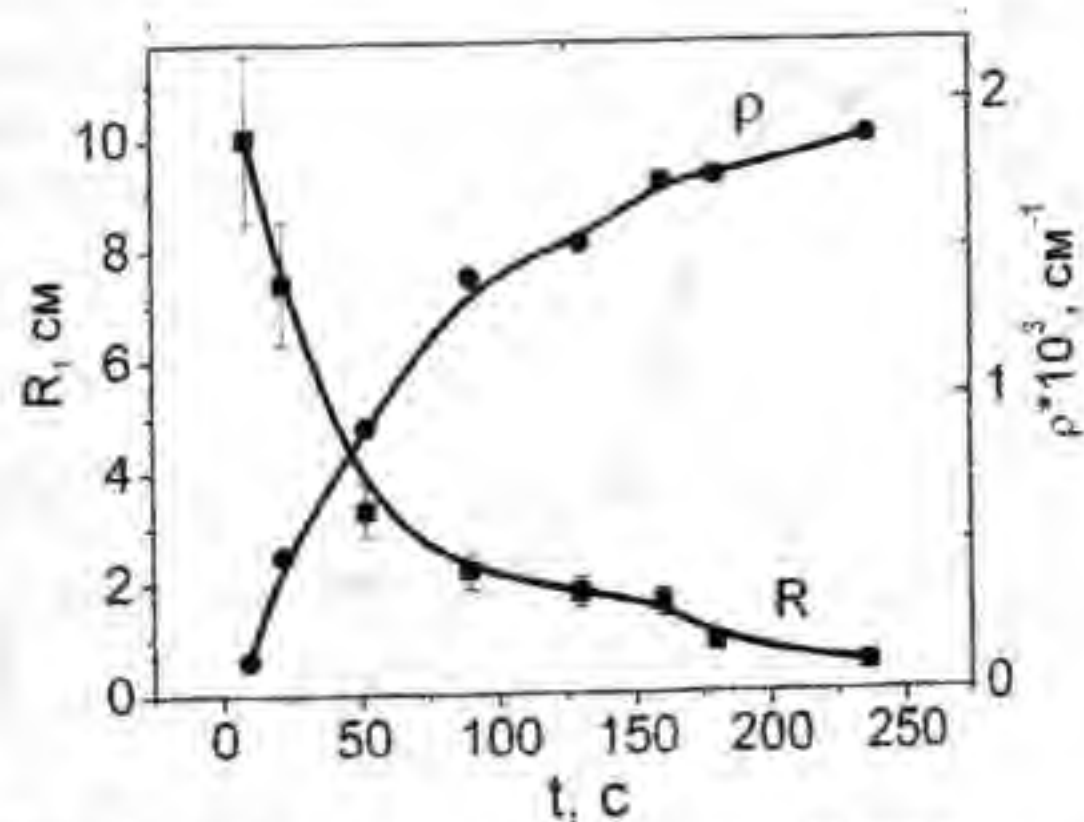


Рис. 1. Залежність радіуса кривини  $R$  стрічки АМС та густини канавок  $\rho$  від часу шліфування  $t$ .

На рис. 1 наведено залежність радіуса кривини  $R$  стрічки від часу шліфування її поверхні, що при спінінгуванні розплаву контактувала з поверхнею мідного диску („дзеркальна” поверхня). Технологічні параметри процесу шліфування були такими:  $d=8\pm 1$  мкм,  $v=5$  об/с,  $r=15$  мм,  $v=10$  см/с.

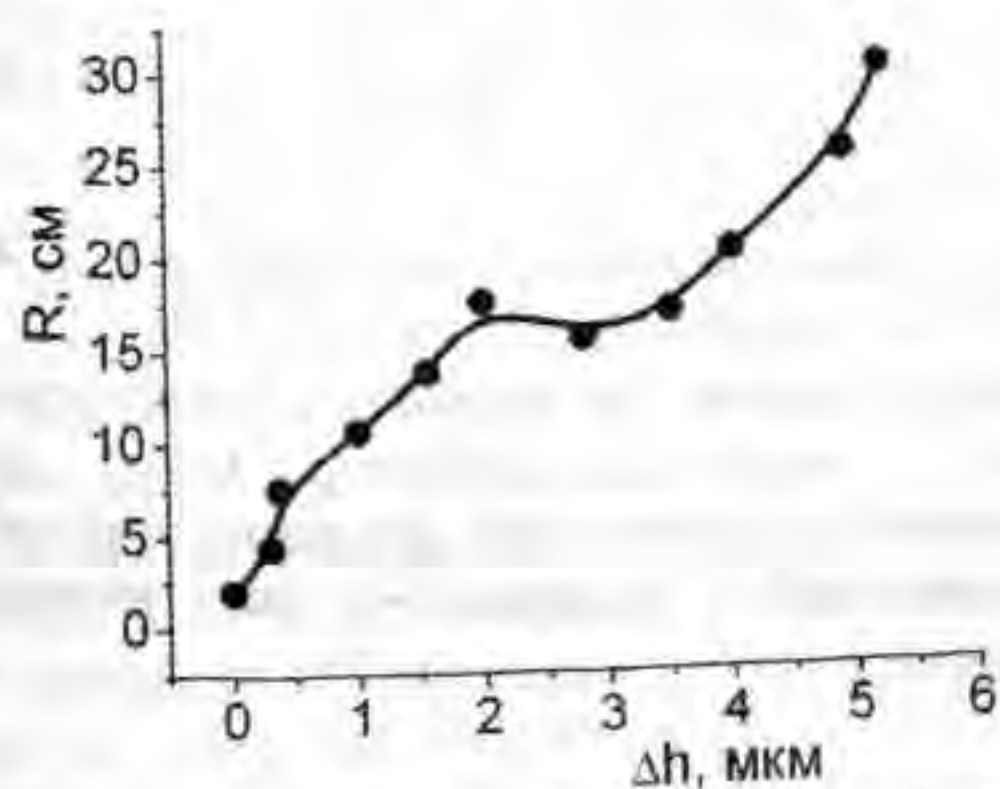


Рис. 2. Залежність радіуса кривини  $R$  стрічки АМС від товщини зтравленого шару  $\Delta h$ .

Густину канавок визначали, вимірюючи середню відстань між ними за допомогою мікроскопу. Профіль канавок переважно трапецеїдальний, зрідка – трикутний, глибина канавок становила 1-3 мкм.

В процесі розчинення шліфованого шару в „царській горілки” ( $\text{H}_2\text{O}-\text{HCl}-\text{HNO}_3$ ) стрічка АМС випрямляється (радіус кривини зростає) і стає плоскою (якою була до шліфування пастою) після розчинення шару товщиною  $\Delta h=4-5$  мкм (рис.2).

На рис. 3 наведено залежності радіуса кривини  $R$  від часу відпалу при  $620^\circ\text{C}$  для двох зразків, прошліфованих при тих же умовах, що і попередні (рис. 1), але час шліфування підбирався так, щоб форма зразка співпадала з дугою сегмента кола висотою 45 мм та основою 10 мм. Один із зразків (крива 1) був при шліфуванні аморфним, другий (крива 2) – у стані після кристалізації при  $500^\circ\text{C}$  протягом 20 хвилин.

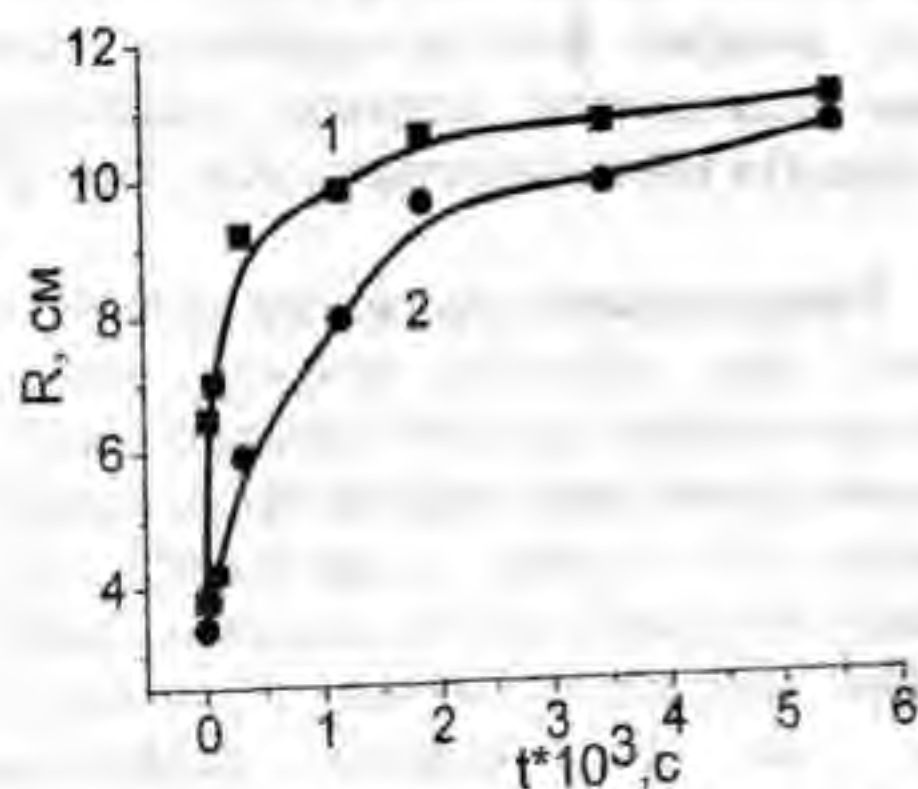


Рис. 3. Зміна радіусів кривини аморфної (1) і кристалічної (2) стрічок в залежності від часу відпалу  $t$  при  $620^\circ\text{C}$ .

Спостерігаємо наступні закономірності.

- При шліфуванні алмазною пастою стрічки АМС, вона згортається у циліндр, твірна якого паралельна мікроканавкам, що виникають на поверхні під дією зерен абразиву.

- Товщина шару, в якому виникають в результаті шліфування напруги стискання, становить 3-4 мкм.

Явище згортання при шліфуванні стрічки сплаву у циліндр характерне як для аморфного, так і кристалічного стану. Енергії активації релаксації напруг при відпалі (рис.3) становлять  $E_a=290\pm 40$  кДж/моль (аморфний стан) та  $E_k=340\pm 30$  (кристалічний стан). Оскільки елементний склад та радіуси кривини зразків перед відпалом однакові, а  $E_k > E_a$  то це свідчить, що релаксація напруг здійснюється за рахунок „відпалу” різних дефектів будови. У кристалічному стані „відпалюються” вакансії, бівакансії і їх групи, а також дислокації. Для їх руху потрібна більша енергія, бо кристалічний стан упорядкований.

Які дефекти зникають при релаксації напруг в аморфному стані – сказати важко, бо немає єдиної теорії деформації аморфних сплавів [3, 5], існує багато моделей механізмів пластичності. Найбільшої уваги заслуговують наступні: моделі



вільного об'єму, адіабатичної деформації, дислокаційні, дез'юнкції [3].

В аморфній фазі дислокація – це витягнутий прошарок між сусідніми групами атомів, що рухаються одна відносно одної як намагнічені зерна в купі сталюого порошку. В аморфній фазі товщина ядра дислокації, величина і напрямок вектора Бюргера змінюються вздовж дислокації. В такій структурі між двома групами атомів можуть зустрічатись і дефекти дез'юнкції, тобто, дефекти розриву міжатомних зв'язків. Як би то не було, аморфна фаза метастабільна, сама насичена надлишковою енергією; релаксація напруг (рис.3) в ній здійснюється легше, тому  $E_e > K_a$ .

• Радіус кривини зростає при збільшенні швидкості руху абразива, оскільки зростає температура в точках контакту алмазних зерен з поверхнею стрічки і може відбуватись релаксація напружень в процесі шліфування. При збільшенні тиску абразиву на поверхню навіть при малих швидкостях стрічка згортається в циліндр, так що канавки шліфування розташовуються на внутрішній поверхні циліндру ( $R < 0$ ).

Ми дослідили також деформацію шліфуванням всіх металевих фольг, які були в нашому розпорядженні: Al, Cu, Fe, Ag, Pb, Mg, Ni, нержавіючі сталі. Шліфування здійснювали при кімнатній температурі в повітрі, і в рідкому азоті. У всіх випадках спостерігали від'ємну деформацію фольг ( $R < 0$ ).

Стрічки АМС при русі абразиву зі швидкістю 30-40 м/с також мають  $R < 0$ .

• Радіус кривини  $R \sim \text{const}$  в діапазоні  $d = 1-6$  мкм (рис.4).

При шліфуванні наждачним папером спостерігаються подібні закономірності, як і при шліфуванні алмазною пастою. Але при  $d = 0,5-1$  мм  $R < 0$ .

Експериментальні результати дозволяють запропонувати наступний механізм деформації АМС при шліфуванні.

Великі зерна абразиву ( $d > 50-100$  мкм) мають приблизно стільки ж ріжучих граней, що й малі, бо вони переважно – монокристали. Але велике зерно тисне на велику площу фольги, тому вона прогинається, так що  $R < 0$ . Кожне з малих зерен утворює при шліфуванні стільки ж канавок, що й велике, Але тисне на малу площу. Тому стрічка АМС не прогинається,  $R \geq 0$ . При різанні абразивним зерном крихкого матеріалу останній майже не видавлюється у простір над канавкою, як це спостерігається при різанні пластичного металу. У просторі між канавками в крихкій

фользі виникають напруги стискання,  $R > 0$ . В пластичній фользі утворюються напруги розтягу,  $R < 0$ .

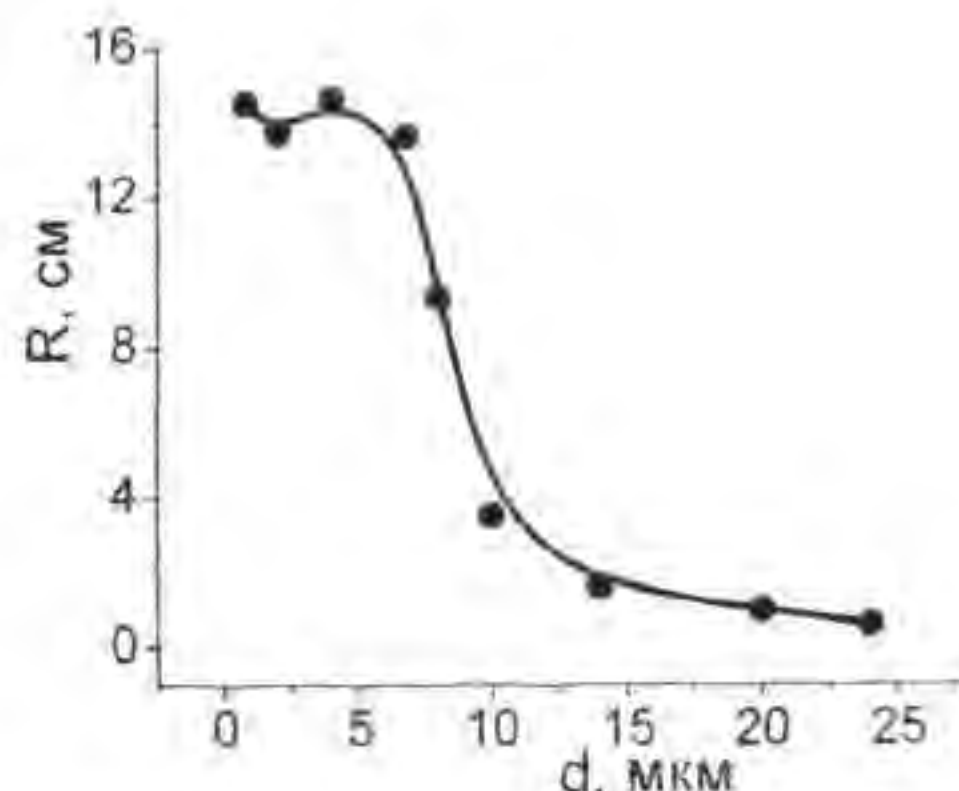


Рис. 4 Залежність радіуса кривини  $R$  стрічки АМС від величини алмазного зерна пасти  $d$ . Час полірування  $t = 60$  с.

Якщо  $d < 5$  мкм, то товщина продеформованого шару  $\Delta h < 0,5d - 1-2$  мкм. Такий тонкий шар не здатен зігнути стрічку товщиною  $h \sim 30$  мкм до малого  $R$ , що і спостерігаємо на досліді (рис.4) при шліфуванні абразивом з  $d < 5$  мкм. Напруги  $\sigma$ , що виникають на поверхні при згинанні стрічки товщиною  $h$  по радіусу кривини  $R$

$$\sigma \sim \frac{Eh}{2R} \quad (2)$$

де  $E$  – модуль Юнга. При  $R = 0,15$  м (рис.4),  $h = 30 \cdot 10^{-6}$  м,  $E = 13000 \cdot 10^7$  Па,  $\sigma = 1,3 \cdot 10^7$  Па.

Щоб створити такі напруги у поверхневих шарах, та менші в глибинних ( $\sigma_{II}$ ) при наближенні до серединної площини стрічки), необхідно, щоб у полірованому шарі виникла напруга  $\sigma_{II}$

$$\sigma_{II} = \frac{h^2 E}{2R \Delta h} \quad (3)$$

При  $\Delta h = 1$  мкм і  $h = 30$  мкм  $\sigma_{II} = 30 \sigma = 40 \cdot 10^7$  Па. Такі напруги не перевершують границю текучості  $\sigma_1 = 200 \cdot 10^7$  Па досліджуваного сплаву. Знаючи  $\sigma_1$ , оцінимо за формулою (3) найменший радіус кривини циліндра, що його можна виготовити шліфуванням стрічки АМС. При  $\sigma_I = \sigma_{II}$ , і  $\Delta h = 5$  мкм  $R = 6$  мм. При менших радіусах кривини циліндр розгинатиметься за рахунок релаксації напруг  $\sigma_{II}$ . Нами були одержані циліндри, які на протязі року мають  $R = 4$  мм з точністю  $\Delta R = 10^{-2}$  мм.



Явище пластичної деформації при шліфуванні АМС можна використати для виготовлення виробів з кривою поверхнею (спіральної пружин, напівсфер, циліндрів), що працюватимуть в агресивних середовищах. Його можна використати також для підвищення пластичності стрічок АМС.

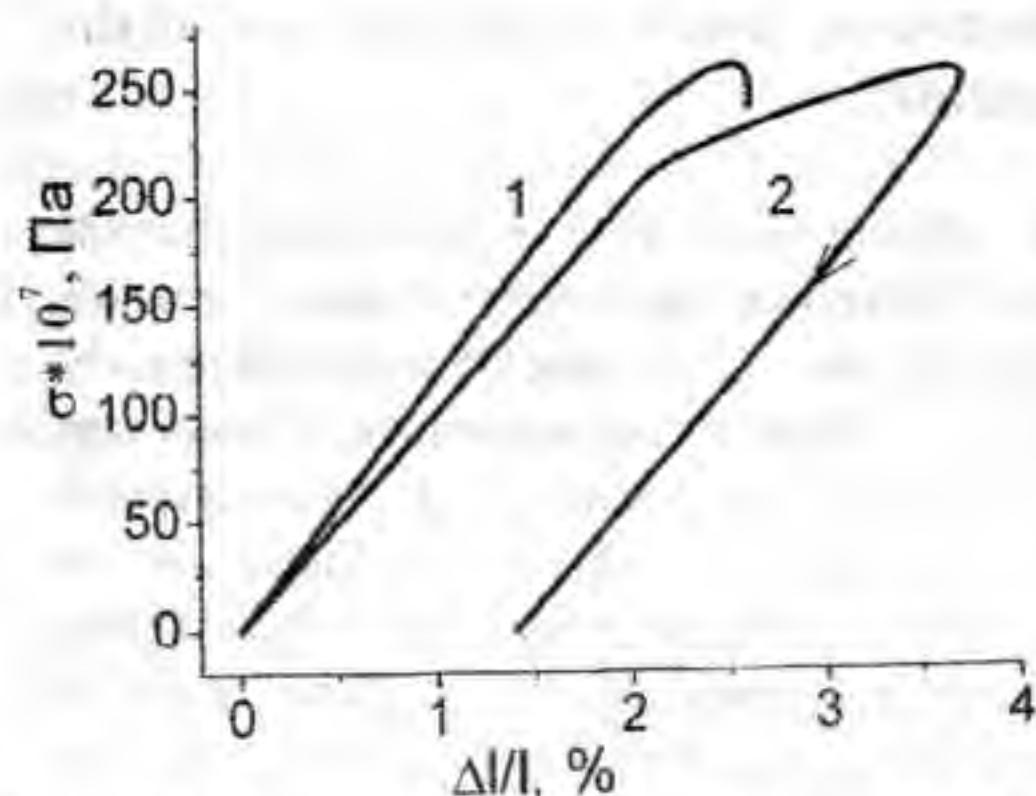


Рис. 5 Діаграми розтягу зразків АМС у початковому стані (1) та після шліфування (2).

На рис. 5 наведено діаграми розтягу зразків АМС у початковому (крива 1) стані та після шліфування обох сторін стрічки алмазною пастою з  $d=7-10$  мкм. Бачимо, що пластична деформація  $\Delta l/l \sim 0,6\%$  до шліфування зростає до  $\Delta l/l \sim 2\%$  після шліфування. При  $d=1-3$  мкм ефект пластифікації відсутній. Це явище можна пояснити наступним чином. Після завершення пружної деформації стрічка АМС деформується пластично за рахунок виникнення в кількох місцях площин ковзання. Канавки шліфування є зародками для утворення таких площин. Оскільки канавок багато, то багато і площин ковзання. Тому стрічка пластифікується шліфуванням. Полірування дрібнокристалічною пастою не забезпечує канавок достатньої глибини, тому пластифікація не спостерігається.

### Висновки

1. При шліфуванні стрічки аморфного металевого скла вздовж вісі ОХ вона згортається

навколо вісі ОХ у циліндр, радіус кривини якого зменшується при збільшенні часу шліфування і досягає  $R \sim 4$  мм. Внаслідок відпаду стрічка вирівнюється до початкової форми.

2. Після шліфування обох поверхонь у напрямку, перпендикулярному до поздовжньої вісі стрічки, вона пластифікується так, що пластична деформація при розтягові  $\Delta l/l$  зростає в 3-4 рази (у порівнянні з  $\Delta l/l$  нешліфованої стрічки). Пластифікація обумовлена тим, що канавки шліфування є зародками множини площин ковзання. При відсутності канавок пластична деформація започатковується в небагатьох місцях зразка, тому  $\Delta l/l$  незначне.

### Список використаних джерел

1. Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. Вплив магнітного поля і механічних напруг на термо-с.р.с. аморфного сплаву  $\text{Fe}_{78,5}\text{Ni}_1\text{Mo}_{0,5}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2006. – №3 – с. 484-488.
2. Аморфные металлические сплавы. М. Металлургия. – 1987. – 586 с.
3. Судзуки К., Фудзимори, Х.Хасимото К. Аморфные металлы. М. Металлургия. – 1987. – 328 с.
4. Гадзыра Н.Ф. Гетерогенная структура аморфных сплавов и ее влияние на закономерности изменения объема при низкотемпературном отжиге. Автореферат кандидатської дисертації. Київ. – 1989.
5. Носенко В.К. Формування аморфних сплавів та наноструктурних станів на основі Fe і Al. Автореферат докторської дисертації. Київ. – 2005.

Надійшла до редколегії 15.01.2007



УДК 535.32

Кортес Італо, Калдера Мігуель, Рамірез Попо  
Йезус, Кортес Ліліана, Вега Галіна, Пера  
Гонзалес

Факультет стоматології,  
Факультет комп'ютерних технологій,  
Факультет електроніки, Мехіко

## Ідентифікація дефектів на поверхні зубної емалі

В роботі представлена методологія  
детектування дефектів на поверхні зубної  
емалі, яка базується на методі  
рефлектометрії. Дослідна модель приладу  
складається з лазера ближнього ІЧ діапазону  
та фотодіоду, розташованих в  
автоматизованій установці, що проводить  
сканування поверхні для отримання  
оптимального кута та дозволяє реструктурувати  
дані за допомогою комп'ютера. Накопичені  
дані зберігаються в матричній формі. Потім ця  
матриця обробляється для перетворення даних  
стосовно зображення за „сірою” шкалою. За  
допомогою цих даних створюється 3-D образ  
шорсткості матеріалу для візуального  
спостереження дефектів, що знаходяться на  
зубній емалі.

Ключові слова: рефлектометрія,  
топологічна метрика, детектування дефектів,  
зубна емаль.

\*E-mail: [jitalo@siu.buap.mx](mailto:jitalo@siu.buap.mx)

### Introduction

Even with the modernization of the devices with  
invasive technology used in dentistry diagnosis, it  
does not allow a more exact analysis in the  
determination of defects such as fissures, fractures,  
zones of demineralization, etc. Said devices are X-  
rays with digital plates, in which the images appear  
on a computer and the diagnosis process is quicker  
and more clear [1], although the dosage of radiation  
absorbed by the organs continues to be high; the  
disadvantage is that the zones of demineralization  
less than 100 micron are not observable. The dental  
laser uses the transillumination method and allows  
for the diagnosis of cavities and fissures, but there is  
no clear information about the wave length and size  
of the zone of demineralization that can be detected  
[2,3]. The non-invasive methods are revealing  
tablets, chemical methods, intra-oral cameras,  
inspection method, the digitalization of the figure  
help to determine where and to what extent the

Cortez Italo J.<sup>1</sup>, Caldera Miguel J.<sup>2</sup>, Ramirez Popo  
Jesus A.<sup>2</sup>, Cortez Liliana<sup>3</sup>, Vega Galina J. <sup>1</sup>, Perea  
González P. <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Stomatology, <sup>2</sup> Faculty of Computer  
Science, <sup>3</sup> Faculty of Electronic. MÉXICO

## Identification of defect in the surface of the dental enamel

In the present work is a methodology for the  
detection of defects in the surface of dental enamel.  
this one is based on the method of reflectometry, the  
prototype is made up of: tracto emitting - receiving,  
which consists of a laser beams with infrared length  
near and photodiode, which is placed on an  
automatic device to make a sweeping of the surface  
and to obtain an optimal angle that allows to collect  
the data in a computer. The collected data are  
stored of matrix form, to this matrix a processing is  
applied to him to make the conversion to an image  
RGB on gray scale. From these data a  
representation is made in three dimensions using  
metric topological to make the reconstruction in  
three dimensions of the roughness of material, with  
which it will be possible to be observed the defects  
that are in the roughness of the dental enamel with  
their characteristics of starting point, final position.

Key Words: Reflectometry, Topological Metrics,  
Interpolation, Detection of Defects, Dental enamel

computerized model and the real object differ. These  
differences may serve as a guide to modify the  
development process until the model and real object  
are acceptable [3,4]. The optoelectronic system  
developed in the “Non-Invasive Methods for Dental  
Diagnosis” Laboratory is based on the reflectometer  
method [5,6,7,8,9]; it is used to acquire the data  
(voltage) of the dental enamel surface, this is found  
to be within the active range acquisition, non-  
contact, reflected and optic models [5].

### 2 Methodology

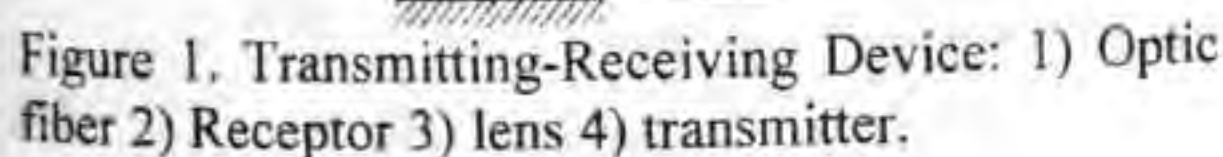
The main objective of this work is to determine  
micrometric defects in the tooth enamel surface, for  
which the reconstruction of the surface topography  
should be developed using digital image processing  
techniques.

#### 2.1 Transmitter-Receiver Tract

This device is based on the reflectometer method,  
which consists of shining a ray of light on a surface  
and through the reflection intensity measure the



The angles which are implemented for the analysis of rugosity are carried out experimentally, which consists of a sweep over a surface and for each point analyzed, the angle of the transmitter and receptor changes and the distance between the T-R tract and the dental piece, since the rugosity of a dental piece is anisotropic. See figure 1.



It is known that the optimal angle for a given point on the surface is the maximum voltage obtained by the receptor in a given angle, for which the following methodology is proposed for each line swept on the  $Y$  axis, 10 points are obtained on the longitude of the  $X$  axis of the surface, for each combination of angles, for the transmitter as well as for the receptor, of  $0^\circ$  to  $90^\circ$ , the values of each point are acquired; the results of the highest levels of the 10 points are stored and the average of these is obtained, and the new value will be associated to its respective angles, and with these transmitter-receptor angles, the acquisition of the values of the  $X$  axis line is carried out.

```

/*****
***
**/
Linea=1
**/

```

379



## 2.3 Acquisition of data

As is shown in the experimental device of Figure 2, the liminica signal obtained at the exit of the receptor is converted to voltage in the order of millivolts, which is amplified to a range of 0 to 5 volts; this is connected to a data acquisition card, which converts the analogical voltage to digital voltage and this result is sent to a computer [10,11].

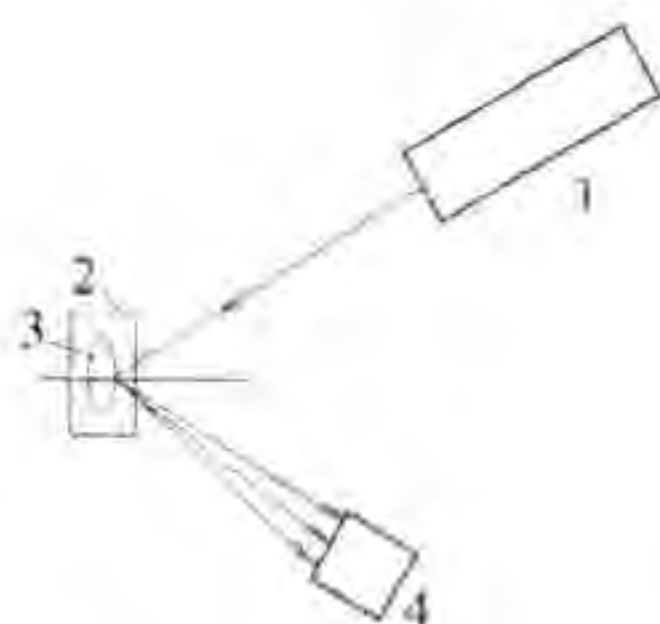


Figure 2. The experimental setup: 1 – laser (semiconductor or He-Ne), 2- cell, 3 – dens, 4 – CCD.

The results are stored matricially in a data file. An RGB image conversion on a 256 color scale of grey is carried out on the data obtained by the acquisition system. The Fourier and Wotherford Transform filters will be applied to them, which allows correction of anomalies in the data.

## 2.4 Reconstruction of the rugosity of tooth enamel

To generate the tooth enamel rugosity topography, an algorithym based on topological measurements was developed. The topological measurement is the distance that exists between two points: this method consists of obtaining the distances between the starting point with the 8 neighbors that are found around this [12,13].

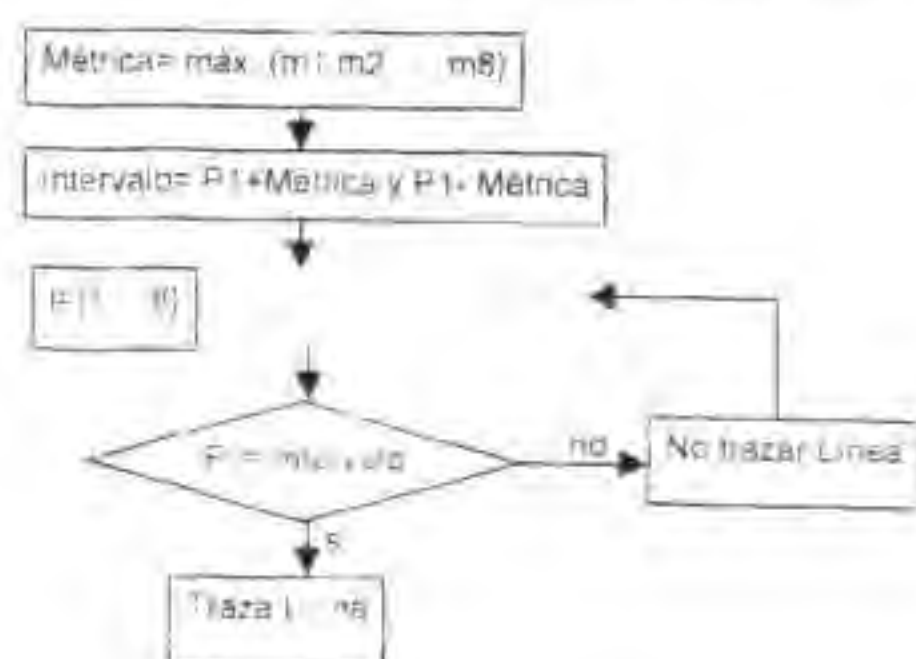


Figure 3. Algorithym of topological measurement

In Figure 3, the surrounding area of 8 neighbors is seen. With the 8 measurements obtained, the greatest, median or least is taken to find the connection between the points. This is done to be able to observe the differences between surrounding areas, with which the topographical reconstruction is generated of each face of the dental pieces, and figures can be constructed within the space to later recognize and identify certain forms that fulfill properties to know the possible defects in out dental samples.

## 2.5 Interpolation

To generate the topology of the rugosity of the biological material, an interpolation is carried out through topological measurements, for which the following is done:

- get rid of all the vectors missing attributes,
- for the  $i$ -th component, find the median value with all the available vectors,
- for all the component pairs  $x_i$  and  $y_i$  of the  $x$  and  $y$  vectors define  $b_i$  as,

$$b_i = \begin{cases} 0, & \text{si tanto } x_i \text{ como } y_i \text{ no hay similitud} \\ 1, & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

Then, the proximity between  $x$  and  $y$  we define as (6):

$$\phi(x, y) = \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^n b_i} \sum_{i=1}^n \phi(x_i, y_i) \quad (6)$$

where:  $\phi(x_i, y_i)$  - indicates the proximity between the two scales  $x_i$  and  $y_i$   $\phi(x_i, y_i) = |x_i - y_i|$  [5]

## 2.6 Reconstruction of the volume of the dental pieces

Due to the fact that the image of each tooth face is independent, it is necessary to group together said images in order to form the solid; this is carried out by grouping together the borders of each image and filling in the black holes; it also has the characteristics of rotation, translation and scaling. The computer tool will be designed in Delphi, since this is a programming language directed toward objects, which is based on the Pascal programming language, in which the data acquired can be seen matricially on the tooth face the image in 2 dimensions in RGB at 256 color grey scale. To carry out this application and observe the image in three dimensions, a graphic tool named OpenGL is used. This belongs to Silicon Graphics, and adaptations were made so it would work in the Windows operating system.



## 2.7 Validation of data acquisition

To guarantee that the data obtained from the acquisition card is correct and that there is no variation in a same point in different times, a method based on the calculation of frequencies is carried out, which consists of making  $N$  acquisitions on a same point and taking the value of voltage that is repeated according a a validity percentage  $R$  of frequency; the pseudocode is shown later.

\*\*\*\*\*  
\*\*\*\*\*  
\*\*\*\*\*/

```
/**/ While(FREC < (N*(R/100))) /**/
```

```
/**/ {
```

```
/**/     for (M=0;M<=N;M++) /**/
```

```
/**/         while(res==0) /**/
```

```
/**/             res=Adquiere dato /**/
```

de la TAD.

```
/**/             Volts[M]=res /**/
```

```
/**/         Next M /**/
```

```
/**/         Ordernar(Volts). /**/
```

```
/**/         Max=Volts[0] /**/
```

```
/**/         For(j=0;j<N;j++) /**/
```

```
/**/             {
```

```
/**/                 val=volts[j] /**/
```

```
/**/                 if(val==Max) /**/
```

```
/**/                     FREC++ /**/
```

```
/**/                 Else /**/
```

```
/**/                     {
```

```
/**/                         /**/
```

```
/**/                         Volts[Pos]=Max /**/
```

```
/**/                         Frecuencia[Pos]=FREC /**/
```

```
/**/                         Max=Val; /**/
```

```
/**/                         FREC=1 /**/
```

```
/**/                         Pos++ /**/
```

```
/**/                     }
```

```
/**/                 } /**/
```

```
/**/             Volts[Pos]=Max /**/
```

```
/**/             Frecuencia[Pos]=FREC /**/
```

```
/**/             FREC=1 /**/
```

```
/**/             For (j=j<=Pos;j++) /**/
```

```
/**/                 If (FREC<Frecuencia[j]) /**/
```

```
/**/                     {
```

```
/**/                         FREC=Frecuencia[j] /**/
```

```
/**/                         PosFrec=j /**/
```

```
/**/                     } /**/
```

```
/**/                 DatoValido=Volts[PosFrec]; /**/
```

```
/**/             } /**/
```

\*\*\*\*\*  
\*\*\*\*\*  
\*\*\*\*\*/

## 3 Experiments and results

The methodology carried out for the experiment was as follows. It was carried out with extracted dental pieces. The extraction was carried out through an incision and the gum was separated from the bone. The bone was eliminated, exposing the radicular portion of the dental organ. The tooth extraction was carried out through elevators without having contact with the enamel, so it would suffer no damage. These pieces were preserved in containers with artificial saliva, as shown in Figure 4.



Figure 4. Preservation of teeth.



In particular, an extracted tooth that is a first upper right premolar has the following measurements: on the labial face 7.8 mm on the longitudinal axis (center of the crown), 8.9 mm mesial third, and 9.6 mm in the distal third.

This tooth was placed in the scanning mechanism to obtain the reflex data. See Figure 5.

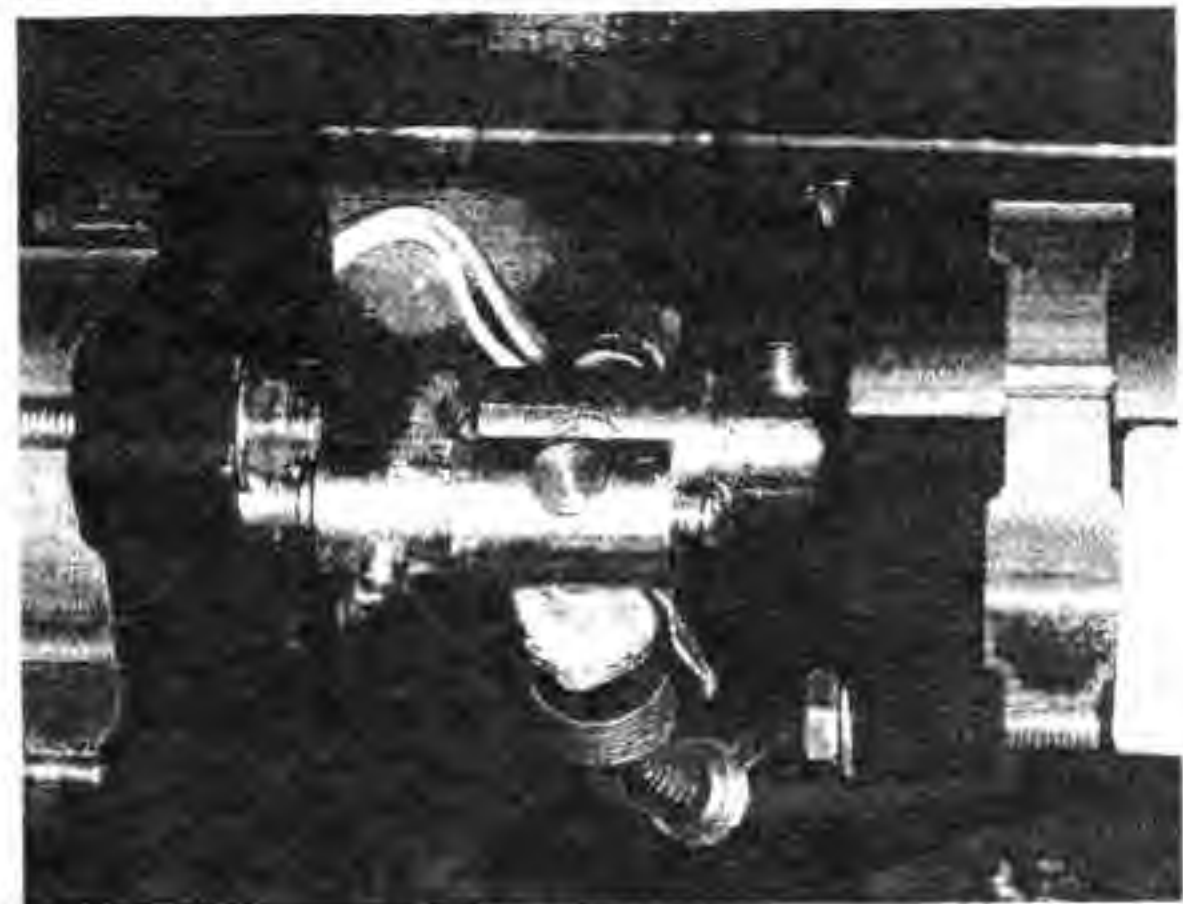


Figure 5. Scanning mechanism.

To observe the de forma matricial data RGB image and the reconstruction in 3D of the teeth, software was designed, which is shown in Figure 6, with data from our experiment. This software shows the face type, face data, face image in RGB, face image in 3 dimensions.

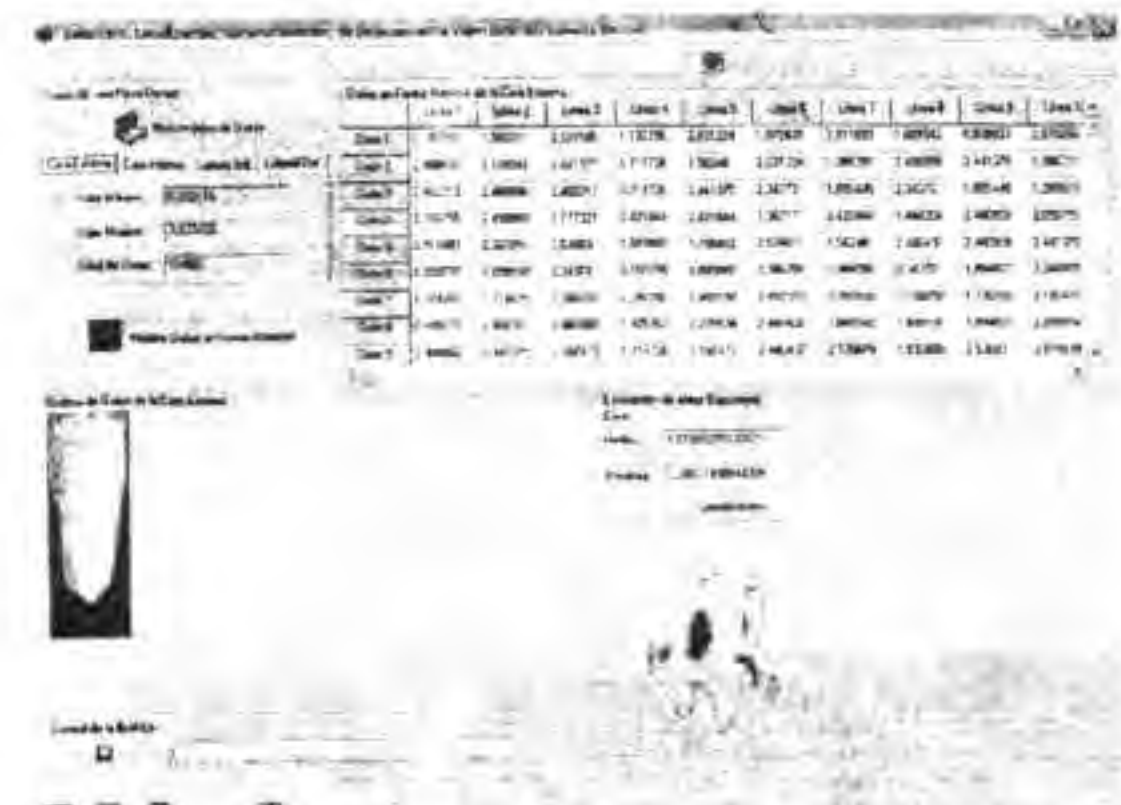


Figure 6. Screen with matricial image and data.

In Figure 7, we see the RGB image on a grey scale. This is generated from a data matrix obtained by the automatic mechanism.



Figure 7. Image of the tooth on a grey scale.

To the image in Figure 7 the Fourier Transform is applied and we obtain Figure 8.



Figure 8. Fourier Transform.

In Figures 9 and 10, the image of low pass and band pass is shown.



Figure 9. Filtered Image of low pass.





Figure 10. Filtered Image through the band of the dental piece.

In Figure 11, the image without noise [8], with the Butterworth filter on level 1 is shown.



Figure 11. Image with no interference.

In Figure 12, the interpolated image is seen, with a single interpolation.



Figure 12. Image with an interpolation.

Figure 13 shows the construction of the volume in which the defect done manually and validated with a metallographic microscope can be seen.

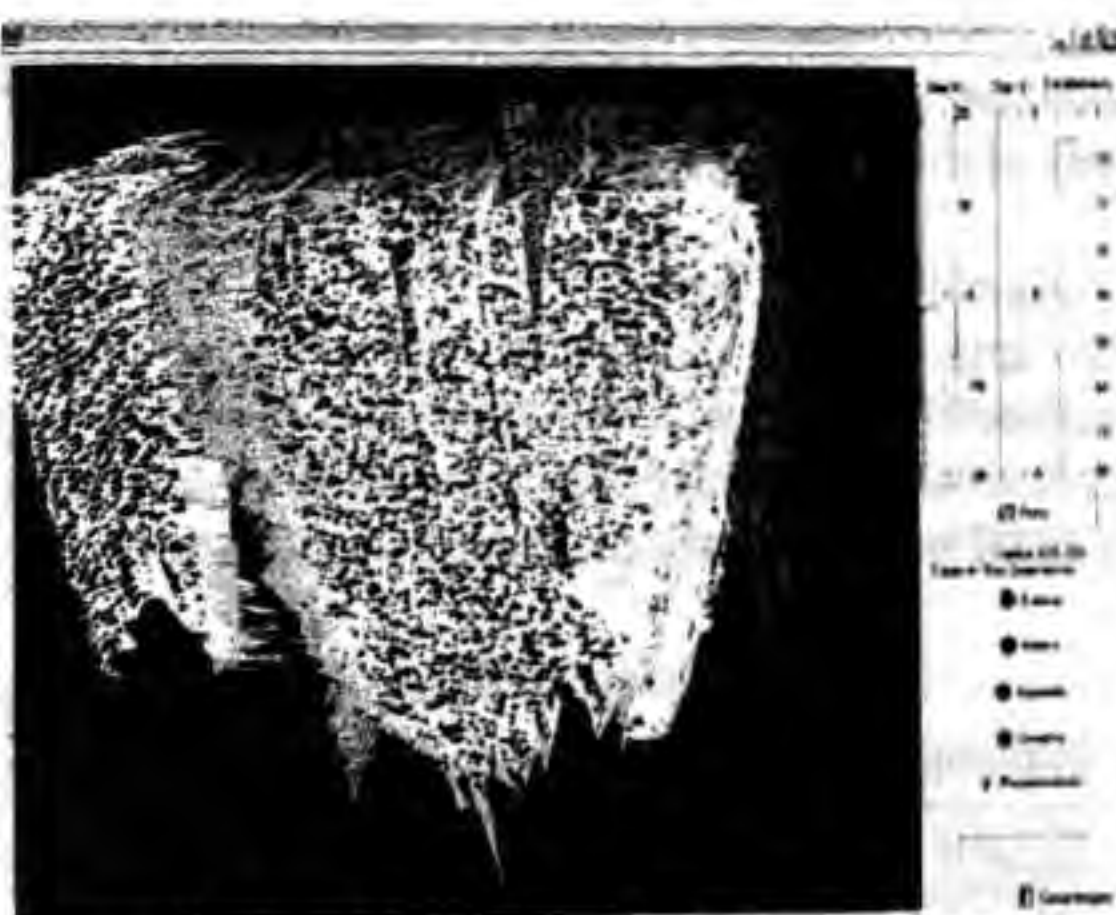


Figure 13. Reconstruction of the volume in 3D.

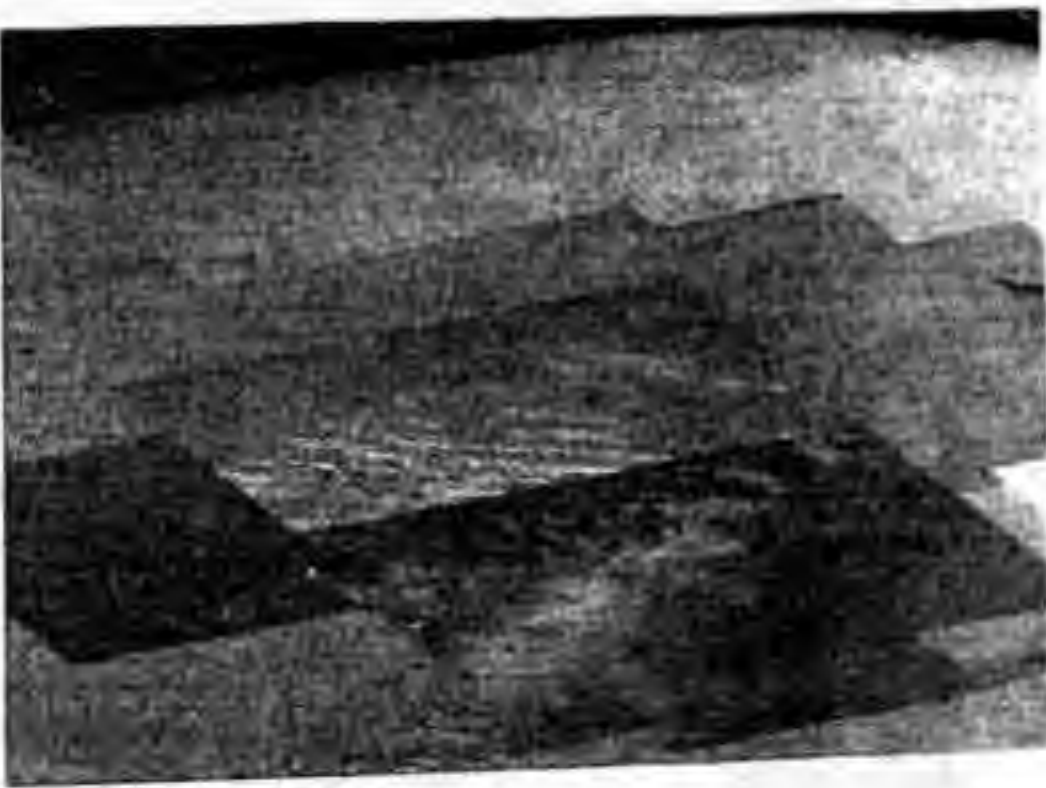


Figure 14. Tooth with demineralization observed from the microscope.

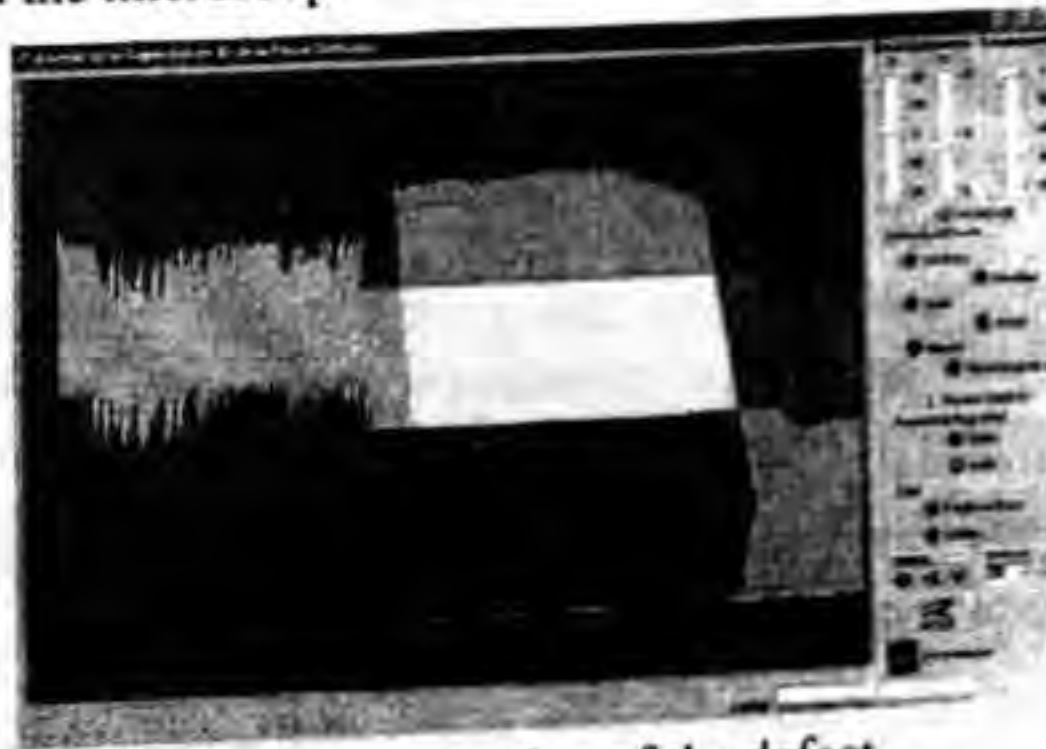


Figure 11. Tooth with location of the defect.

4 Conclusion.

Software was obtained that allows visualization of the image in three dimensions. The reconstruction of the volume of dental pieces from the data generated by the APDSED optoelectronic device that analyzes the rugosity of the dental enamel, from which it gives a diagnosis of the possible surface defects.

The results show that the rugosity of the dental pieces varies. It also contributes a methodology and software for the preventive diagnosis in the stage of defects in the dental enamel, based on the non-invasive



technique of non-contact that will allow the physical study of the tooth rugosity visually.

## 5 Agradecimientos

The authors give thanks to the Office of the Vicerrector of Research and Graduate Studies of the Benemérita Universidad Autónoma de Puebla for the financial support for the realization of this work.

## References

1. <http://aps.sld.cu>
2. *Javier C. M* Identificación de Cambios Físicos en el Esmalte Dental Utilizando el Microcontrolador 8032, Tesis de Licenciatura en ciencias de la computación, FCC., BUAP, Diciembre 2003.
3. *L. Golomidova* Métodos de defectoscopia infrarroja, NIAT, Moscú.
4. *L. Dubitsky* Aspectos físicos en dispositivos electrónicos, Electrónica, Moscú, p-168, 1976.
5. *M. Such, J. Fox* Nondestructive testing of plastic with microwave, Politechnic press, New.
6. *J. I. Cortez* Métodos y dispositivos para la defectoscopia óptica infrarroja en materiales dieléctricos, Tesis doctoral, San Petersburgo, p-178, 2000.
7. *A. C. Toporetz* Óptica de la rugosidad de superficie, Mashinostroenie, Leningrado.
8. *A.P. Jusu, Yu. P. Vitenberg, V.A. Palmov,* Rugosidad de superficie, Nauka, Moscú, p-246.
9. *A. F. Kotiuk, Yu. A. Kurchatov* Técnica de medición de parámetros físico-ópticos, Radio Sviaz, Moscú, p-223, 1987.
10. *R. C. González* Digital Image Processing, Second Edition, Prentice Hall, 2002.
11. *G. Pajares* Visión por Computador Imágenes Digitales y Aplicaciones, Alfa omega ~Ra~ma.
12. *John W. Branco, Juan B. Gomez, P. Flavio* Reconstrucción Tridimensional a partir de Imágenes de Rango, Revista Iberoamericana de inteligencia Artificial. V8, No.23 (2004), pp. 97-112.
13. *L. M. Villegas, A. Setier, J. Olivares* Lecturas Básicas en Topología General, Aportaciones Matemáticas, Sociedad Matemática Mexicana.



УДК 535.39

Ломакіна О.В., студентка,  
Шайкевич І.А., доктор ф.-м. наук, професор.

**Еліпсометричні дослідження із збудженням поверхневих поляритонів перехідного шару на межі поділу тонка плівка Мо – діелектрична підкладка.**

З допомогою формул Ейрі розраховані залежності еліпсометричних параметрів від кута падіння світла для системи тонка плівка Мо – діелектрична підкладка з кварцу і сапфіру з перехідним шаром окису молібдену  $\text{MoO}_3$  на межі поділу металічна плівка – діелектрична підкладка. Цей перехідний шар відіграє важливу роль у формуванні величини адгезії плівки до підкладки – він підвищує адгезію. Показано, що поляритонні еліпсометричні методи значно чутливіші при визначенні тонкого перехідного шару між металічною плівкою і підкладкою ніж відомі абсорбційні методи.

Ключові слова: еліпсометрія, поляритони, азимут відновленої лінійної поляризації, зсув фаз.

\*E-mail: nostra@univ.kiev.ua

## Вступ

Перехідний шар на межі поділу діелектрик – метал відіграє основну роль в адгезії металічної плівки до діелектричної підкладки, на яку нанесена ця плівка. Якщо такий перехідний шар утворюється внаслідок хімічної взаємодії металу з речовиною діелектричної підкладки (окисли або інші хімічні речовини), то в такому випадку адгезія металічної плівки з підкладкою висока. Якщо ж він не утворюється, то тоді адгезія зумовлена тільки силами Ван-дер-Ваальса і, як наслідок, зовсім слабка. Така плівка досить легко знімається з підкладки. Особливо високою адгезією характеризуються плівки перехідних металів на кварцових ( $\text{SiO}_2$ ) і сапфірових ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) підкладках, так як в них багато кисню і легко утворюється на межі поділу плівка-діелектрик перехідний шар окису металу, який і зумовлює високу адгезію. Ця особливість перехідних металів широко використовується при пайці діелектричних вікон з кварцу і сапфіру до металевого корпусу космічних кораблів. Металічний сплав спаю погано адгезує з діелектричною підкладкою, але добре адгезує з

Lomakina O.V., student,  
Shaykevych I.A., professor, d.sc.

**Elipsometric research with surface polaritons stimulating of transition layer at thin Mo film – insulator substrate interface.**

Using Eyri's formulas we calculated dependences for elipsometric parameters of an angle of incidence for thin Mo films – sapphire or quartz insulator substrate with transition coat of  $\text{MoO}_3$  oxide at metal film – insulator substrate interface. This transition layer plays a vital part at forming of adhesion value film to substrate – he increases adhesion. It is shown, that polariton elipsometric methods are more sensitive at detection of thin transition coating between metal film and substrate than absorption methods.

Key Words: elipsometry, polaritons, an azimuth of recovered linear polarization, a phase shift.

металом. В місцях стику вікон з металевим корпусом корабля на вікна наноситься плівка молібдену або іншого перехідного металу, а потім відбувається з'єднання цієї плівки металічним спаєм з корпусом космічного корабля. З цієї причини дослідження перехідного шару на межі поділу молібденова плівка – діелектрична підкладка ( $\text{Al}_2\text{O}_3$  або  $\text{SiO}_2$ ) є важливою задачею як з фізичної, так і з практичної точки зору.

## Постановка задачі

Оптичні методи дослідження перехідного шару на межі поділу металічна плівка – діелектрична підкладка є найбільш доцільними. Так для тонких плівок Мо, нанесених на кварцові та сапфірові підкладки в [1] для виявлення перехідного шару окису  $\text{MoO}_3$  на межі поділу діелектрик – метал був застосований метод дослідження спектру поглинання. Як було показано в [2],[3] для окису  $\text{MoO}_3$  в районі довжини хвилі 400-420 нм має місце крутий край фундаментальної смуги поглинання, яка лежить в ультрафіолетовій ділянці спектру. Тому в тонких



плівках Мо, нанесених на кварцові та сапфірові підкладки, повинен спостерігатись стрибок в спектрі пропускання в районі довжин хвиль 400-420 нм при утворенні на межі поділу металева плівка – діелектрична підкладка тонкого шару окису  $\text{MoO}_3$ . В роботі [1] показано, що такий стрибок дійсно спостерігався при відпалі тонких плівок Мо в вакуумі при температурі  $600^\circ\text{C}$  і  $900^\circ\text{C}$ , нанесених на кварцові і сапфірові підкладки методом електронно-променевого напилення. В результаті такого експерименту адгезія тонких плівок Мо суттєво збільшувалась. Аналогічні явища спостерігались і в роботах [4],[5] при напиленні тонких плівок Мо на кварцові і сапфірові підкладки методом дугового вакуумного розряду без всякого термічного відпалу, бо при застосуванні іонних методів напилення ймовірність утворення перехідного шару окису значно зростає. В той же час абсорбційні методи дослідження дозволяють виявити лише шари  $\text{MoO}_3$ , які по товщині досягають величин десятків і навіть сотень ангстрем. Виявити шар  $\text{MoO}_3$  товщиною декілька одиниць ангстрем чутливість абсорбційних методів не дозволяє. З цієї причини нами було запропоновано досліджувати перехідні шари на межі поділу метал – діелектрик еліпсометрично – із збудженням поверхневих поляритонів за методом Кречмана. Схема експерименту показана на рис. 1.

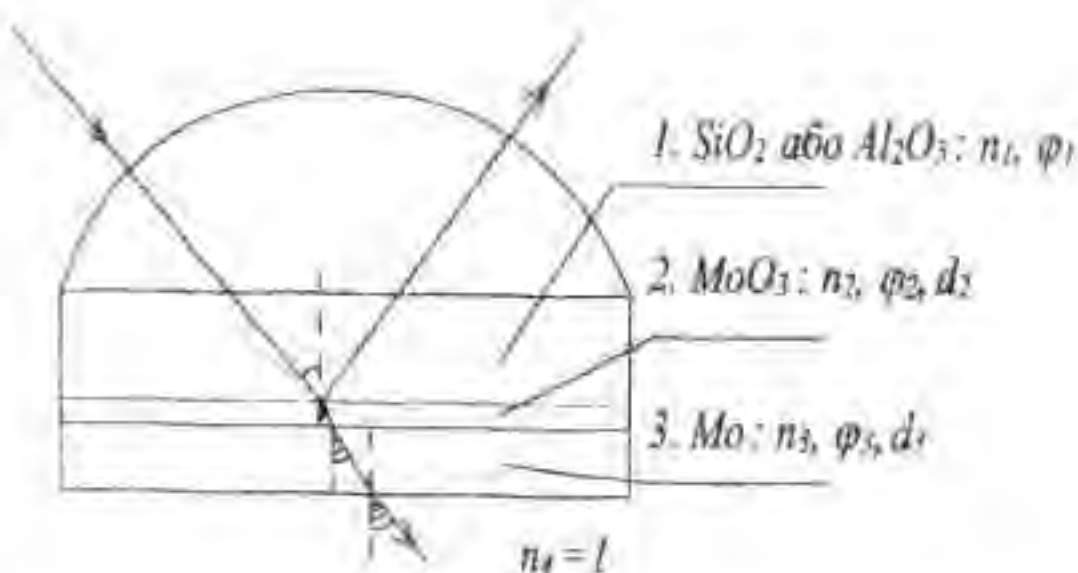


Рис.1 Схема збудження поверхневих поляритонів за методом Кречмана.

По формулам Ейрі [6] розраховувались еліпсометричні параметри відбитого від системи (рис. 1) світла.

Падаюче світло було лінійно поляризоване із азимутом електричного вектора  $45^\circ$ . Розраховувались величини  $\text{tg}\Psi$  і  $\cos\Delta$ , де  $\Psi$  – азимут відновленої лінійної поляризації відбитого світла, а  $\Delta$  – зсув фаз між  $p$  і  $s$

компонентами відбитого світла. Для двошарової тонкоплівочної системи Мо і  $\text{MoO}_3$  необхідно використовувати рекурентні формули Ейрі. На межі поділу 2-3 використовується звичайні формули Ейрі для відбитої хвилі:

$$\begin{aligned}\tilde{R}_{23}^p &= \frac{\tilde{r}_{23}^p + \tilde{r}_{34}^p \cdot e^{2i\beta_3}}{1 + \tilde{r}_{23}^p \cdot \tilde{r}_{34}^p \cdot e^{2i\beta_3}} \\ \tilde{R}_{23}^s &= \frac{\tilde{r}_{23}^s + \tilde{r}_{34}^s \cdot e^{2i\beta_3}}{1 + \tilde{r}_{23}^s \cdot \tilde{r}_{34}^s \cdot e^{2i\beta_3}}\end{aligned}\quad (1)$$

Для результуючих комплексних коефіцієнтів відбивання використовуються рекурентні формули Ейрі:

$$\begin{aligned}\tilde{R}_{12}^p &= \frac{\tilde{r}_{12}^p + \tilde{R}_{23}^p \cdot e^{2i\beta_2}}{1 + \tilde{r}_{12}^p \cdot \tilde{R}_{23}^p \cdot e^{2i\beta_2}} \\ \tilde{R}_{12}^s &= \frac{\tilde{r}_{12}^s + \tilde{R}_{23}^s \cdot e^{2i\beta_2}}{1 + \tilde{r}_{12}^s \cdot \tilde{R}_{23}^s \cdot e^{2i\beta_2}},\end{aligned}\quad (2)$$

де

$$\tilde{r}_{23}^p = \frac{\tilde{n}_3 \cdot \cos \varphi_2 - n_2 \cos \tilde{\varphi}_3}{\tilde{n}_3 \cdot \cos \varphi_2 + n_2 \cos \tilde{\varphi}_3} \quad (3)$$

$$\tilde{r}_{23}^s = \frac{n_2 \cdot \cos \varphi_2 - \tilde{n}_3 \cos \tilde{\varphi}_3}{n_2 \cdot \cos \varphi_2 + \tilde{n}_3 \cos \tilde{\varphi}_3}$$

$$\tilde{r}_{34}^p = \frac{n_4 \cdot \cos \tilde{\varphi}_3 - \tilde{n}_3 \cos \tilde{\varphi}_4}{n_4 \cdot \cos \tilde{\varphi}_3 + \tilde{n}_3 \cos \tilde{\varphi}_4}$$

$$\tilde{r}_{34}^s = \frac{\tilde{n}_3 \cdot \cos \tilde{\varphi}_3 - n_4 \cos \tilde{\varphi}_4}{\tilde{n}_3 \cdot \cos \tilde{\varphi}_3 + n_4 \cos \tilde{\varphi}_4}$$

$$\beta_2 = \frac{2\pi}{\lambda} n_2 d_2 \cos \varphi_2$$

$$\tilde{\beta}_3 = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{n}_3 d_3 \cos \tilde{\varphi}_3$$

$\lambda$  – довжина світлової хвилі. В розрахунках  $\lambda = 620$  нм. В формулах (1) – (3) комплексні величини позначені тильдою згори. Величини  $r_{i,j}^{p,s}$  – це френелівські коефіцієнти на відповідних межах розділу для відбитої хвилі. Показники заломлення плавленого кварцу та сапфіру взяті з [7] ( $n_1 = 1,457$  для кварцу і  $n_1 = 1,766$  для сапфіру). Показник заломлення для  $\text{MoO}_3$  був взятий з [2] ( $n_2 = 2,3$ ). Нарешті комплексний показник заломлення молибдену для довжини хвилі  $\lambda = 620$  нм був взятий з [8] ( $n_3 = 3,68 + 3,52i$ ).



Взявши відношення комплексних амплітудних коефіцієнтів відбивання для р – та s – компонент із формули (2), одержимо:

$$\frac{\tilde{R}_{12}^p}{\tilde{R}_{12}^s} = \frac{|R_{12}^p|}{|R_{12}^s|} \cdot e^{i\Delta} = \operatorname{tg}\Psi \cdot e^{i\Delta} \quad (4)$$

$$\operatorname{tg}\Psi \cdot \cos\Delta = \frac{(r_{12}^p + \tilde{R}_{23}^p \cdot e^{2i\beta_2})(1 + r_{12}^s \tilde{R}_{23}^s \cdot e^{2i\beta_1})}{(1 + r_{12}^p \tilde{R}_{23}^p \cdot e^{2i\beta_1})(r_{12}^s + \tilde{R}_{23}^s \cdot e^{2i\beta_2})} \quad (5)$$

Із співвідношення (5) з допомогою ЕОМ можна обчислити залежності  $\operatorname{tg}\Psi$  та  $\cos\Delta$  від кута падіння  $\varphi_1$  для певної товщини плівки молибдену  $d_3$ .

### Результати та їх обговорення

Спочатку для товщини плівки  $\text{MoO}_3$   $d_2 = 0$ , тобто для чистої плівки Мо була підбрана така товщина  $d_3$ , при якій поляритонний мінімум для величини  $\operatorname{tg}\Psi$  має мінімальне значення. Кут падіння  $\varphi_1$  для мінімуму виявився рівним  $72^\circ$ . Товщина  $d_3$  при цьому дорівнювала 16 нм. Далі задавалися різні товщини плівки  $\text{MoO}_3$   $d_2$  при незмінній товщині плівки молибдену – 16 нм, починаючи з 0,1 нм і закінчуючи 15 нм. Результати розрахунків для підкладки з  $\text{SiO}_2$  наведені на рис.2 і на рис.3.

Це криві для різних товщин  $d_2$  перехідного шару  $\text{MoO}_3$ , позначення яких наведені на відповідних рисунках. Як видно з рисунків, найбільші зміни  $\cos\Delta$  і  $\operatorname{tg}\Psi$  при зміні  $d_2$  відбуваються при куті падіння, який відповідає поляритонному мінімуму для величини  $\operatorname{tg}\Psi$ . Крім того, існує ще поляритонний максимум для величини  $\operatorname{tg}\Psi$  при куті падіння, близькому до граничного кута повного внутрішнього відбивання для матеріалу підкладки. Цей максимум значно перевищує одиницю, тобто  $\operatorname{tg}\Psi$  падаючого випромінювання завдяки тому, що найефективніше збудження поверхневих поляритонів для р – компоненти відбувається поблизу граничного кута повного внутрішнього відбивання [9,10]. Аналогічно на рис.4 і рис.5 наведені кутові залежності величин  $\cos\Delta$  і  $\operatorname{tg}\Psi$  для підкладки з сапфіру для різних товщин  $d_2$  перехідного шару окису  $\text{MoO}_3$ .

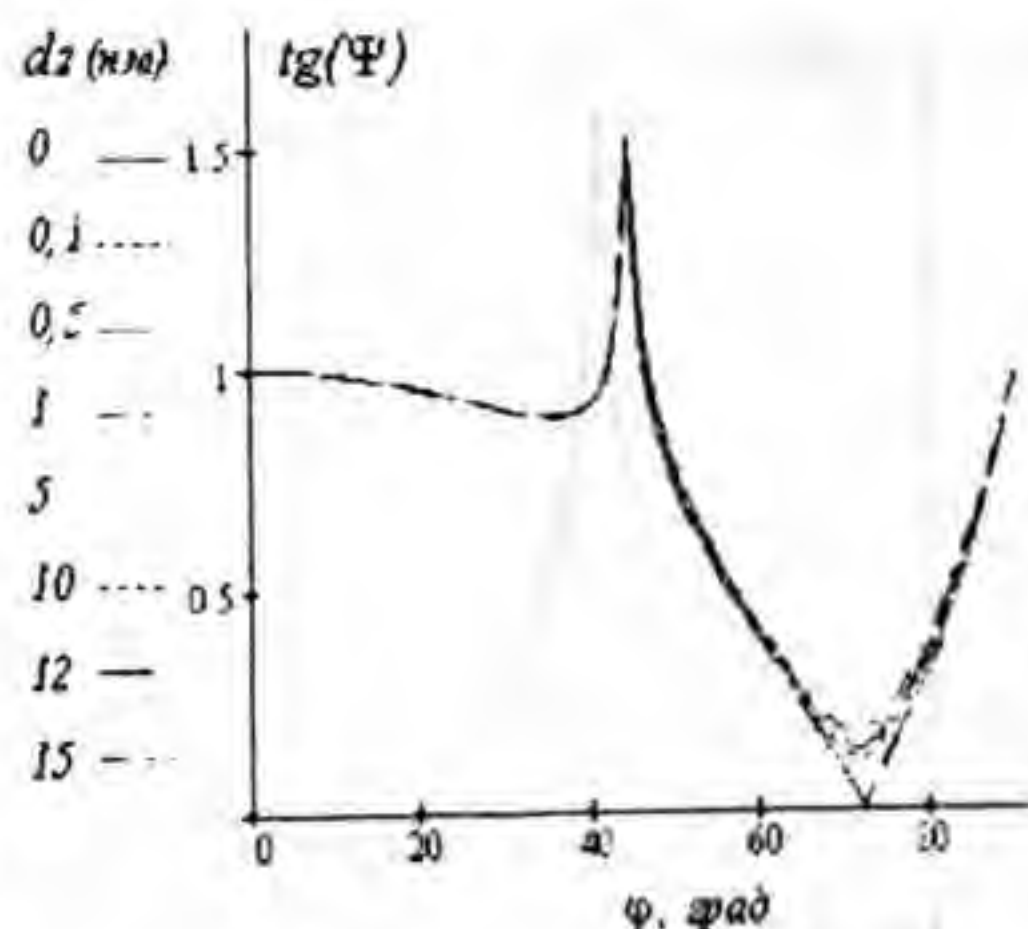


Рис.2. Залежність азимуту відновленої лінійної поляризації від кута падіння для кварцевої підкладки.

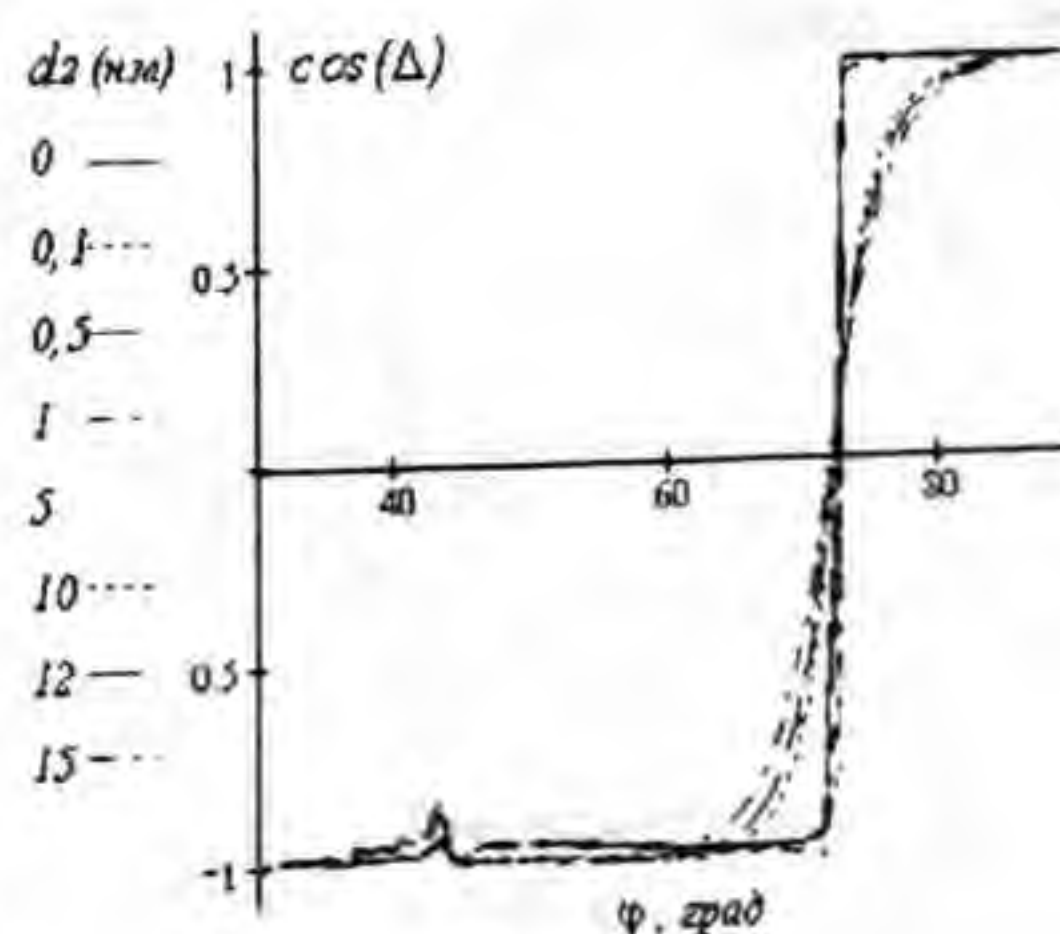


Рис.3. Залежність  $\cos\Delta$  від кута падіння світла для кварцевої підкладки.



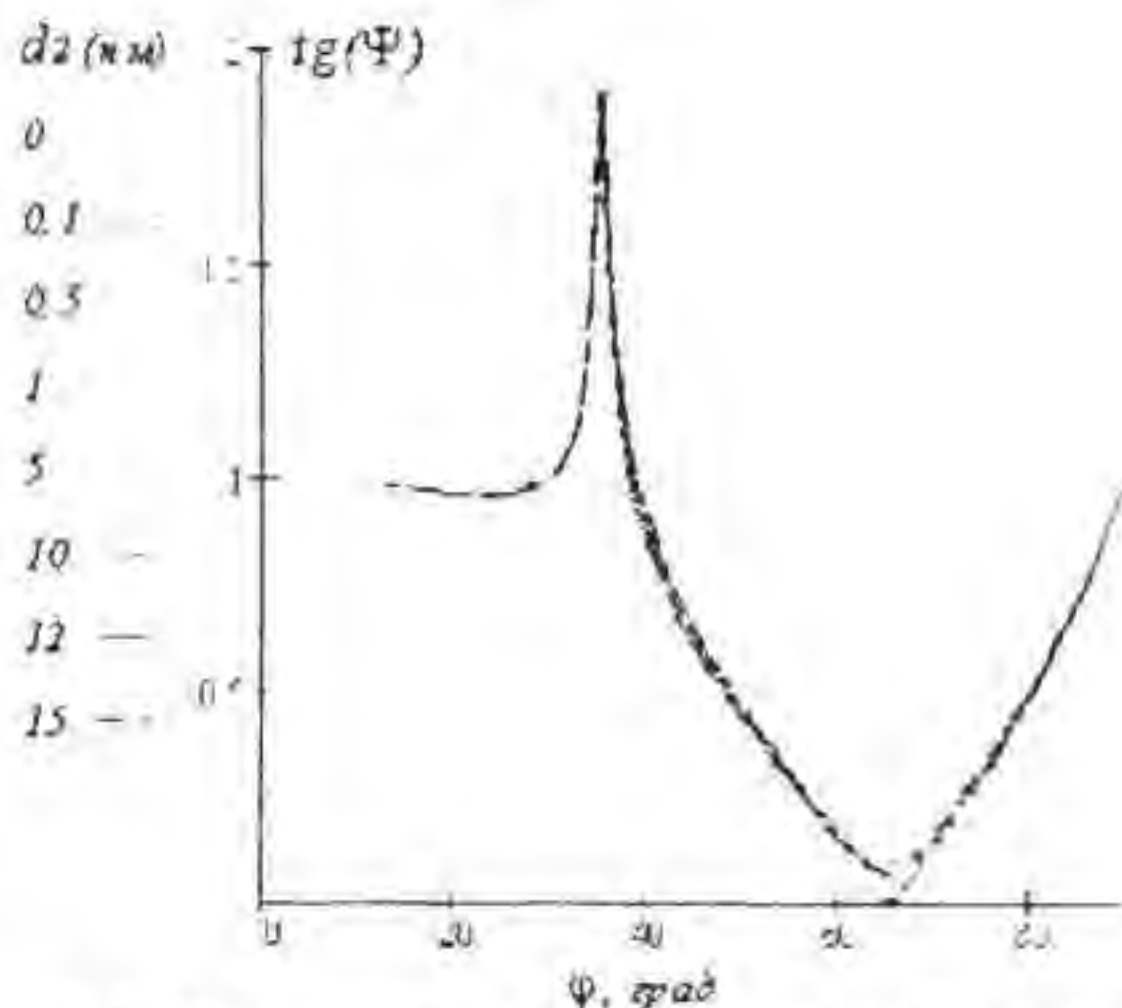


Рис.4. Залежність азимуту відновленої лінійної поляризації  $\text{tg}\Psi$  від кута падіння для сапфірової підкладки.

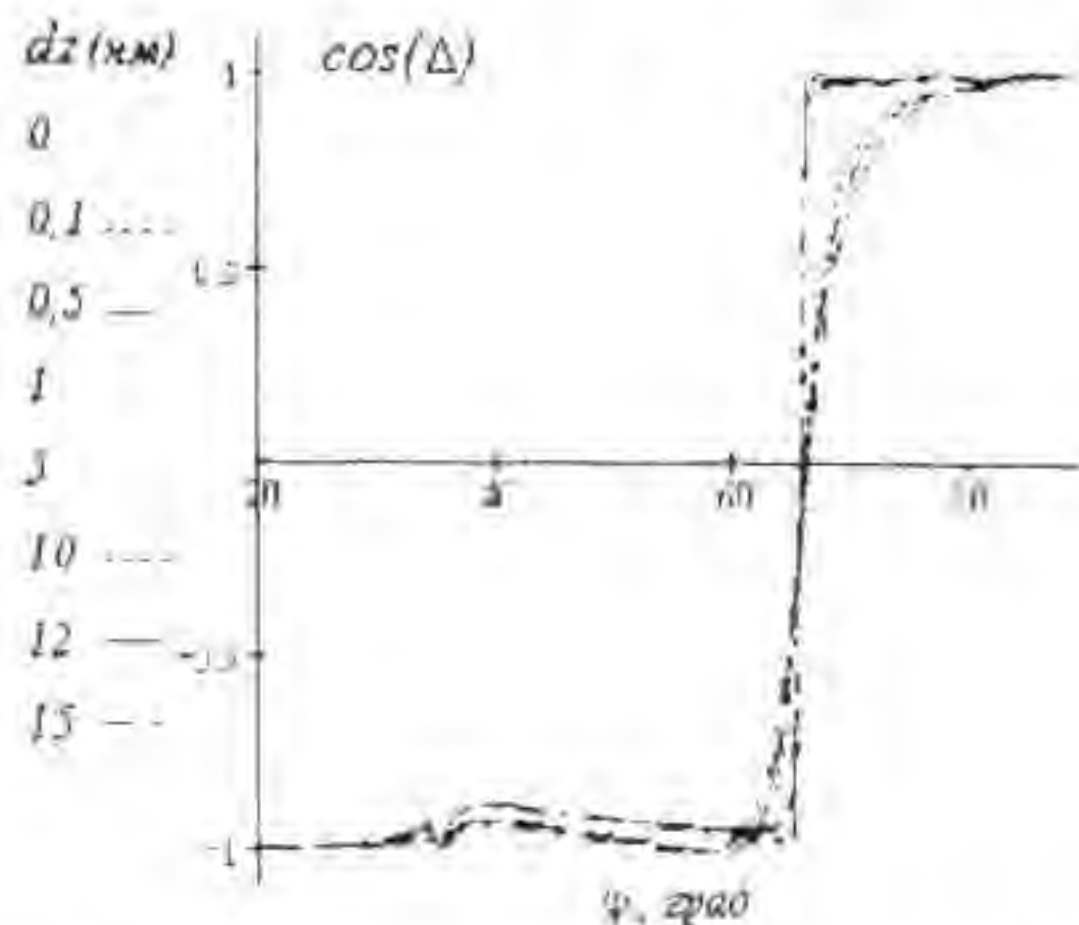


Рис.5. Залежність  $\cos\Delta$  від кута падіння світла для сапфірової підкладки.

Хід кривих на рис.4, рис.5 аналогічний ходу кривих на рис.2, рис.3 із зміщенням цих кривих відповідно по величині  $\text{tg}\Psi$  і  $\cos\Delta$  і куту падіння  $\phi$ . Під час виконання роботи була визначена чутливість поляризаційної поляритонної методики по визначенню перехідного шару. Так для поляритонного мінімуму величини  $\text{tg}\Psi$  на рис. 2 і 4 для кута падіння  $\phi = 72^\circ$  шар окислу  $\text{MoO}_3$  товщиною в 0,1 нм зменшує величину  $\text{tg}\Psi$  порівняно з чистим  $\text{Mo}$  на 0,0011, що при точності сучасних еліпсометрів з фотоелектричною реєстрацією є цілком достатньою для визначення величиною. Для  $\cos\Delta$  при тому ж куті падіння маємо ще більшу чутливість. Шар окислу  $\text{MoO}_3$  товщиною 0,1 нм

зменшує величину  $\cos\Delta$  в порівнянні з чистим молибденом на 0,055.

### Висновки

Поляритонні методи з використанням еліпсометричних вимірювань є значно більш чутливіші, ніж абсорбційні методи при визначенні перехідного шару окису та інших хімічних сполук на межі поділу металічна плівка – діелектрична підкладка, і дозволяють визначити перехідний шар товщиною порядку 0,1 нм. Але ці вимірювання необхідно проводити у високому вакуумі, щоб не утворився перехідний шар на нижній межі поділу металічної плівки, тобто на межі поділу 3 – 4 (рис.1).

### Список використаних джерел

1. Шайкевич С.С., Костюк Б.Д., Колесниченко Т.А. Адгезия и оптические свойства тонких металлических пленок молибдена и ванадия, нанесенных на неметаллические материалы. Сб. Адгезия расплавов. – Киев, Наукова думка, 1974, с. 42-47.
2. Deb S.K. Physical properties of transition metal oxide: optical and photoelectrical properties of single crystal and thin film molybdenum trioxide. – Proc. Roy. Soc., 1968, A304, №1477, p.211-231.
3. Пурцеладзе И.М., Хитарияшвили Л.С., Чиковани Р.И., Школьник А.И. Исследование оптических свойств трехокси молибдена  $\text{MoO}_3$ . – Труды Тбилисского университета, 1960, вып.86, стр.439-448.
4. Трайдук С.Ф., Шайкевич И.А. Оптические и электрические свойства тонких пленок молибдена и никеля, напыленных с помощью вакуумного дугового разряда. Тезисы II Всесоюзной конференции по физике и технологии пленок. – Ивано-Франковск, 1984, ч.1., стр.201.
5. Букинский П. Н., Пророк В.В., Шайкевич И.А. Напыление тонких пленок молибдена методом импульсного вакуумного разряда и их оптические и электрические свойства. – Известия вузов СССР, Физика, 1982, 25, вып.2, стр.128, Деп.
6. Е.М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. – Москва, Наука, 1970, 855 с.
7. Е.М. Воронкова, Б.Н. Гречушников, Г.И. Дистлер, И.П. Петров. Оптические



- материалы для инфракрасной техники. – Москва, Наука, 1965, 335 с.
8. *Weaver J.H., Krafka C., Lynch D.W., Koch E.E.* Optical properties of metals. v.I,II. – Internal Report D.E.S.J.F41., Hasylab, 81/01, 1981, 172p., 256 p.
9. Поверхностные поляритоны. Электромагнитные волны на поверхностях и границах раздела сред. (под ред. В.М.Аграновича и Д.Л.Миллса). – М., Наука, 1985, 525 с.
10. *И.Л.Дмитрук, В.Т.Литовченко, В.Л.Стрижевский.* Поверхностные поляритоны в полупроводниках и диэлектриках. – Киев, Наукова думка, 1989, 374 с.

Надійшла до редколегії 13.03.07



УДК 535.34

Лопатинська\* О.Г., Лопатинський А.М., Чегель  
В.І., к.ф.-м.н., с.н.с., Поперенко Л.В., д.ф.-м.н.,  
проф., Ширшов Ю.М., д.ф.-м.н., проф.

### Вплив УФ радіації на біомолекулярну взаємодію в умовах специфічного зв'язування

Досліджено вплив УФ випромінювання на  
специфічне зв'язування біомолекул трипсину та  
соєвого інгібітору трипсину (СІТ) за допомогою  
методу поверхневого плазмонного резонансу  
(ППР). Було з'ясовано, що пара трипсин – СІТ  
зберігає специфічність під впливом тривалого  
УФ випромінювання, проте відбувається  
часткове руйнування структури молекули  
трипсину.

Ключові слова: біомолекула, специфічне  
зв'язування, УФ радіація, плазмон.

\*E-mail: olya\_ivanova@univ.kiev.ua

#### Вступ

Вплив високоенергетичних фотонів УФ  
діапазону на біологічні структури продовжує  
залишатися в центрі уваги науковців в останні  
роки [1,2]. Добре відомо, що УФ опромінення  
може суттєво впливати на біомолекулярні  
процеси в живих організмах. Тому процеси  
впливу УФ радіації на клітинні і біомолекулярні  
процеси в живій природі зараз ретельно  
вивчаються. Наявність у макромолекулах білка  
як міцних, так і слабких зв'язків наділила  
білкову молекулу одночасно винятковою  
динамічністю (пластичністю) і достатньою  
міцністю. Це, з одного боку, забезпечує  
виконання білком різноманітних біологічних  
функцій, з іншого боку – робить його вразливим  
для факторів зовнішнього середовища. Завдяки  
такій структурі білків конформаційні зміни, що  
викликаються різними факторами, є  
висококооперативним процесом.

Поглинання кванта ультрафіолетового  
випромінювання ароматичними амінокислотами  
(хромофорами) білків супроводжується  
істотною зміною коливальної конфігурації  
білкової молекули. Наслідком цього є зміна  
фізико-хімічних властивостей і біологічної  
активності білка.

Найбільш прийнятними молекулярними  
механізмами поглинання білками енергії УФ, що  
одержали певне експериментальне  
підтвердження, є механізми резонансного

O. G. Lopatynska\*, A. M. Lopatynskyi, V. I.  
Chegel, Ph. D., L. V. Poperenko, Dr., Yu. M.  
Shirshov, Dr.

### UV radiation influence on biomolecular interaction upon specific binding

The UV radiation influence on specific binding  
of trypsin and soybean trypsin inhibitor  
biomolecules was investigated using surface  
plasmon resonance (SPR) method. It was found out  
that trypsin – soybean trypsin inhibitor pair keeps  
its specificity under long time UV influence, unless  
the trypsin molecule partially is destroyed.

Key Words: biomolecule, specific binding, UV  
radiation, plasmon.

поглинання електромагнітного випромінювання  
різних частотних діапазонів в біологічних  
середовищах. Конформаційні коливання  
білкових молекул, що відбуваються з частотами  
від інфранизьких до звукових, супроводжуються  
зміщенням по поверхні електричних зарядів,  
завдяки чому можлива взаємодія з ними  
електромагнітних полів відповідних частот.  
Відомо, що сонячне випромінювання складається  
з трьох смуг – А, В та С (остання поглинається  
озоновим шаром стратосфери). Показано, що в  
результаті опромінення УФ-А та УФ-В може  
спостерігатися деструкція дезоксирибонуклеї-  
нової кислоти (ДНК), що призводить до  
імуносупресії. Коли порушення від УФ радіації  
накопичуються, це може спричинити аномальний  
ріст або ділення клітин. Згідно з останніми  
роботами [3] світло може модулювати структуру  
протеїнів. Нещодавно було відкрито механізм,  
згідно з яким УФ опромінення поодиноких  
залишків триптофану ліпази триацилгліцериду  
розриває сусідні дисульфідні зв'язки. Таким  
чином, можна передбачити, які протеїни можуть  
відкрити свої дисульфідні містки під дією УФ  
опромінення їх ароматичних залишків.

Раніше було продемонстровано вплив УФ  
опромінення на характер специфічного зв'язку на  
прикладі пари "Бичачий сироватковий альбумін  
(БСА) – антитіло до нього" [4]. Показано, що УФ  
опромінення призводить до трансформації  
слабкого специфічного зв'язку "антиген



антитіло" в міцний хімічний зв'язок. За цю трансформацію відповідає УФ-В частина спектру. Представлена наразі друга частина дослідження присвячена тестуванню іншої пари біомолекул, які здатні створювати специфічний слабкий зворотній зв'язок: трипсін – соєвий інгібітор трипсіну (СІТ). Ця пара є достатньо вивченою в теоретичному та практичному плані і може слугувати моделлю для встановлення основних закономірностей впливу УФ опромінення на біомолекулярні взаємодії. Слід підкреслити, що характер специфічної взаємодії цієї пари може відрізнятися від взаємодії БСА – антитіло до БСА (анти-БСА), бо походження цих пар різне. БСА та анти-БСА є білками тваринного походження, тоді як в парі трипсін – СІТ останній є рослинним білком. Таким чином, у даній роботі буде досліджено вплив УФ випромінювання на специфічне зв'язування біомолекул трипсіну та соєвого інгібітору трипсіну за допомогою методу ППР.

#### Експериментальна частина

Для проведення експерименту було використано ППР-спектрометр ПЛАЗМОН-4м виробництва Інституту Фізики Напівпровідників НАНУ з додатковим УФ освітлювачем широкого спектру (рис.1).

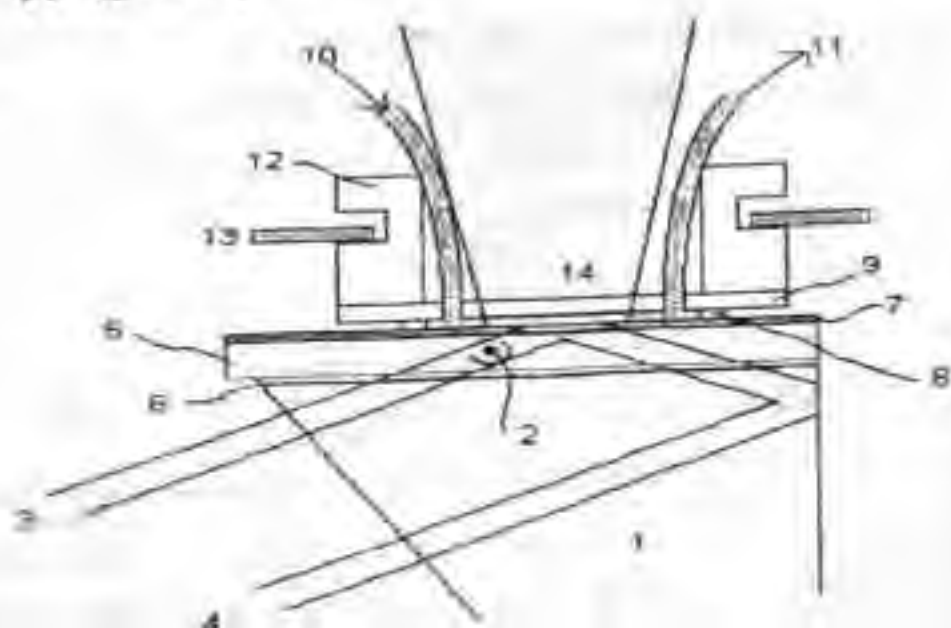


Рис. 1. Сенсорний блок ППР-приладу з можливістю УФ опромінення досліджуваної речовини: 1 – призма, 2 – лазерний промінь, 3 – вхідний промінь, 4 – вихідний промінь, 5 – скляна підкладка, 6 – імєрсія, 7 – напилений шар золота, 8 – ущільнююче гумове кільце, 9 – кварцове вікно, 10 – вхідна трубка для рідини, 11 – вихідна трубка для рідини, 12 – комірка, 13 – прижим, 14 – зона УФ опромінювання.

Скляні підкладки (ВФ-1) з шаром напиленого золота товщиною 45 нм використовувались для збудження поверхневих плазмонів. Спеціально розроблена проточна комірка з вмонтованим кварцовим вікном дозволила проводити ППР-вимірювання в проточному режимі, використовуючи перистальтичну помпу. Швидкість потоку складала 10 мкл/хв. В якості

джерела ультрафіолету використовувалась ртутна лампа ПРК-4. Потужність УФ випромінювання широкого спектру на поверхні шару золота складала 0,12-0,16 кДж/м<sup>2</sup> для умов водного розчину [4]. В якості розчинника була використана дистильована вода. При дослідженні окремо трипсіну та СІТ був використаний стаціонарний режим вимірювань, для спостереження взаємодії цієї пари білків – проточний. Відомо, що поверхня чистого золота не є оптимальною для дослідження біоспецифічних взаємодій методом ППР завдяки можливому денатуруючому впливу поверхні металу. Тому поверхня золотої плівки при дослідженні білкових взаємодій була модифікована моношаром KCNS, що призводить з одного боку до пасивації металевої поверхні, а з іншого – створює поверхневий негативно заряджений функціональний шар CNS. Це призводить до притягання та закріплення позитивно заряджених молекул СІТ, ізoeлектрична точка (ІТ) якого складає 4,5. При цьому значна кількість молекул СІТ може бути орієнтованою відносно нормалі до поверхні завдяки асиметрії електричного заряду в об'ємі молекули СІТ [5]. У всіх експериментах були використані розчини СІТ та трипсіну в концентрації 250 мкг/мл. Концентрація KCNS складала 1 мкг/мл.

#### Результати та обговорення

За допомогою ППР-методу було показано характерні відмінності впливу УФ випромінювання для окремо взятих тваринного та рослинного білків. Трипсін виявився дуже чутливим до дії УФ випромінювання (рис. 2).

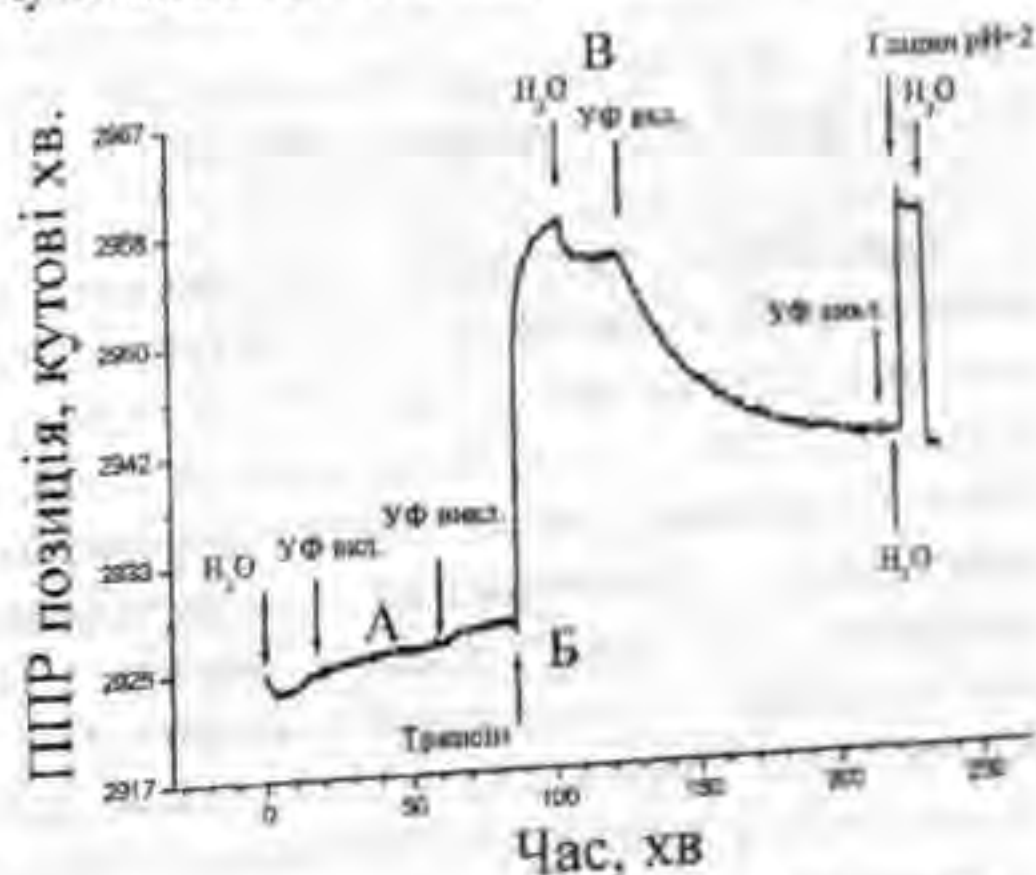


Рис. 2. Кінетична залежність зміщення кута мінімуму кривої ППР для модифікованої KCNS поверхні золота (А) та при адсорбції 250 мкг/мл трипсіну (Б) під впливом УФ випромінювання (В).



Зміщення позиції мінімуму ППР-кривої в сторону менших кутів (негативне), яке спостерігалось в умовах відсутності рідинного потоку, може пояснюватись структурними змінами в біомолекулі цього білку, розривом сусідніх S-S зв'язків та розгортанням молекулярного ланцюга. Слід зазначити, що ароматичні залишки є преференційними сусідами дисульфідних містків, а час життя триптофанових залишків у збудженому електронному стані зменшується з наносекунд до пікосекунд [3]. Тобто, основну роль в короткохвильовому зміщенні позиції ППР-мінімуму при опроміненні подібних біоструктур може відігравати розрив дисульфідних S-S зв'язків внаслідок опромінення хромофорів (ароматичних амінокислот). Слід враховувати також можливість поверхневої десорбції та розпадання молекули на частки. Вплив УФ випромінювання на шар іммобілізованого СІТ виражений набагато менше, ніж на шар трипсіну (рис. 3).

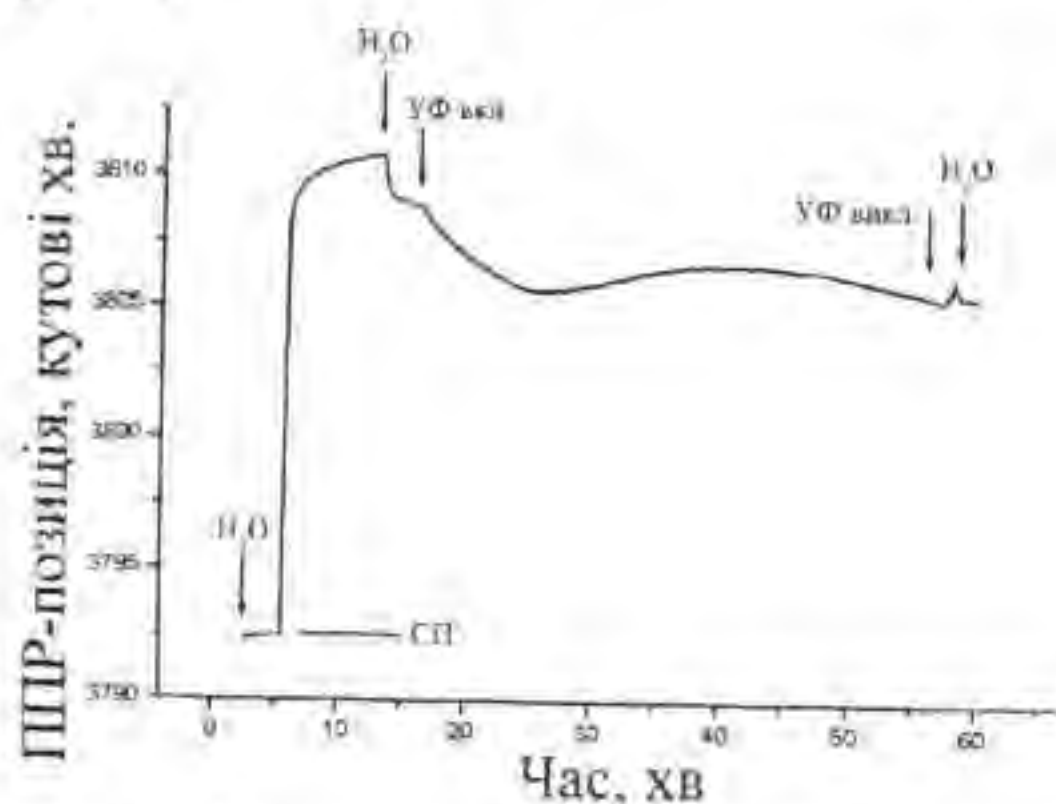


Рис. 3. Кінетична залежність зміщення кута мінімуму ППР-кривої при адсорбції 250 мкг/мл СІТ під впливом УФ випромінювання.

Враховуючи рослинне походження СІТ, можна зробити висновок про більшу стійкість цієї біомолекули до впливу УФ, на відміну від білку тваринного походження. Одним з пояснень цього феномену може бути відмінність у взаємному розташуванні триптофанових залишків та дисульфідних містків. ППР-вимірювання специфічної взаємодії між молекулами трипсіну та СІТ показали помітні відмінності в реакції на УФ випромінювання в порівнянні з взаємодією БСА – анти-БСА. Основна відмінність полягає в відсутності помітного впливу УФ випромінювання на результат взаємодії, в випадку, коли опромінюється шар СІТ, іммобілізований на модифікованій (з використанням KCNS) поверхні

золота. При цьому значних особливостей в специфічній взаємодії білків не спостерігається і в гліциновому буферному розчині (pH=2) розриваються майже всі специфічні зв'язки (рис. 4).

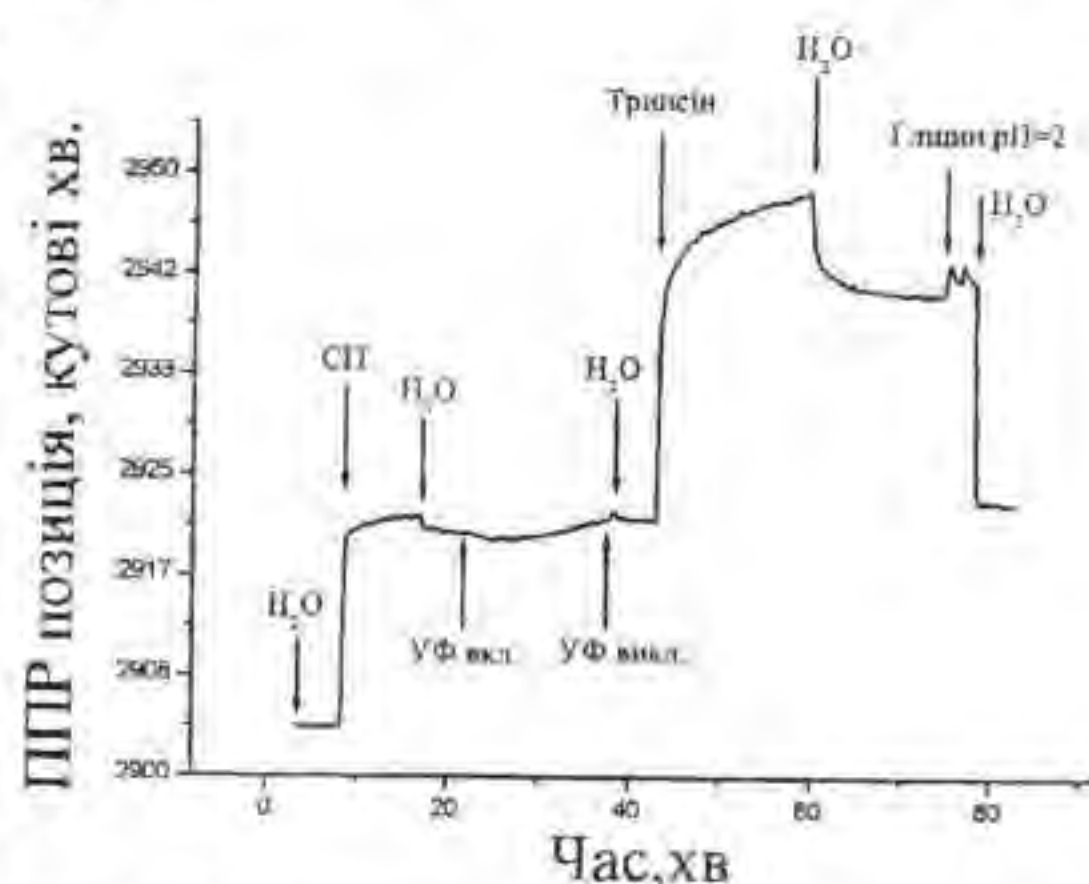


Рис. 4. Кінетична залежність зміщення кута мінімуму ППР-кривої при взаємодії СІТ – трипсін в умовах УФ опромінювання шару СІТ.

Протилежна реакція на УФ опромінення спостерігається у випадку, коли першим іммобілізується шар трипсіну. Після його опромінення наступна іммобілізація молекул СІТ стає практично неможливою, що виглядає достатньо непередбачуваним (рис. 5).

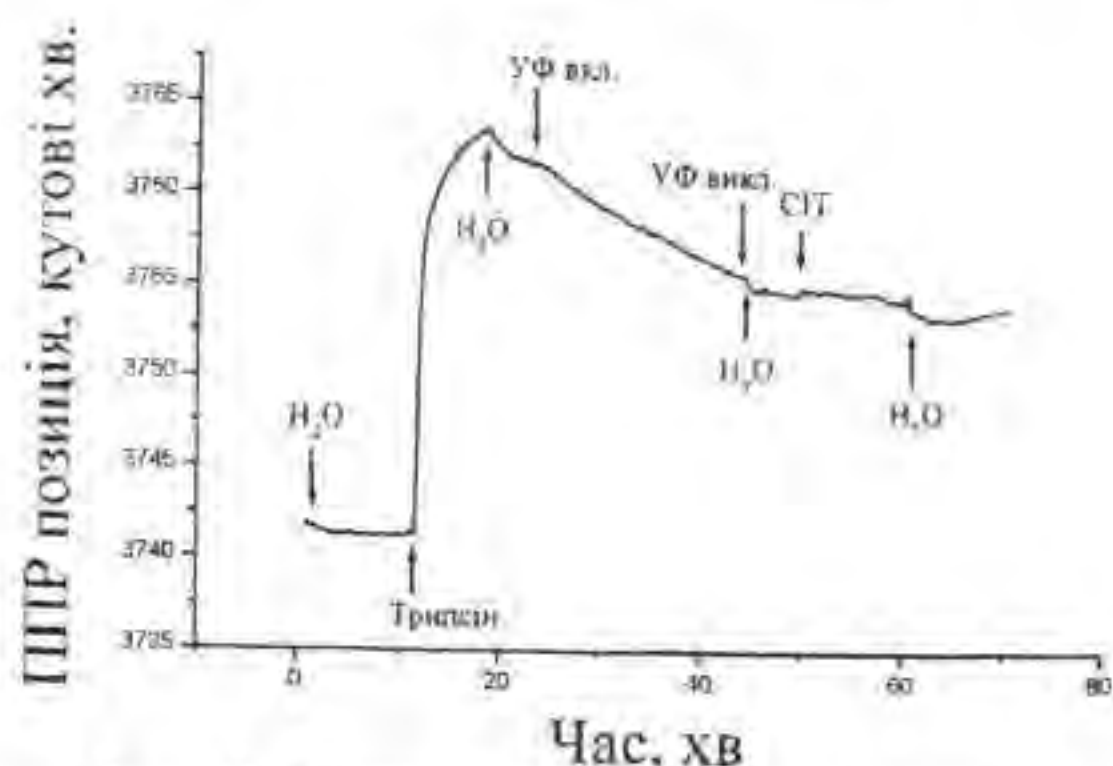


Рис. 5. Кінетична залежність зміщення кута мінімуму ППР-кривої при взаємодії трипсін – СІТ в умовах опромінювання УФ шару трипсіну.

Подібна реакція, швидше за все, може бути наслідком електростатичних взаємодій. Враховуючи, що молекула СІТ у водному середовищі (pH=6-7) заряджена позитивно (pI=4,5), а молекула трипсіну негативно (pI=10,4), можна припустити, що конформаційні зміни в молекулі трипсіну під впливом УФ призводять до значного перерозподілу зарядів на



її поверхні з локалізацією позитивно заряджених груп на поверхні шару трипсіну.

УФ опромінення шару трипсіну, іммобілізованого на шар СІТ, не впливає помітно на специфічне зв'язування між досліджуваними біомолекулами (рис. 6).

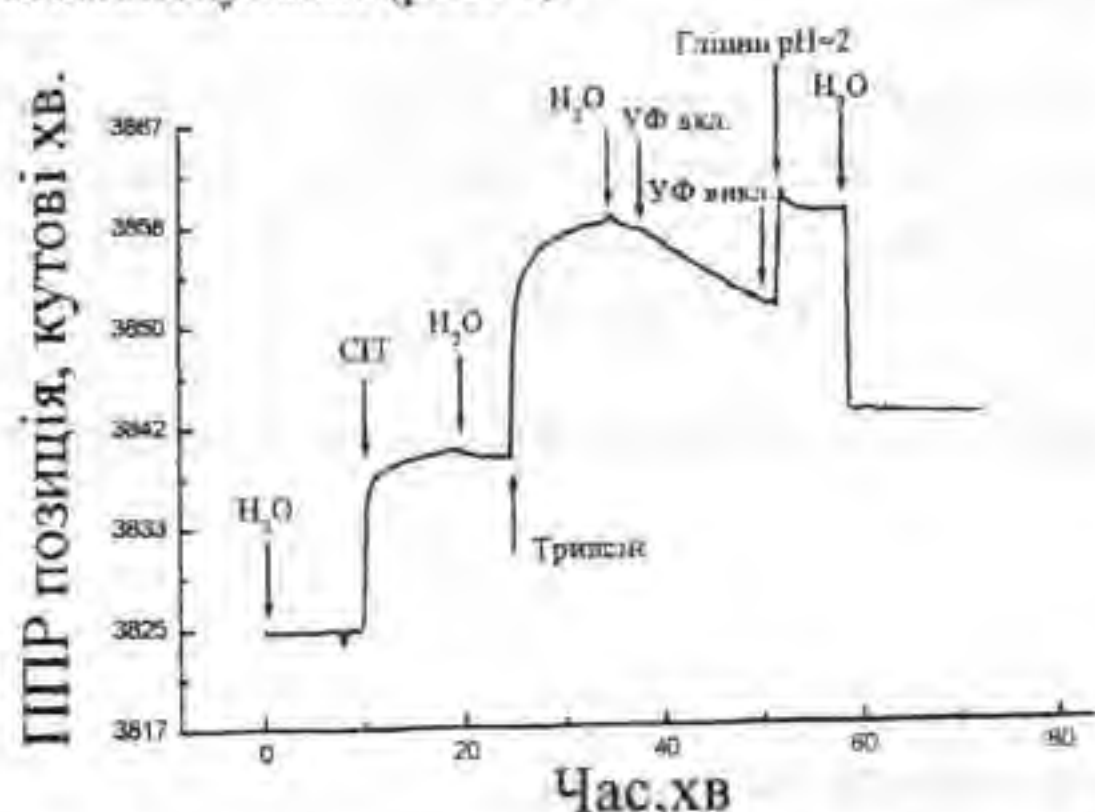


Рис. 6. Кінетична залежність зміщення кута мінімуму ППР-кривої при взаємодії СІТ – трипсін в умовах УФ опромінювання.

Незважаючи на існування помітного зміщення ППР-позиції в сторону менших кутів, яке спостерігається після початку опромінювання трипсіну, при зміні середовища з нейтрального ( $\text{pH}=6-7$ ) на кисле ( $\text{pH}=2$ ) відбувається практично повний розрив специфічних зв'язків між трипсіном та СІТ. Поясненням цього факту може бути захисна функція верхнього шару трипсіну проти опромінення та підвищена конформаційна стійкість специфічного сайту СІТ. Збереження функцій специфічного зв'язування також, вірогідно, вказує на відсутність триптофанових залишків та S-S містків поблизу специфічних сайтів цієї пари біомолекул, на противагу парі БСА – анти БСА.

#### Висновки

З використанням методу ППР досліджено вплив УФ опромінення на шари молекул трипсіну та соєвого інгібітору трипсіну, іммобілізовані на модифікованій поверхні золотої плівки. Зареєстровано деструктивний вплив УФ на структуру трипсіну та практичну відсутність такого для молекули СІТ, що пояснюється відмінностями в локалізації ароматичних залишків амінокислот та S-S містків. Виявлено відмінність впливу УФ для специфічної пари СІТ – трипсін в порівнянні з раніше дослідженою парою БСА – анти-БСА. Основна відмінність полягає в збереженні специфічності взаємодії пари СІТ – трипсін після опромінення СІТ, іммобілізованого на модифікованій поверхні золота чи опромінення

шару трипсіну, іммобілізованого на поверхні шару СІТ. Інша відмінність полягає у частковій деструкції біомолекулярної пари та зменшенні маси молекул. Цей цікавий феномен вказує на очевидну відмінність впливу УФ на різні типи біомолекулярних пар, що виявляють властивості специфічної реакції, та підтверджує можливості ППР-сенсорів реєструвати та розрізняти різні типи біомолекулярних взаємодій та конформаційних перетворень.

#### Список використаних джерел

1. Strid E., Chow W.S., Anderson J.M. Changes in the relaxation of electrochromic shifts of photosynthetic pigments and in the levels of mRNA transcripts in leaves of *Pisum sativum* as a result of exposure to supplementary UV-B radiation. The dependency on the intensity of the photosynthetically active radiation // *Plant Cell Physiol.* – 1996. – №37. – P. 61-67.
2. Salter A.H., Koivuniemi A., Strid E. UV-B and UV-C irradiation of PSII core and reaction centre particles in vitro. Identification of different fragments of the D1 protein and of multiple cleavage sites depending upon irradiation wavelength and particle type // *Plant Physiol. Biochem.* – 1997. – №35. – P. 809-817.
3. Neves-Petersen M.T., Gryczynski Z., Lakowicz J., Fojan P., Pedersen S., Petersen E., Bjorn Petersen S. High probability of disrupting a disulphide bridge mediated by an endogenous excited tryptophan residue // *Protein Sci.* – 2002. – Vol. 11, Issue 3. – P. 588-600.
4. Shirshov Yu. M., Majstrenko A. S., Smertenko P. S., Surovtseva E. R. Direct observation of UV-B radiation effect on antigen-antibody coupling using surface plasmon resonance // *Sensors and Actuators B: Chemical.* – 2005. – Vol. 105, Issue 2. – P. 290-294.
5. Болтовец П.Н., Снопко Б.А., Ширшов Ю.М., Дяченко Н.С. Организованные белковые слои для оптоэлектронных биосенсорных систем: ориентированная иммобилизация протеинов на модифицированной поверхности золота // *Доповіді НАНУ.* – 2001. – №11. – С.139-146.

Надійшла до редколегії 21.03.07



УДК 548:539.32

Онанко А.П., зав. лаб., канд. фіз.-мат наук, с.н.с.

## Кінетика пружно-непружного тіла сплаву $Al_{0.5}Be_{0.5}$

Досліджувалась часова залежність модуля пружності та внутрішнього тертя (вказівної поверхні пружно-непружного тіла) сплаву  $Al_{0.5}Be_{0.5}$ . При відпалі має місце виділення когерентних зон.

Ключові слова: структурні дефекти, внутрішнє тертя.

E-mail: [onanko@mail.kiev.ua](mailto:onanko@mail.kiev.ua)

Найважливішими характеристиками механічних властивостей сплаву є його термостабільність, пружність, міцність. Вивчення мікроскопічних механізмів впливу дефектів кристалічної структури на механічні властивості сплавів дозволяє створювати функціональні матеріали з наперед заданими характеристиками. Міцність сплавів пов'язана з взаємодією дислокацій з точковими дефектами. До точкових дефектів відносяться вакансії, домішкові атоми, міжвузлові атоми, які утворюють комплекси, домішкові атмосфери, включення другої фази.

У вікнах виводу електронів використовуються титанові фольги, котрі при виводі значної щільності потоку електронів гріються, при цьому межа міцності  $\sigma_M$  при температурі більше 670 К падає. Сплав  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  використовується у вікнах виводу електронних прискорювачів. Наступна робота є продовженням [1].

### Експеримент

Для виміру температурних залежностей внутрішнього тертя (ВТ) і модуля пружності  $E$  сплаву  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  (локалої) після механічного різання і шліфування використовувалися методики чотирьохскладового п'єзоелектричного вібратора на частоті  $\sim 117$  кГц і згінних резонансних коливань на частоті  $\sim 3$  кГц при знакозмінній деформації  $\epsilon \sim 10^{-6}$  у вакуумі не гірше  $10^{-3}$  Па [1]. Погрішність виміру ВТ максимально дорівнювала 4%, а виміру відносної зміни модуля пружності  $\Delta E$  – не більше 0,1%.

Onanko A.P., Sen. Sci. Res., PhD

## Kinetic of elasticity-unelasticity state of $Al_{0.5}Be_{0.5}$

Time dependence of elastic modules and internal friction (indicatory surface of elasticity-unelasticity state)  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  alloy were explored. The coherent regions are created at annealing.

Key words: structural defects, internal friction

### Результати і їх обговорення

На рис.1 наведено часову залежність модуля пружності  $E$  і внутрішнього тертя  $Q^{-1}$  (вказівної поверхні пружно-непружного тіла) сплаву  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  при 485 К у початковому стані після механічної обробки і відпалу при  $T_B \approx 600$  К на протязі  $t_B \approx 7200$  сек.

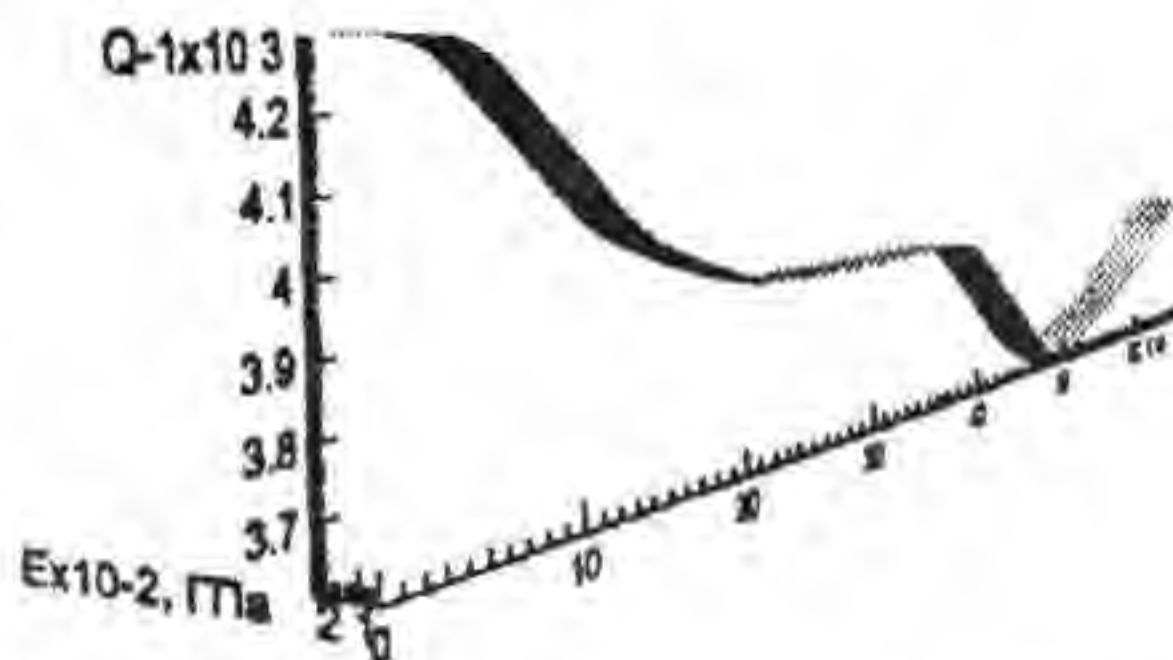


Рис. 1 Часова залежність модуля пружності  $E$  і внутрішнього тертя  $Q^{-1}$  (вказівної поверхні пружно-непружного тіла) сплаву  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  при 485 К.

Спостерігалася висока величина фону ВТ  $Q_f^{-1} \sim 4 \cdot 10^{-3}$ . Міграція структурних дефектів в  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  здійснюється шляхом послідовних дискретних переходів з одного положення в кристалічній решітці в інше. Для здійснення перескоку, в результаті якого змінюється властивість, структурному дефекту потрібно додати енергію активації  $H$ . Швидкість відпалу  $Q^{-1}$ , що залишилось після відпалу при температурі  $T_B$  на протязі часу  $t$ , описується наступним виразом:



$$dQ^{-1}/dt = A[Q^{-1}(t)]^n \exp(H/k_B T_B), \quad (1)$$

де  $A$  – постійна,  $n$  – порядок реакції.

Сплав  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  є пресищений твердий розчин, який при низькотемпературному старінні має когерентні виділення – флуктуації с малими концентраціями і спотворення зон Гінке-Престона [2]. При відпалі має місце наступне виділення когерентних зон, ухід нерівноважних вакансій, домішок.

Приведена на рис.2 часова залежність ВТ приблизно описується виразом:

$$Q^{-1} = Q_0^{-1} \cdot \exp(-t/\tau), \quad (2)$$

де  $t$  – час вимірювання,  $\tau$  – час релаксації, який характеризує процес зміни ВТ на протязі відпалу, обумовлений розпадом вакансійних комплексів, перезакріпленням дислокацій.

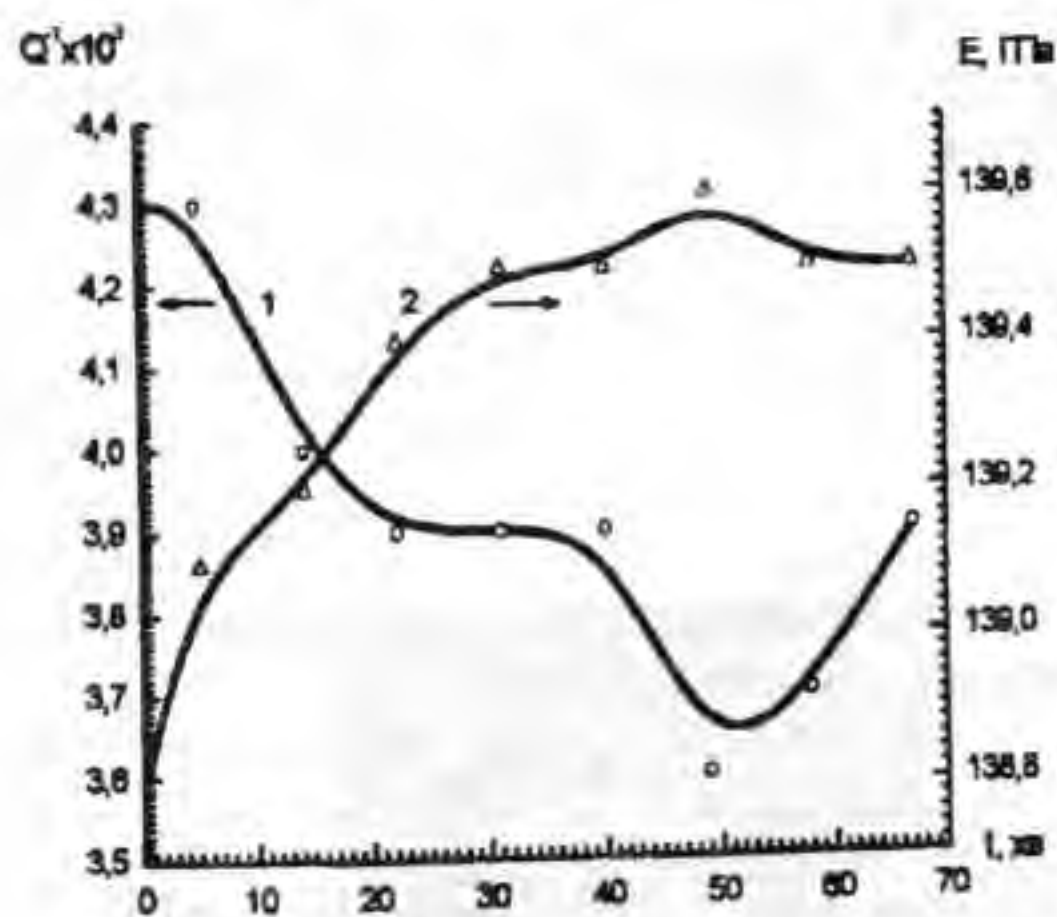


Рис. 2 Часова залежність внутрішнього тертя  $Q^{-1}$  (1) і модуля пружності  $E$  (2) сплаву  $Al_{0.5}Be_{0.5}$

По значенню тангенса кута нахилу прямої на рис.3 в полулогарифмічних координатах  $\ln(Q^{-1}) - t$  визначили оптимальний час відпалу при температурі  $\tau(485) \approx 387$  хвилин  $\approx 6$  часів 30 хвилин.

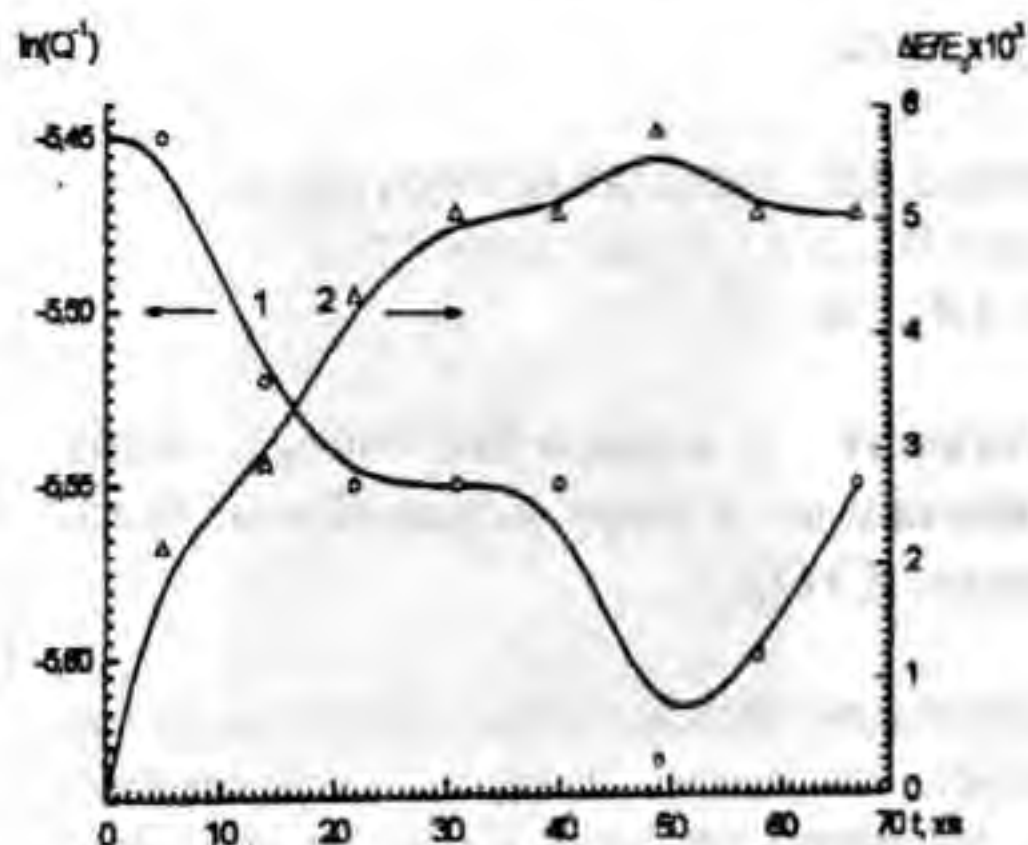


Рис. 3 Часова залежність внутрішнього тертя в полулогарифмічних координатах  $\ln(Q^{-1})$  (1) і глибини релаксації модуля пружності  $\Delta E/E_0$  (2) сплаву  $Al_{0.5}Be_{0.5}$

При відпалі вимірювалась також часова залежність глибини релаксації модуля пружності [3], представлена на рис.3

$$\eta = \Delta E/E_0 = (E - E_0)/E_0, \quad (3)$$

де  $E$  поточна величина модуля пружності,  $E_0$  – 138,8 ГПа – мінімальне значення модуля пружності при відпалі при  $T_B \approx 485$  К при амплітуді ультразвукової деформації  $\epsilon \approx 1 \cdot 10^{-6}$ , меншої критичної амплітуди відриву дислокаційних сегментів від стопорів.

Отримана мала енергія активації  $H \approx 0,2$  еВ дозволяє припустити відповідний механізм низькотемпературного старіння Be у сплаві, обумовлений міграцією бівакансій.

#### Список використаних джерел

1. Онанко А.П. Вказівна поверхня пружно-непружного тіла  $Al_{0.5}Be_{0.5}$  // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2005. – № 4. – С.531–533.
2. Kulish N.P., Onanko A.P., Petrenko P.V. and etc. Influence of the ordering on the relaxation processes in Ag-Al alloys // Met. Phys. Adv. Tech. – 2001. – Vol. 19. – P.1311–1315.
3. Новик А., Берри Б. Релаксационные явления в кристаллах. – М.: Атомиздат, – 1975. – С. 472.

Надійшла до редколегії 03.03.07



УДК 535.32/34

Поперенко Л.В., д-р фіз.-мат. наук, проф.,  
Григорук В.І., д-р фіз.-мат. наук, проф.,  
Носач Д.В., інж.

## Особливості фізико-хімічного стану функціонального шару нержавіючої сталі з плівкою $\text{CrO}_x$

Досліджено особливості мікрорельєфу та корозійної стійкості поверхні нержавіючої сталі, покритої плівкою  $\text{CrO}_x$ , до та після взаємодії з плазмою людської крові. Встановлено, що зменшення потоку кисню у вакуумній камері під час осадження оксиду хрому на поверхню є найбільш сприйнятливим для отримання матеріалів з нержавіючої сталі з підвищеною корозійною стійкістю функціонального шару, що ефективно діятиме в умовах оточення біологічно активним середовищем.

Ключові слова: корозійна стійкість, тонка плівка, електрохімічний потенціал, шорсткість, еліпсометрія.

\*E-mail: [plv@univ.kiev.ua](mailto:plv@univ.kiev.ua), [n\\_d\\_v@ukr.net](mailto:n_d_v@ukr.net)

Методика нанесення тонких шарів хрому на поверхні елементів, які виконують певні функції, дуже широко використовуються у сучасній техніці (від декоративного хромування та осадження тонких шарів на оптичних елементах до функціональних елементів з поверхнею, що знаходяться в контакті з біологічним об'єктом).

Існує небагато матеріалів, які застосовуються в медицині в якості імплантатів. Особливо цінними стають ті матеріали, які безпосередньо взаємодіючи із біологічно активним середовищем (наприклад, з плазмою людської крові) зберігають тривалий час стабільними свої фізичні характеристики. Тому актуальним є пошук нових матеріалів або плівкових функціональних систем, які, в свою чергу, мінімально б впливали на відповідне біологічне середовище. Ось чому запропоновано використати в якості біосумісного матеріалу нержавіючу сталь ((SS) AISI 316), на яку нанесено оксид хрому за умов його осадження при різних параметрах магнетронного розпилення (табл. 1).

Дублікати виготовлених зразків використовувалися пізніше в тесті на сумісність, як і оригінали.

Poperenko L.V., prof., Grygoruk V.I., prof.,  
Nosach D.V.

## Features of physical and chemical state of a functional layer of stainless steel with $\text{CrO}_x$ film

Micro relief features and surface corrosion resistance of the stainless steel coated by  $\text{CrO}_x$  film, before and after interaction with human's blood plasma have been investigated. It has been shown, that oxygen's stream decreasing in the evacuated vessel after deposition chrome oxide on a surface is optimum for materials production from stainless steel with the increased corrosion resistance of the functional layer. Such antirust coat will be effective in operations with biologically active media.

Key Words: corrosion resistance, electrochemical potential, thin film, roughness, ellipsometry.

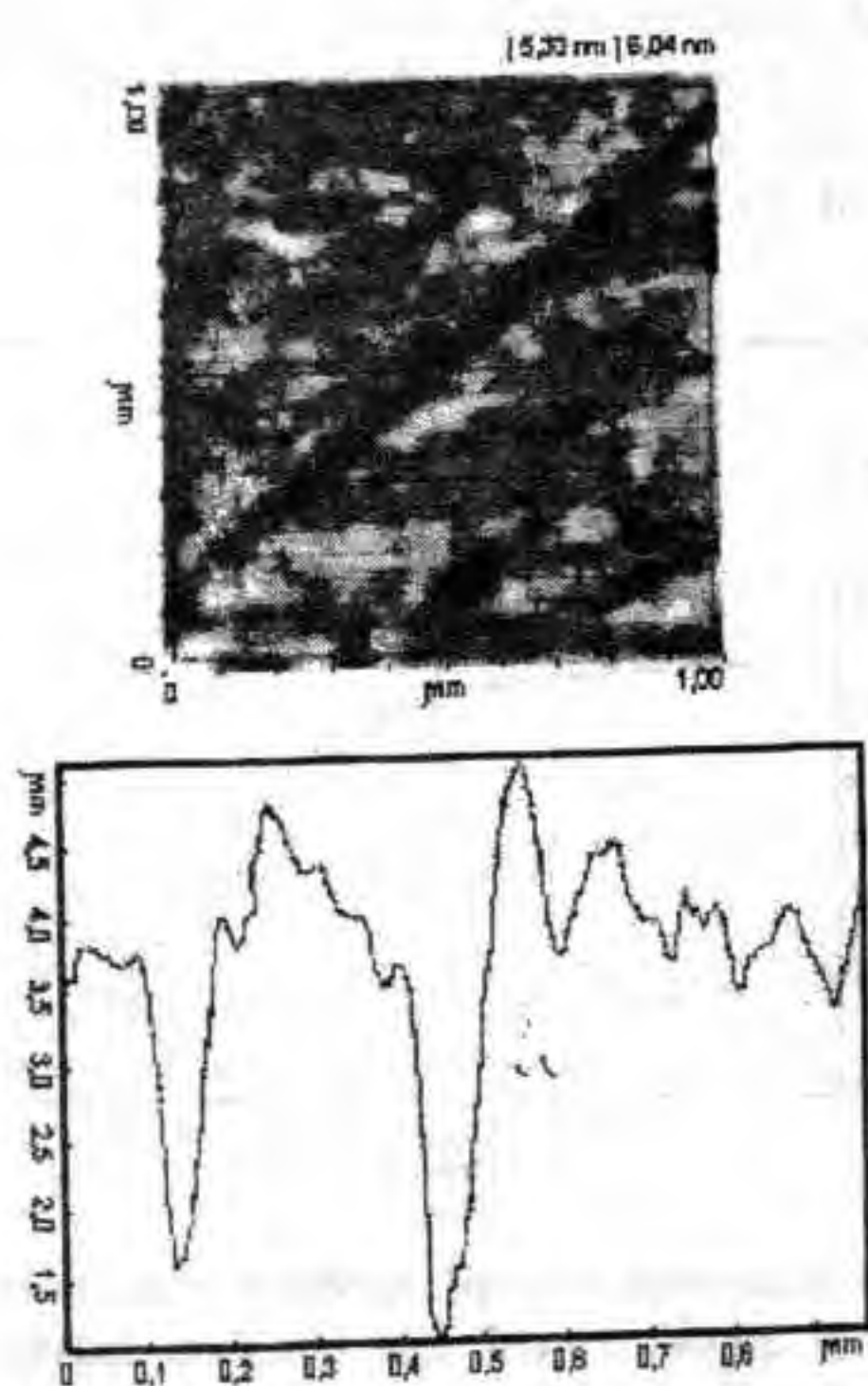
Таблиця 1  
Технологічні параметри осадження плівок  $\text{CrO}_x$  на поверхню нержавіючої сталі

| Зразок №              | 2,4               | 3,5                 |
|-----------------------|-------------------|---------------------|
| Напруга магнетрона, В | 470               | 470                 |
| Тиск в камері, Па     | $4 \cdot 10^{-3}$ | $4 \cdot 10^{-3}$   |
| Тиск кисню, Па        | $2 \cdot 10^{-1}$ | $3.9 \cdot 10^{-1}$ |
| Час процесу, хвилини  | 10                | 10                  |

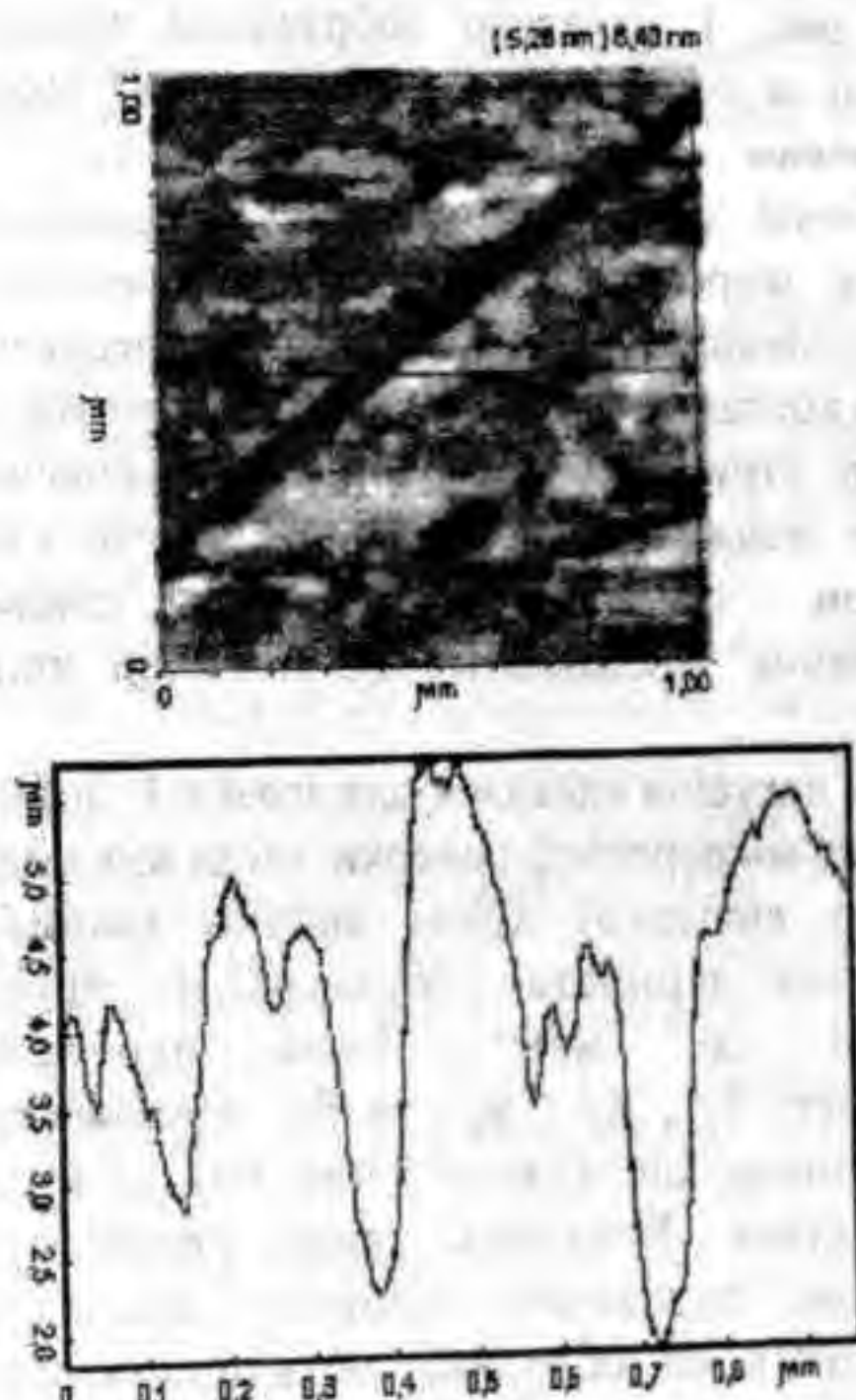
Для оцінки сумісності шаруватої системи „пасивуюча плівка нержавіючої сталі - плівка  $\text{CrO}_x$ ” з кров'ю зразки протягом 45 хвилин перебували у контакті з плазмою людської крові, збагаченою тромбоцитами, в штучно створеній атмосфері з вологістю 95% і 5%  $\text{CO}_2$  при температурі  $37^\circ\text{C}$ .

Щоб оцінити характер структури поверхні до та після перебування в такому контакті, зразки досліджено методом атомно-силової мікроскопії (АСМ). Шорсткість поверхні оцінювалась декількома параметрами:  $S_z$  - відхилення мінімуму та максимуму шорсткості,  $S_q$  - середньоквадратичне відхилення шорсткості,  $S_a$  - середньоарифметичне відхилення шорсткості,  $S_d$  - девіація шорсткості на 5 максимумах та 5 мінімумах мікрорельєфу вздовж базової прямої.





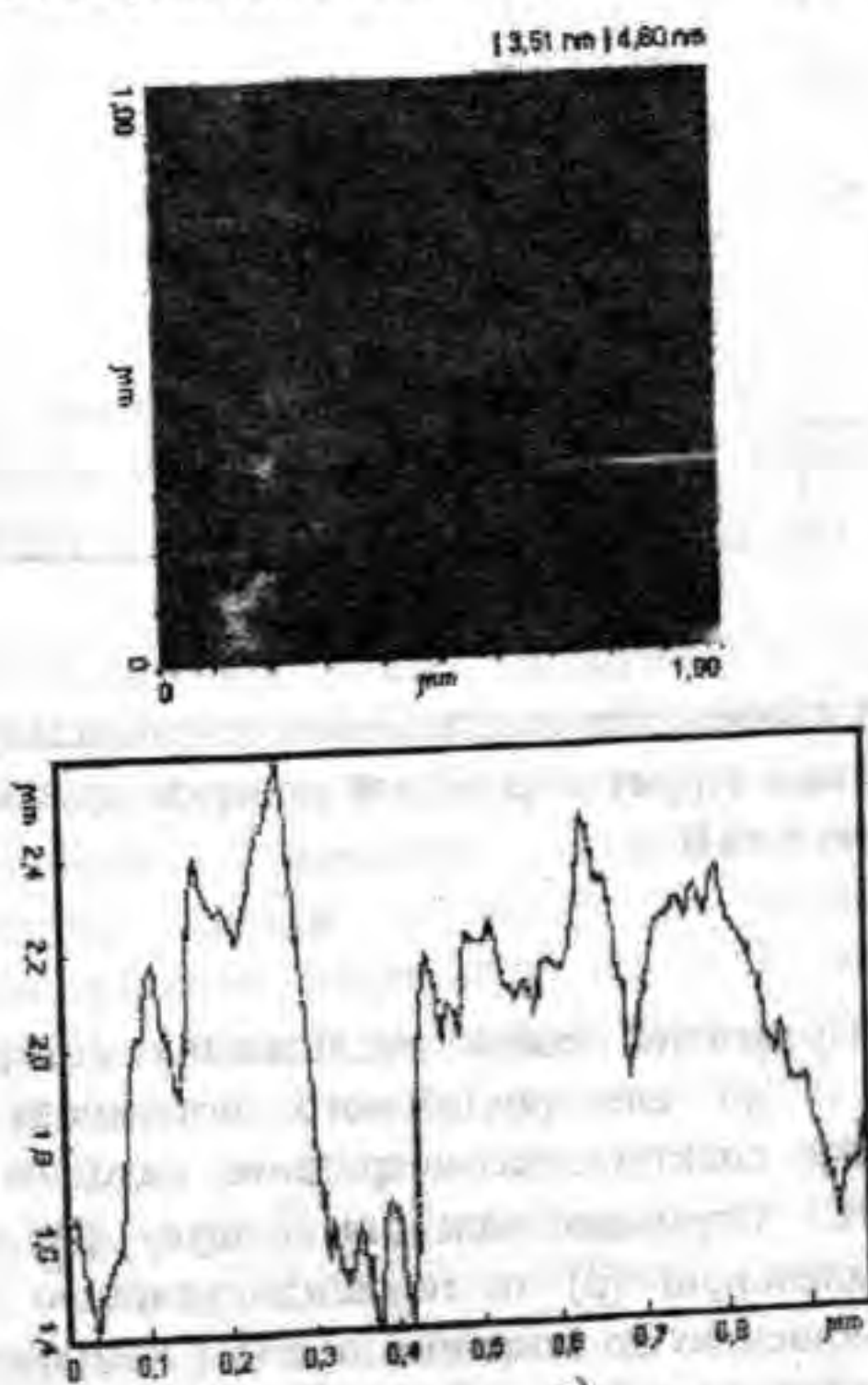
a)



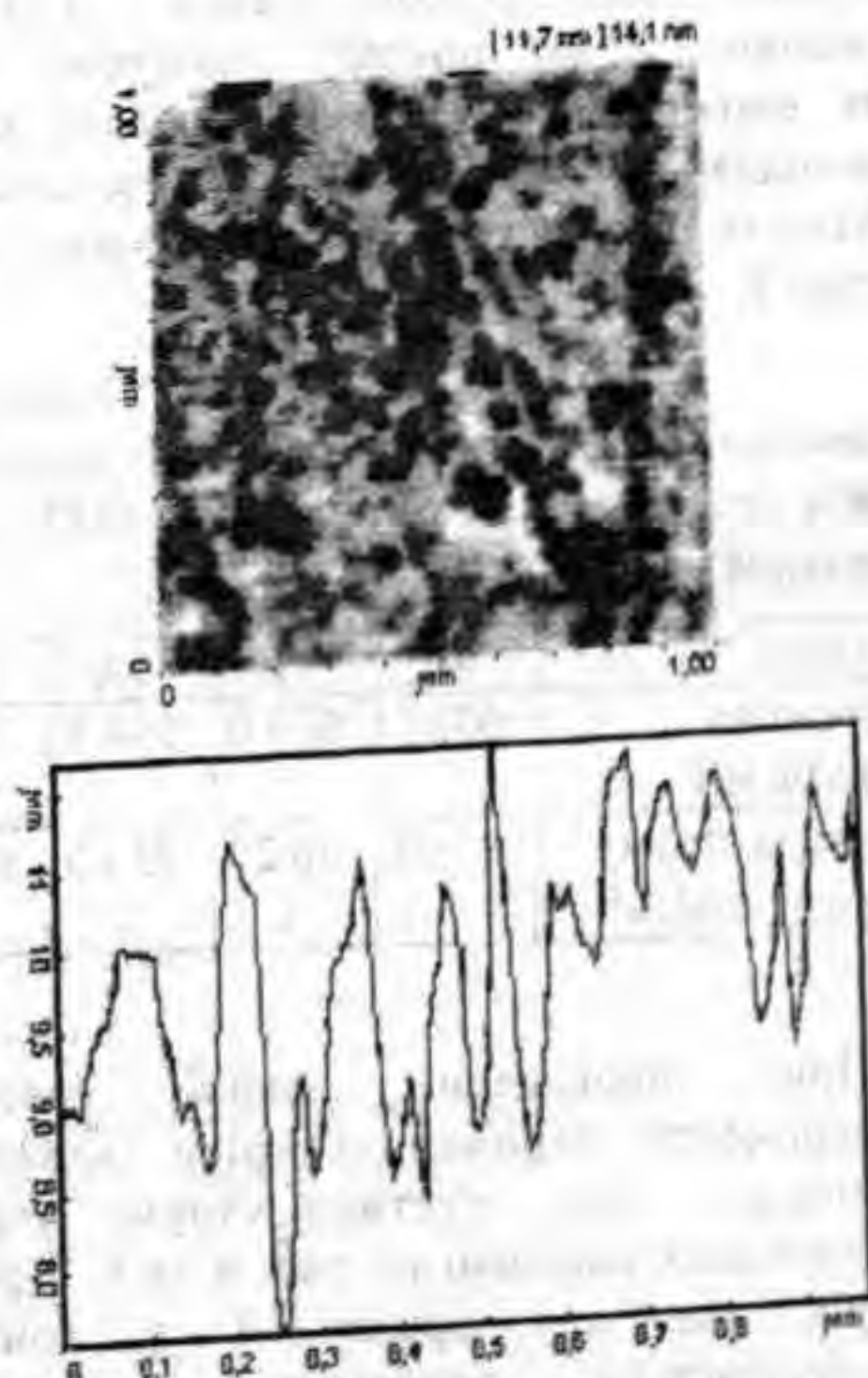
б)

$S_y=6.04\text{nm}$ ,  $S_q=884\text{pm}$ ,  $S_a=663\text{pm}$ ,  $S_z=5.53\text{nm}$       $S_y=6.40\text{nm}$ ,  $S_q=855\text{pm}$ ,  $S_a=630\text{pm}$ ,  $S_z=5.60\text{nm}$

Рис.1 Зображення поверхні, одержані за допомогою АСМ ділянки  $1 \times 1 \text{ мкм}^2$  з усередненим поверхневим профілем плівки  $\text{CrO}_x$  на нержавіючій сталі для зразка 2 до взаємодії з плазмою людської крові (а), та після (б) контакту з нею.



a)



б)

$S_y=4.60\text{nm}$ ,  $S_q=425\text{pm}$ ,  $S_a=328\text{pm}$ ,  $S_z=3.97\text{nm}$       $S_y=14.1\text{nm}$ ,  $S_q=1.43\text{nm}$ ,  $S_a=1.05\text{nm}$ ,  $S_z=11\text{nm}$

Рис.2 Зображення поверхні, одержані за допомогою АСМ ділянки  $1 \times 1 \text{ мкм}^2$  з усередненим поверхневим профілем плівки  $\text{CrO}_x$  на нержавіючій сталі для зразка 3 до взаємодії з плазмою людської крові (а), та після (б) контакту з нею.



На рис. 1 наведено зображення поверхні одержані за допомогою АСМ в зоні  $1 \times 1 \text{ мкм}^2$  з поверхневим профілем плівки  $\text{CrO}_x$  на нержавіючій сталі для зразка 2. Порівнюючи значення шорсткості поверхні до взаємодії з плазмою людської крові, та після перебування зразка в контакті з нею, можна стверджувати, що характер структури поверхні після зазначеної обробки майже не змінився. Це могло стати наслідком створення умов слабого „прилипання” тромбоцитів до поверхні плівки  $\text{CrO}_x$ .

Інша ситуація склалася для зразка 3. З рис. 2 видно, що мікрорельєф поверхні після взаємодії з плазмою людської крові значно змінився: з'являється зерниста структура на ділянці поверхні  $1 \times 1 \text{ мкм}^2$ . Зміна параметрів шорсткості  $S_y$ ,  $S_d$ ,  $S_a$  та  $S_z$  відбувається таким чином, що кожен з них майже втричі збільшується. Вочевидь такий результат є наслідком активного процесу осадження тромбоцитів на поверхні нержавіючої сталі покритої плівкою  $\text{CrO}_x$ , який завершився утворенням міцного зв'язку плівки тромбоцитів з поверхнею шару  $\text{CrO}_x$  внаслідок фізичної адгезії.

Для аналізу матеріалів щодо виникнення локальних видів корозії зразки 4 та 5 нержавіючої сталі, покриті плівкою  $\text{CrO}_x$ , після взаємодії з плазмою людської крові були піддані дії електрохімічного потенціалу в областях А та Б, значення якого наведені в таблиці 2.

Таблиця 2

Параметри електрохімічної дії на поверхню зразків нержавіючої сталі з плівкою  $\text{CrO}_x$  після осадження тромбоцитів

| Зразок                                            | 4А    | 4Б    | 5А    | 5Б    |
|---------------------------------------------------|-------|-------|-------|-------|
| Потенціал корозії, мВ                             | 678.0 | 679.0 | 554.4 | 396.0 |
| Густина струму корозії, $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ | 13.08 | 36.20 | 33.60 | 66.13 |

При проведенні даної частини експерименту, отримано графіки залежності потенціалу від густини струму корозії, графіки яких наведені на рис. 4 та 5. З рис. 4 видно, що для зразка 4 в зоні А спостерігається зростання корозійного опору, свідченням чого є той факт, що при одному і тому ж електрохімічному потенціалі, струм, що проходить на ділянці 4А завжди менше, ніж на ділянці 4Б. До того

ж, цей потенціал для зразка 4 (рис. 3) на обох його ділянках А (678 мВ) та Б (679 мВ) вище, ніж для зразка 5 (рис. 4) на ділянках А (554 мВ) та Б (396 мВ).

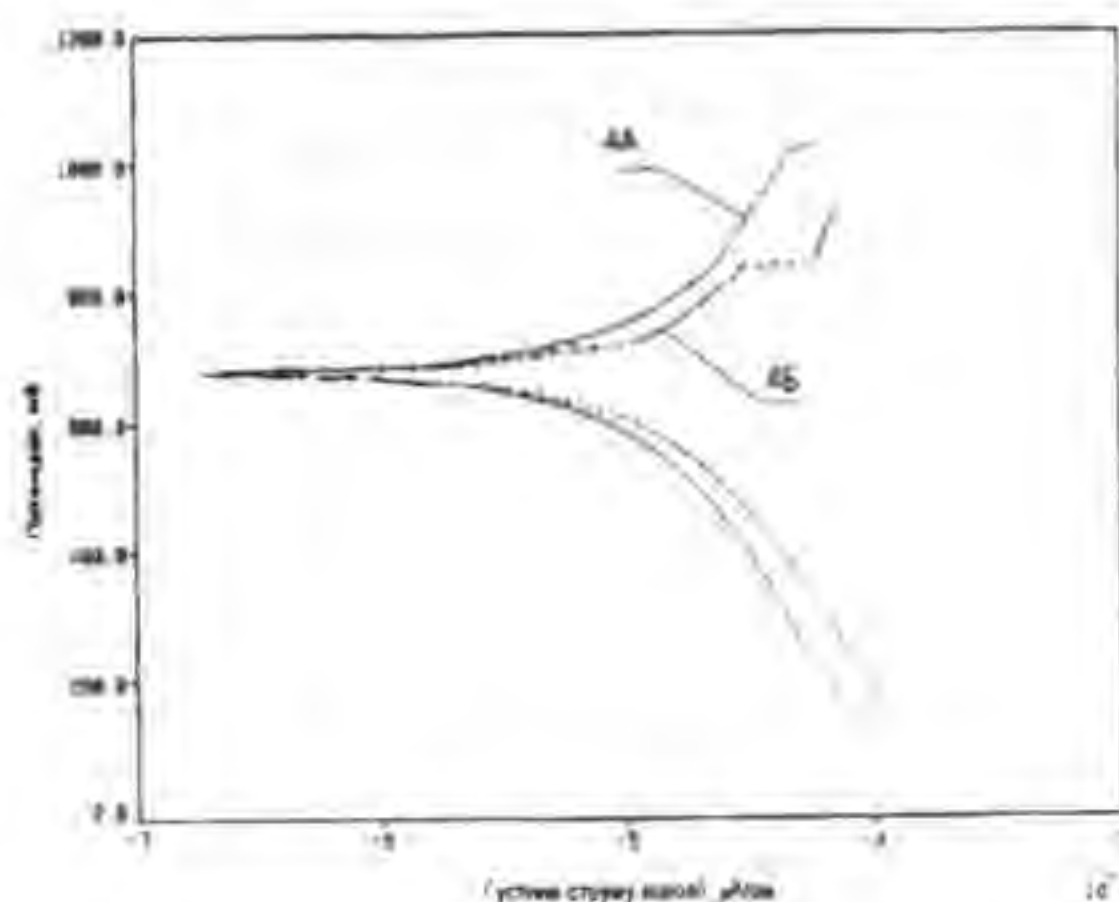


Рис. 3 Залежність електрохімічного потенціалу від густини струму корозії для поверхні зразка 4 в зонах А та Б.

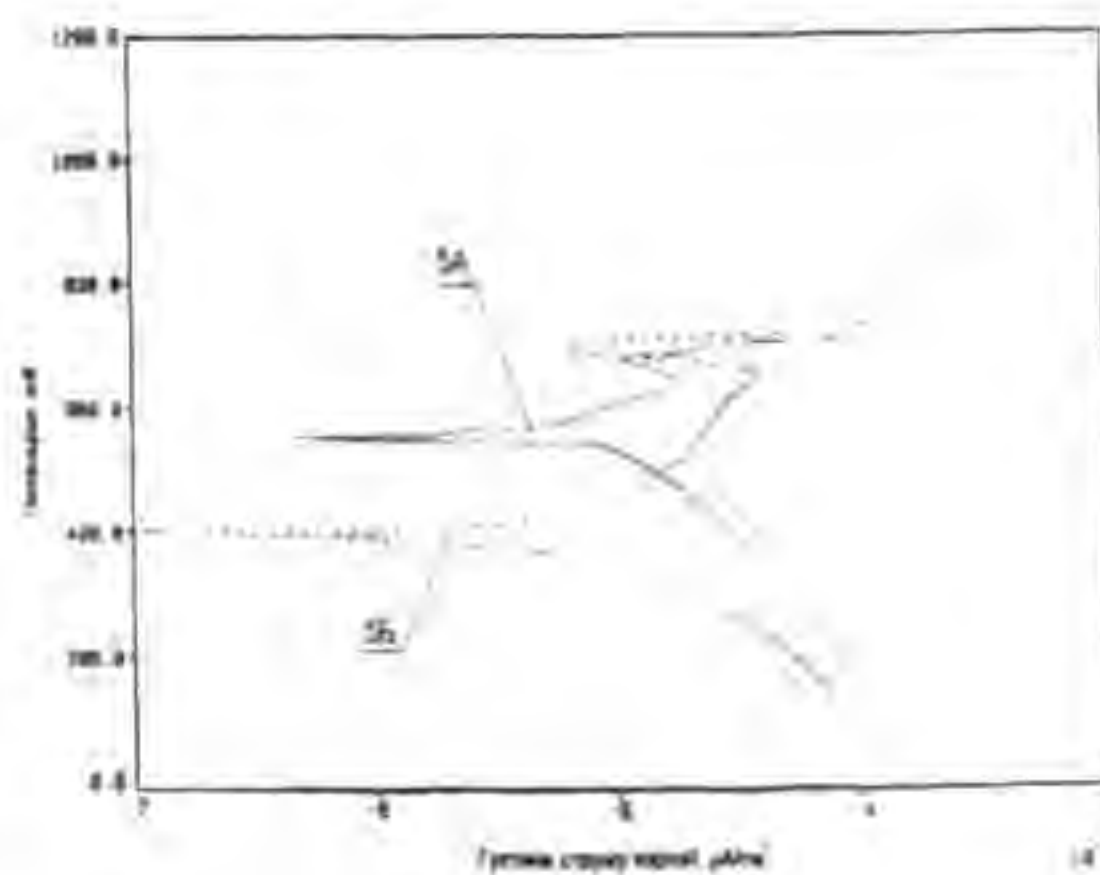


Рис. 4 Залежність електрохімічного потенціалу від густини струму корозії для поверхні зразка 5 в зонах А та Б.

Проведено також дослідження поверхні в зоні дії електрохімічного потенціалу обох зразків спектроеліпсометричним методом Бітті-Кона. Отримано залежності зсуву фаз  $\Delta$  між паралельною (p) та перпендикулярною (s) по відношенню до площини падіння компонентами електричного поля  $E$  відбитого від поверхні зразків 4 чи 5 поляризованого світла, а також азимуту  $\psi$  відновленої лінійної поляризації від енергії фотона  $E$ . Спектральні залежності



зазначених еліпсометричних параметрів наведені на рис. 5-6.

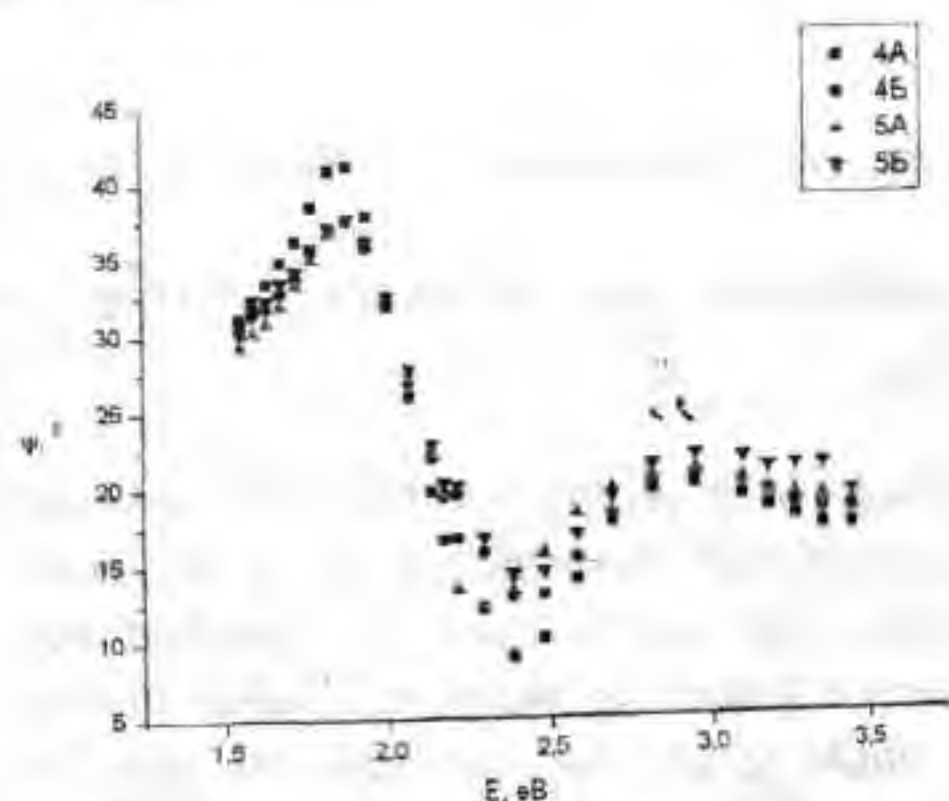


Рис. 5 Залежність азимуту відновленої лінійної поляризації  $\psi$  від енергії фотона  $E$  в зонах дії електрохімічного потенціалу А та Б.

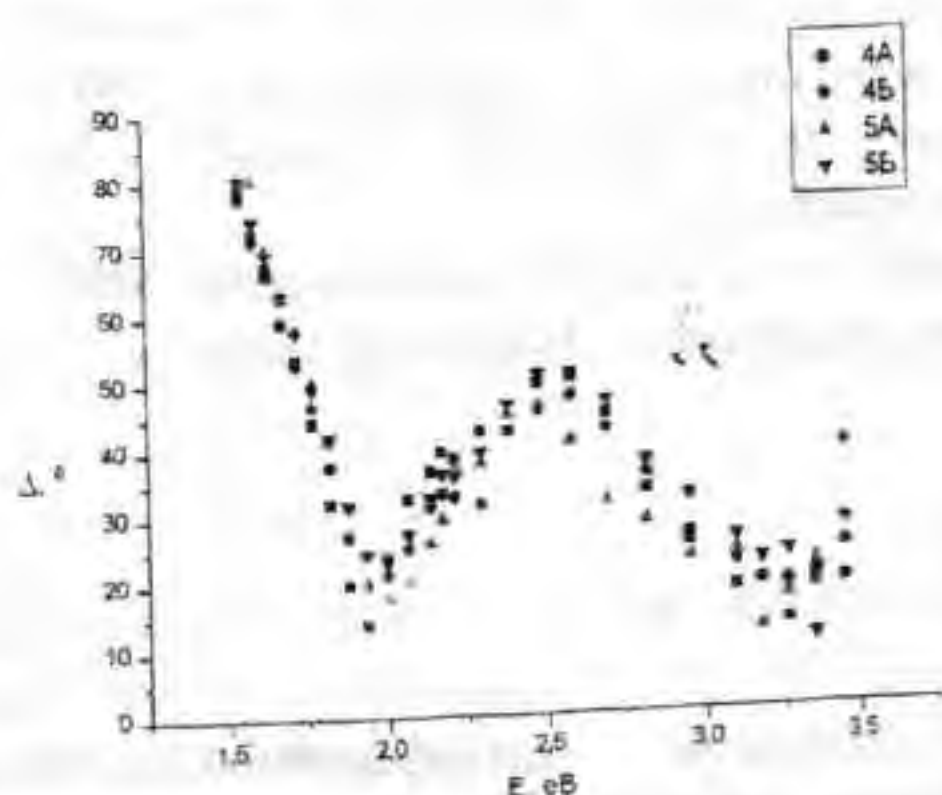


Рис. 6 Залежність зсуву фаз  $\Delta$  від енергії фотона  $E$  для зразків 4 та 5 в зонах дії електрохімічного потенціалу А та Б.

матеріалів з нержавіючої сталі з підвищеною корозійною стійкістю функціонального шару, що ефективно діятиме в умовах оточення біологічно активного середовища.

#### Список використаних джерел

1. Поперенко Л.В., Майтц М.Ф., Носач Д.В. Еліпсометричний контроль плівки оксиду хрому на поверхні дзеркала з нержавіючої сталі / Вісник КНУ. - 2004. с. 30.
2. Поперенко Л.В., Григорук В.І., Носач Д.В. Особливості деформації шару оксиду хрому на поверхні нержавіючої сталі при мікроіндентуванні / Вісник КНУ. Серія фіз.-мат. науки, №2. - 2006. с. - 468.
3. Семенова И.В., Хорошилов А.В., Флорианович Г.М. Коррозия и защита от коррозии / Под. ред. И.В. Семеновой. - 2-е изд. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 376 с.
4. Шайкевич И.А., Дрозд П.И., Поперенко Л.В. Малогабаритный гониометр-эллипсометр и его применение для исследования шероховатости поверхности / Завод лаб., Вып. 7. 1985., 35-36 с.
5. L.V. Poperenko, M.F. Maitz, M.V. Vinnichenko, D.V. Nosach Spectroellipsometry of chromium films grown on stainless steel surfaces. / ICFM, 2003.

Як відомо, для металів 3-d групи (Co, Fe, Ni), мінімальній шорсткості відповідає максимальне значення  $\psi$  у видимій області спектру [4]. Тому, порівнюючи значення еліпсометричних параметрів зразків 4 та 5 в зонах дії електрохімічного потенціалу А та Б, можна спостерігати, що для енергій фотонів 1,5 – 2 eV максимальним значенням  $\psi$  володіє зразок 4 в зоні А. Тоді це свідчить про те, що зразку 4 відповідає мінімальне значення шорсткості навіть після дії на його поверхню електрохімічного потенціалу.

Беручи до уваги дані АСМ, спектральної еліпсометрії та результати аналізу корозійної стійкості, можна стверджувати, що технологічні параметри процесу виготовлення зразка 2 та 4 є найбільш сприйнятливими для отримання



УДК 535.417

Розуван К.П., Розуван\* С.Г., Шайкевич І.А.

### Перетворення Лоренца для багат шарового покриття.

Теоретично розглянуто інтерференцію світла в багат шарових системах на основі перетворення Лоренца. Така інтерференція розраховується за допомогою матриць розсіяння розмірності  $2 \times 2$ . На відміну від випадку тонкої плівки ці матриці не можна вважати підгрупою перетворення Лоренца. Доведено, що інтерференція в багат шаровій системі описується за допомогою повного перетворення Лоренца, якому відповідають матриці розмірності  $4 \times 4$  у просторі Мінковського. Знайдено базис цього простору а також інваріанти перетворення для багат шарової системи та тонкої плівки. Проведені обчислення які дозволили проаналізувати траєкторію 100% відбиваючого дзеркала у фазовому просторі.

Ключові слова: група перетворення Лоренца, багат шарова тонкоплівочна система, інтерференція, простір Мінковського

\*E-mail: sgr@univ.kiev.ua

Практична задача побудови розв'язків інтерференції світла в тонких плівках була детально досліджена і розв'язана в середині минулого століття[1,2]. Формалізм матриць розсіяння дозволяє отримати чисельний розв'язок оптичних констант тонкоплівочного покриття без великих труднощів, особливо, беручи до уваги доступність сучасних обчислювальних засобів. Обернена задача знаходження параметрів тонкої плівки по оптичним характеристикам була зведена до добре відомих алгоритмів теорії дослідження операцій, що дало можливість отримати синтезовані покриття які були необхідні для вирішення суто практичних задач (вузькополосні фільтри, дихроїчні просвітлюючі та дзеркальні покриття)[3,4].

Зв'язок групи тонких плівок з групою симетрії Лоренца був також відмічений, що дозволило виявити деякі базові закономірності групи тонких плівок[2]. Водночас, в останні роки увага дослідників концентрувалась довкола практичних аспектів розрахунку інтерференції в багат шарових покриттях. Задача даної роботи

K.P.Rozouvan, S.G. Rozouvan\*, I.A. Shaykevich

### Lorents transformation for multilayer thin film coating.

Interference in a multilayer thin film system has been considered theoretically as a Lorentz transformation. The interference is described by  $2 \times 2$  dimensional scattering matrices. Unlike in the case of a single layer, the matrices can not be described as a subgroup of Lorentz transformation. The interference in a multilayer thin film system was proven to be described as a general Lorentz transformation in Minkowsky space. The transformation is described by  $4 \times 4$  dimensional matrices. The basis vector for this space and transformation invariants for multilayer system and a thin film were found. The trajectory of a 100% reflected mirror in a phase space was analyzed by numerical simulation.

Key words: Lorentz transformation group, thin films systems, interference, Minkowsky space.

вперше дослідити інтерференцію в багат шаровому покритті з точки зору групи перетворення Лоренца. Даний підхід являє собою логічне продовження нашої попередньої роботи [5]

Матриця  $a$  розсіяння або інтерференції для однієї тонкої плівки розмірності  $2 \times 2$  зв'язує вектори електричної та магнітної напруженості світла біля двох обмежуючих плівку границь має вигляд:

$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_N \\ \tilde{H}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \tilde{E}_1 \\ \tilde{H}_1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Знак  $*$  над векторами позначає тангенціальну складову відповідного вектора по відношенню до площин границь шару. Можна показати (див наприклад [5]), що співвідношення (1) можна інтерпретувати, як часткове перетворення Лоренца на площині з відомими,



наприклад зі спеціальної теорії відносності співвідношеннями для коефіцієнтів в (1):  
 $a_{11} = a_{22} = (1 - (V/c)^2)^{-1}$ ,  $a_{21} = -V(1 - (V/c)^2)^{-1}$ ,  
 $a_{12} = -V(1 - (V/c)^2)^{-1} c^{-2}$

Величини  $V$  та  $c$  для плівки, які відповідають швидкості системи та швидкості світла виражаються через параметри плівки. У випадку багатьох інтерференційних плівок ми маємо якісно відмінну ситуацію. Швидкість  $c$ , яка

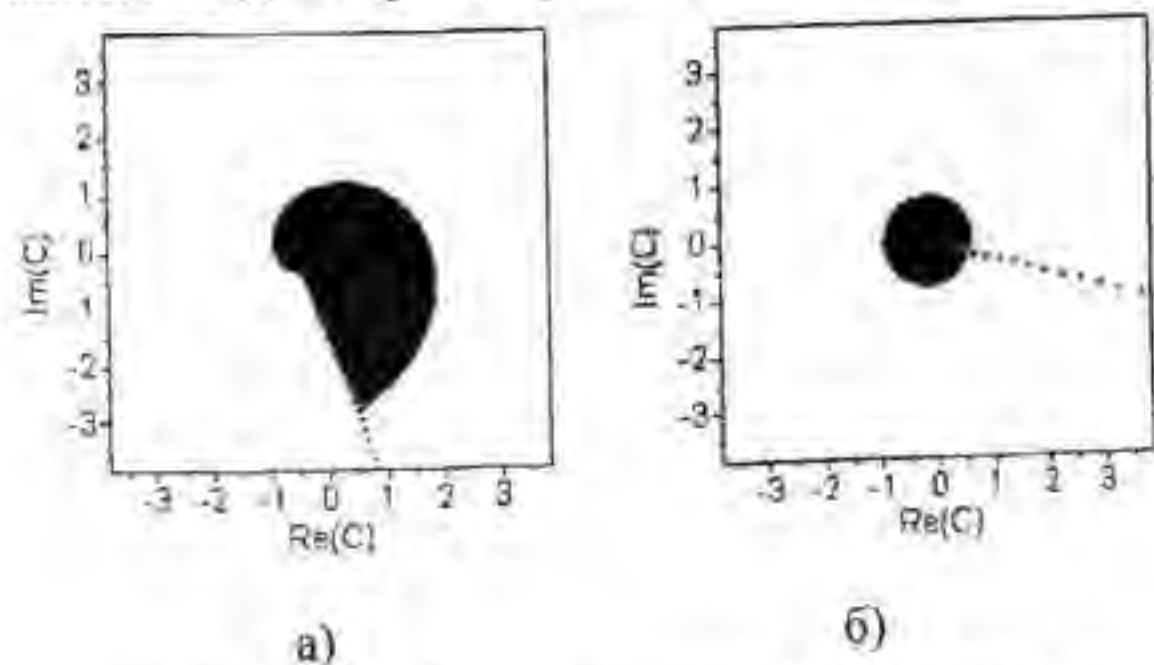


Рис.1 Множина  $L$  для діелектричного дзеркала.  
 $\lambda = 1900$  нм 17 шарів з показниками заломлення які чергуються:  $n_h = 2.0$   $n_l = 1.45$ . Показник заломлення підложки  $n_{sub} = 2.1$ . Кути падіння світла на систему дорівнюють:  
 а)  $\alpha = 47^\circ$ , б)  $\alpha = 48.7^\circ$ .

задається перетворенням тонких непоглинаючих плівок- дійсна величина. В той же час, при перетворенні Лоренца для тонкої плівки швидкість руху системи  $V$  (тобто комплексна величина їй аналогічна), яка зв'язана з набігом фази в плівці, являє собою уявну величину. Уявність швидкості не має аналогів в класичній механіці, хоча в контексті інтерференції тонких плівок ситуація очевидна- ми описуємо періодичні розв'язки хвильового рівняння, які записуються у комплексному вигляді.

Розгляд розповсюдження електромагнітних хвиль в багатошаровій системі добре досліджений. Спочатку доводиться, що в багатошаровій системі розповсюджуються пряма та обернена електромагнітні хвилі по відношенню до площин, що обмежують тонкі плівки. Кожній, окремо взятій тонкій плівці, відповідає матриця розсіювання, яка зв'язує вектори на площині в координатах тангенціальних складових електричних векторів прямої та оберненої хвилі:

$$\begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Delta) & \frac{i^* \sin(\Delta)}{U} \\ i^* \sin(\Delta) * U & \cos(\Delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{E}' \\ \tilde{H}' \end{pmatrix} \quad (2)$$

Коефіцієнти  $U$  визначаються як  $n/\cos(\theta)$  для  $p$ - поляризації та  $n^* \cos(\theta)$  для  $s$ -поляризації. Кути  $\theta$  це кути заломлення у цьому шарі, а  $\Delta$ - це фазовий набіг, який визначається через коефіцієнт заломлення  $n$  та товщину плівки  $d$ , як  $2\pi n d \cos(\theta) / \lambda$ . Порівнюючи вирази (1)-(2) можна знайти, що  $c$  дорівнює  $1/U$ , а  $V = U^{-1} (1 - 1/(\cos \Delta)^2)^{0.5}$ . При цьому, величини тангенціальних складових цих хвиль зв'язані з тангенціальними складовими сумарного електричного та магнітного полів через досить прозорі співвідношення:

$$\begin{aligned} \tilde{E}^+ &= (\tilde{E} + \tilde{H}/U) * 0.5 \\ \tilde{E}^- &= (\tilde{E} - \tilde{H}/U) * 0.5 \end{aligned} \quad (3)$$

Верхні індекси „+” та „-” позначають пряму та обернену електромагнітні хвилі, що розповсюджуються в системі. Співвідношення (3) легко можуть бути записані у матричному вигляді. Матриця багатошарової системи

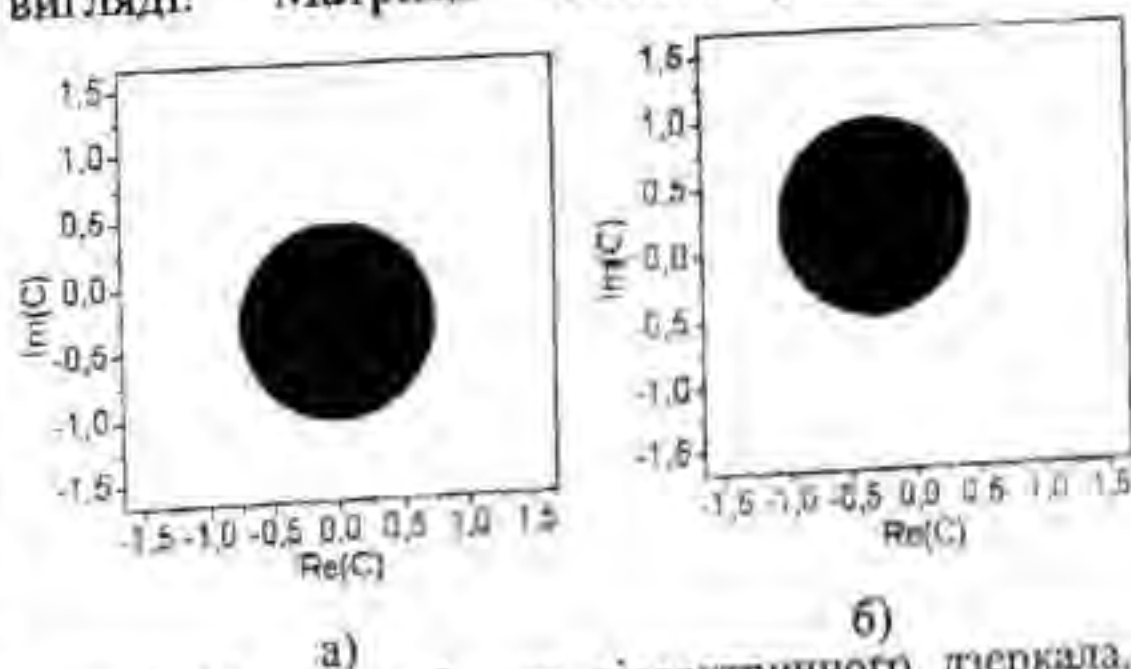


Рис.2 Множина  $L$  для діелектричного дзеркала, випадок нормального падіння світла. а)  $\lambda = 3300$  нм, б)  $\lambda = 4000$  нм.

визначається, як добуток матриць, які відповідають складовим шарам. В результаті, рівняння для системи тонких плівок може бути записане з урахуванням співвідношень (1)-(3):



$$\begin{pmatrix} \tilde{E}_0^+ \\ \tilde{E}_0^- \end{pmatrix} = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & 1/U_0 \\ 1 & -1/U_0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \prod_{i=1}^N \cos(\Delta_i) & \frac{i * \sin(\Delta_i)}{U_i} \\ i * \sin(\Delta_i) * U_i & \cos(\Delta_i) \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ U_{N+1} & -U_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{E}_{N+1}^+ \\ \tilde{E}_{N+1}^- \end{pmatrix} \quad (4)$$

Спробуємо довести що співвідношення (4) це загальне перетворення Лоренца [6], що являє собою таке перетворення простору при якому вираз  $x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2$  залишається інваріантом:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ t' \end{pmatrix} \quad (5)$$

Таким чином, з цього випливає, що перетворення (а) з рівняння (1) має являти собою підгрупу загального перетворення Лоренца (А) з рівняння (3). З означення часткового перетворення Лоренца, співвідношення (1) залишає величину  $\tilde{H}^2 - U^2 \tilde{E}^2$  незмінною. У загальному випадку співвідношення (5) можна розглядати з точки зору геометрії в псевдоевклідовому чотирьохвимірному просторі з метрикою яка задається співвідношенням:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} x_7 \\ x_8 \\ x_9 \\ x_{10} \end{pmatrix}^2 - \begin{pmatrix} x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix}^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 \quad (6)$$

Геометрія такого простору Мінковського достатньо добре вивчена, оскільки формалізм спеціальної теорії відносності побудований у такому ж чотирьохвимірному просторі. Співвідношення (6) при цьому трактується як часово-просторовий інтервал, який має зберігатися. Як відомо, конус у просторі Мінковського розбиває простір на дві області. Вектор з початком у системі координат, (перетворення Лоренца не змінює початок координат) кінець якого лежить на конусі, має

нульову довжину. По обидва боки від поверхні конуса вектори мають додатню і від'ємну довжину. У спеціальній теорії відносності фізична інтерпретація конуса або світлового

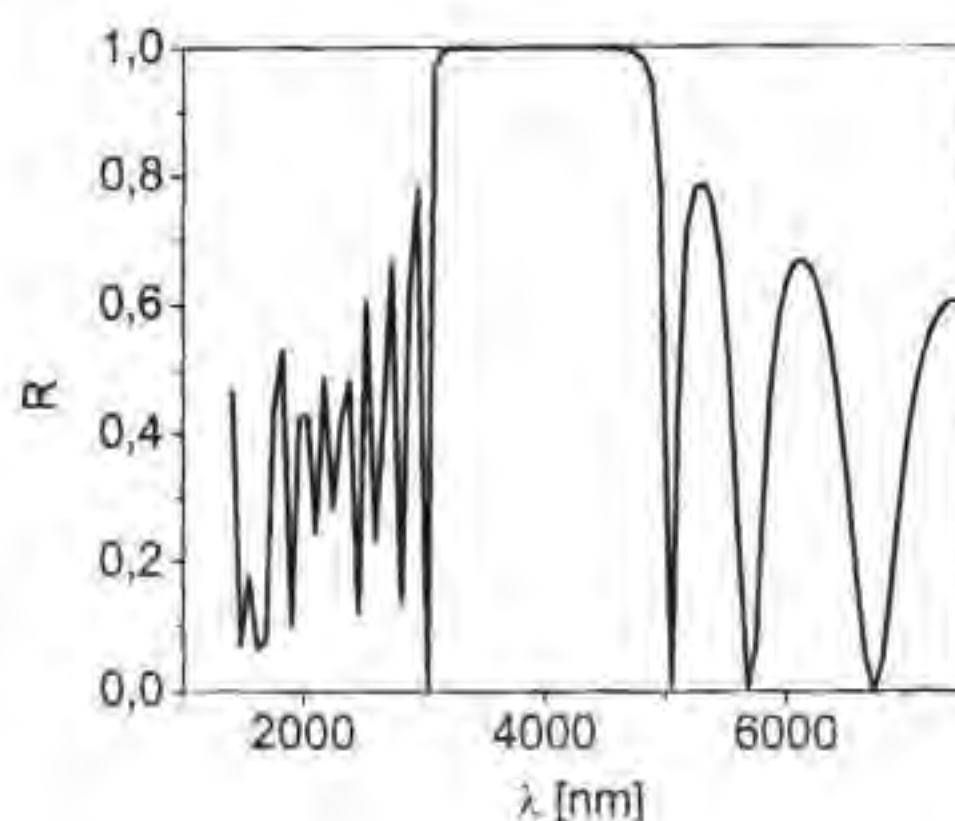


Рис.3 Спектральна залежність коефіцієнта відбиття для діелектричного дзеркала з параметрами рис.1. Випадок нормального падіння.

конуса пов'язана з постулатом про швидкість світла в природі, яка є найбільш можливою в природі. В псевдоевклідовому просторі де описується інтерференція в тонких плівках конус- це геометричне місце точок, де  $\tilde{H}_0 = n \tilde{E}_0$ . Як легко пересвідчитись, це відповідає випадку нульової інтенсивності відбитого світла. Тобто, на поверхні конуса інтерференція в багатошаровому покритті відбувається таким чином, що покриття функціонує як просвітлююче, воно зовсім не відбиває світло. Оскільки у випадку тонкої плівки ми маємо уявну швидкість руху, траєкторія руху системи ніколи не перетинає поверхні конуса, а знаходиться завжди в області простору де  $x_4 < 0$ . Але в будь-якому випадку, при розповсюдженні хвилі в тонкому шарі залишається незмінним інваріант:

$$\tilde{E}^2 - \tilde{H}^2 / \tilde{U}^2 = const \quad (7)$$

З геометричної точки зору, співвідношення (7) означає що в координатах  $E^2(H^2)$  розповсюдження електромагнітної хвилі в багатошаровій тонкоплівочній системі відповідає ламана лінія. Кожний відрізок ламаної- описує плівку з постійним показником заломлення, який через співвідношення (7) пов'язаний з кутом нахилу цього відрізка



ламаной. У випадку загального перетворення Лоренца інваріант у співвідношенні (6) має залишатись незмінним. Розглянемо цей момент більш детально. За визначенням [7], інваріант це квадратична форма виду  $g_\alpha e_\alpha \otimes e_\alpha$ , де  $g_\alpha$  - це у нашому випадку метрика простору Мінковського  $(1, -1, -1, -1)$ , а  $e_\alpha$  базисні вектори. Класичний приклад інваріанту це

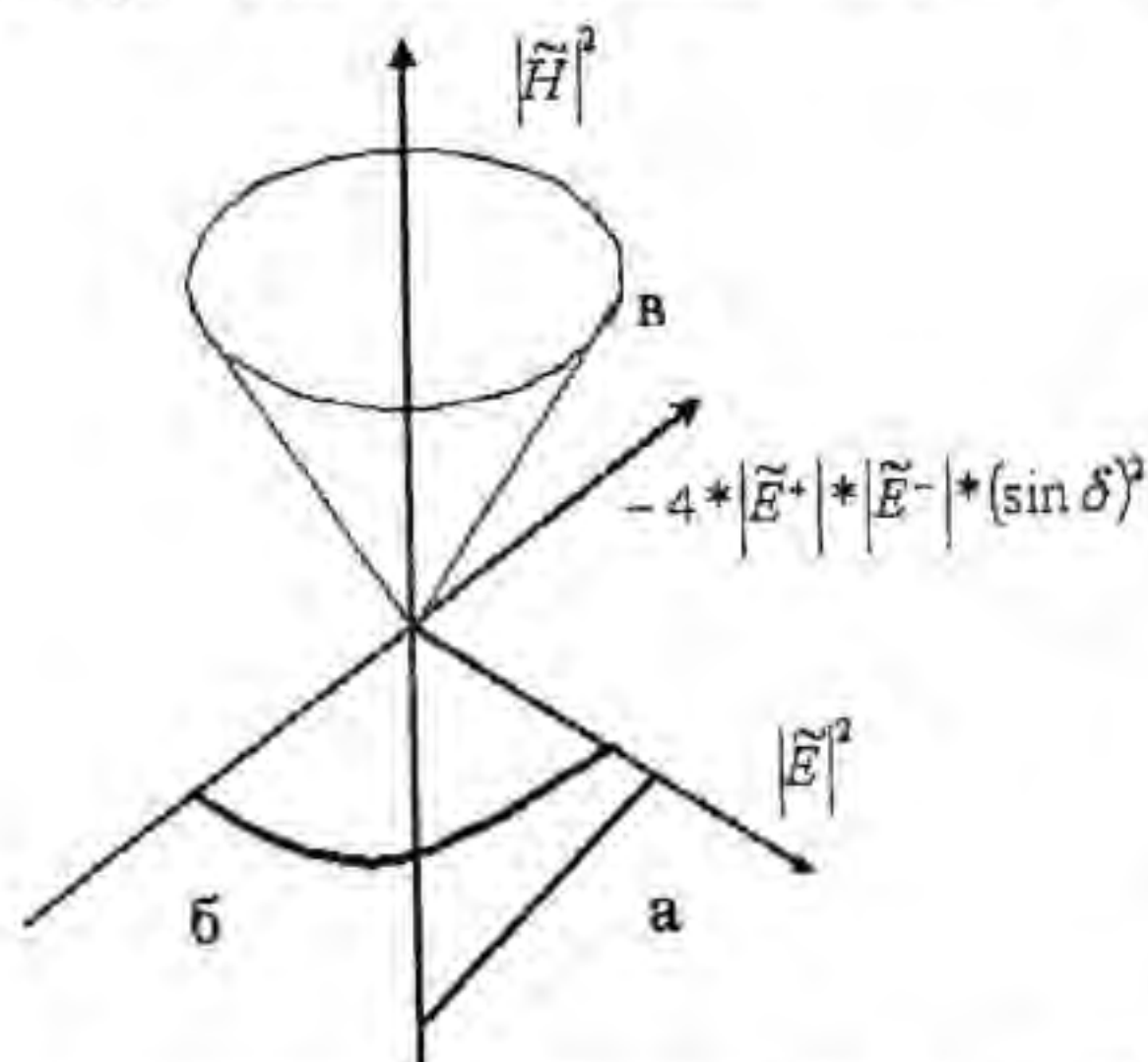


Рис.4 Схематичне зображення фазових траєкторій у координатах

$\{-4*|\tilde{E}^+|*|\tilde{E}^-|*(\sin \delta)^2, |\tilde{E}|^2, |\tilde{H}|^2\}$  які

відповідають перетворенню Лоренца для а) непоглинаючої однорідної плівки; б) багат шарової системи; в) конус (рівняння

$|\tilde{H}|^2 = U^2 * (|\tilde{E}|^2 + 4*|\tilde{E}^+|*|\tilde{E}^-|)$ ) на якому

знаходяться кінці векторів нульової довжини з початком у точці  $(0,0,0)$ .

вектор Стокса для описання поляризованого світла у загальному вигляді. При розгляді загального перетворення Лоренца дослідники будували формалізм спірного представлення матриці загального перетворення Лоренца [2]. При такому підході загальна матриця  $(4 \times 4)$  конструюється у вигляді чотирьох матриць розмірності  $(2 \times 2)$ , а базис має вигляд квадратичних або білінійних по відношенню до  $E_i$  форм [8]. Спробуємо побудувати вектор, який би задовольняв співвідношення (5).

Підставляючи (3) у (7), можна знайти, що  $const$  у співвідношенні (7) дорівнює  $4\tilde{E}^+ \tilde{E}^-$ . Враховуючи це співвідношення, (5) може бути представлено у вигляді:

$$\begin{pmatrix} 2\sqrt{E^+ E^-} \sin \delta * i \\ 2\sqrt{E^+ E^-} \cos \delta * i \\ \tilde{E} \\ \tilde{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 2\sqrt{E'^+ E'^-} \sin \delta' * i \\ 2\sqrt{E'^+ E'^-} \cos \delta' * i \\ \tilde{E}' \\ \tilde{H}' \end{pmatrix} \quad (8)$$

Як можна пересвідчитися прямою підстановкою величина інваріанту векторів з рівняння (8)  $((x_1)^2 + (x_2)^2 + (x_3)^2 - (x_4)^2)$  завжди дорівнює нулеві як і у випадку вектора Стокса і таким чином, перетворення  $A$  в (8) - це загальне перетворення Лоренца. Величина  $\delta$  із співвідношення (10) це сума фаз хвиль  $\tilde{E}^+$  і  $\tilde{E}^-$ . Для тонкої плівки ця величина залишається незмінною. Базисні координати можуть бути переписані трохи в іншому вигляді. Наприклад для спрощеного варіанту однієї тонкої плівки співвідношення (8) може бути представлено у вигляді:

$$\begin{pmatrix} \text{Im}(\tilde{E}^2 - \tilde{H}^2 / U^2) * i \\ \text{Re}(\tilde{E}^2 - \tilde{H}^2 / U^2) * i \\ \tilde{E} \\ \tilde{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\Delta) & i * \sin(\Delta) / U \\ 0 & 0 & i * \sin(\Delta) * U & \cos(\Delta) \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \text{Im}(\tilde{E}'^2 - \tilde{H}'^2 / U^2) * i \\ \text{Re}(\tilde{E}'^2 - \tilde{H}'^2 / U^2) * i \\ \tilde{E}' \\ \tilde{H}' \end{pmatrix} \quad (9)$$

Конкретні розрахунки фазових траєкторій у чотирьохвимірному просторі з комплексними координатами виявились досить складними для представлення і аналізу. На даному етапі наших досліджень нами були розроблені чисельні методики обчислень, які дозволяють якісно охарактеризувати поведінку функцій



інтерференції багат шарової системи у фазовому просторі. Нами аналізувалась комплексна функція  $a$  на комплексній площині  $C$  з використанням стандартних математичних процедур. Для цього будувалась система рекурентних співвідношень:

$$C_{n+1} = (a_{11} / a_{21}) C_n + C_0 \quad (10)$$

де  $n$  приймає значення  $0, 1, 2, \dots, n, n+1, \dots$  і прямує до нескінченності. Для аналізу властивостей групи тонких плівок побудуємо множину  $L$  точок  $C_0$  на комплексній площині для яких послідовність (10) обмежена по модулю довільним числом. Підхід побудови послідовностей типу (10) добре розроблений в теорії фракталів особливо при побудові фракталу Мандельброта [9,10]. Якщо ми маємо складну функцію  $a$  визначену на комплексній площині (або у нашому випадку в комплексному просторі) і функція непередставима у аналітичному вигляді, фрактальні множини або множина точок  $L$  дозволяє охарактеризувати якісну поведінку комплексної функції, наприклад, з точки зору знаходження її особливих точок. Також можна пересвідчитись [11], що симетрія множини  $L$  являється функцією симетрії перетворення  $a$ . Для доведення цього досить застосувати одну й ту ж операцію симетрії до правої та лівої частин рівняння (10). Приклади розрахунку  $L$  для інтерференційного дзеркала зображені на рис.1 та рис.2. Дзеркало має максимальне відбиття при нормальному падінні світла в оптичному діапазоні 4000нм (рис.3). Множина  $L$  для сукупності тонких плівок з низьким коефіцієнтом відбиття являє собою несиметричну і необмежену фігуру. Невелика зміна кута падіння (рис.1) або довжини хвилі приводить до переорієнтації  $L$  на комплексній площині. Полишаючи строге доведення твердження чи являються множини точок на рис.1 особливими точками перетворення  $a$  за межами нашого розгляду, сам факт їх існування означає, що  $L$  структура для цього випадку відображає проекцію фазової траєкторії на площину. Випадок високого коефіцієнта відбиття характеризується якісно іншою поведінкою системи. В цьому випадку  $L$  являє собою колоподібну структуру. Фазова траєкторія відповідного перетворення  $a$  локалізована в іншій площині. При невеликій зміні кута падіння, або довжини хвилі (рис.2) відбувається поступальний рух кола по комплексній площині.

Таку поведінку фазових траєкторій можна зрозуміти на якісному фізичному рівні. У випадку 100% відбиття світла багат шаровою системою,  $\tilde{H}$  в рівнянні (8) в точці  $Z=0$  дорівнює нулеві. При цьому загальне перетворення Лоренца можна представити у вигляді лінійної комбінації перетворень ( $A'$ ) та ( $A''$ ):

$$A' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a'_{11} & a'_{12} & 0 \\ 0 & a'_{21} & a'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$A'' = \begin{pmatrix} a''_{11} & 0 & a''_{12} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ a''_{21} & 0 & a''_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

На рис. 4 схематично зображені траєкторії у фазовому трьохвимірному просторі, які відповідають загальному перетворенню Лоренца для випадків тонкої плівки та інтерференційного дзеркала у спектральній області його максимального коефіцієнта відбиття. Відмінність між фазовою траєкторією для тонкої плівки та фазовою траєкторією у випадку дзеркала з високим коефіцієнтом відбиття в тому, що вони локалізовані в різних площинах.

Таким чином, ми показали, що інтерференція в багат шаровій системі описується за допомогою загального перетворення Лоренца. Також вперше був побудований базис загального перетворення Лоренца для інтерференції світла в багат шаровій системі і, як наслідок, знайдено новий інваріант для електромагнітної хвилі, що розповсюджується в цій системі. Інваріант не являє собою вектор Стокса, який використовується для описання поляризованого світла. Матриці розсіяння для описання інтерференції в тонкому шарі являють собою підгрупу цього загального перетворення або часткове перетворення Лоренца. Для розгляду часткового перетворення Лоренца в роботі були побудовані  $L$  множини. Конкретний вид цих множин дозволяє характеризувати хід фазових траєкторій у фазовому просторі. Підхід продемонстрований в даній роботі дозволяє формулювати обернені спектральні та еліпсометричні задачі в аналітичному вигляді.



### Література.

1. Розенберг Г.В. Оптика тонкослойных покрытий. - М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1958.
2. Кард П.Г. Анализ и синтез многослойных интерференционных пленок. - Таллинн: Издательство "Валгус", 1971.
3. Крылова Т.Н. Интерференционные покрытия. - Л.: Машиностроение, 1973.
4. Фурман Ш.А. Тонкослойные оптические покрытия. - Л.: Машиностроение, 1977.
5. Поперенко Л.В., Розуван К.П., Розуван С.Г. Перетворення Лоренца для тонкої плівки // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат.- 2007. - вип. 4. - С.466-471.
6. Смирнов В.И. Курс высшей математики т.3, ч.1. - М: Наука, 1953.
7. Ефимов Н.В. Высшая геометрия - М: Наука, 1984.
8. Розенберг Г.В. Вектор-параметр Стокса. // Успехи физических наук. -1955. - т.56, вып.1. - С. 77-110.
9. Mandelbrot B.B. The fractal geometry of nature. - New York: W.H.Freeman & Co, 1983.
10. Branner B. Chaos and fractals: the mathematics behind the computer graphics. - New York: American Mathematical Society, 1989.
11. Rozouvan V.S. Symmetry of the modified Mandelbrot set // Pi in the sky. - 2005. - v.9. - pp.20-21.

Надійшла до редколегії 21.02.2007



УДК 535.343.2, 372

Сакун В.П., канд. ф.-м. наук.,  
Стукаленко В.В., канд. ф.-м. наук.,  
Гайдідей Г.І., канд. ф.-м. наук.

### Симетрія оптичних центрів $\text{NO}_2^-$ та $\text{NO}_3^-$ в водних розчинах електролітів

Розглянуто вплив локального оточення на спектроскопічні властивості і симетрію домішкового аніона  $\text{NO}_2^-$  і  $\text{NO}_3^-$  в водних розчинах електролітів.

Ключові слова: симетрія, частота, коливання, інтенсивність, поглинання, аніон, водний розчин

E-mail: stu@univ.kiev.ua

Sakun V. P., cand.ph.-m.nauk.,  
Stukalenko V. V., cand.ph.-m.nauk.,  
Gaididey G. I., cand.ph.-m.nauk.

### Symmetry of $\text{NO}_2^-$ and $\text{NO}_3^-$ optical centres in aqueous electrolyte solutions

The local surroundings influence on the spectroscopic properties and symmetry of the  $\text{NO}_2^-$  and  $\text{NO}_3^-$  in aqueous electrolyte solutions have been considered.

Key Words: symmetry, frequency, vibration, intensity, absorption, anion, aqueous solution

Дослідження структури водних розчинів електролітів рентгено- та нейтронографічними методами дозволяє вивчати взаємодію домішкових іонів з розчинником і між собою, а також отримувати інформацію про особливості сольватації іонів [1]. Вплив сольватації (у водному розчині-гідратації) на конформацію (внутрішню будову) молекули позначається на її оптичних властивостях. В роботі розглянуто результати експериментального дослідження впливу локального оточення домішкових молекулярних аніонів  $\text{NO}_2^-$  та  $\text{NO}_3^-$  на їх оптичні властивості і точкову симетрію. Співставлено поведінку смуг внутрішньо-молекулярних коливань аніона  $\text{NO}_3^-$  в спектрі комбінаційного розсіювання (КР) світла та смуг електронного поглинання  $^1A_1 \rightarrow ^1B_1$  ( $S_0 \rightarrow S_1$ ) і  $^1A_1 \rightarrow ^1A_2$  ( $S_0 \rightarrow S_2$ ) аніона  $\text{NO}_2^-$  в водних розчинах  $\text{MNO}_2$  і  $\text{M}(\text{NO}_3)_n$  ( $n = 1, 2$ ;  $\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Cs}, \text{NH}_4, \text{Ca}, \text{Cd}$ ). Вимірювання спектрів КР проводилися на спектрометрі ДФС-24. Спектри КР збуджувалися Ar-лазером ( $\lambda_{\text{ex}} = 488 \text{ нм.}$ ). Вимірювання спектрів електронного поглинання проведено на спектрофотометрі Specord UV-VIS. Дослідження проводилися при температурі  $T = 300 \text{ К.}$

У вільному стані плоскі молекули  $\text{NO}_2^-$  та  $\text{NO}_3^-$  характеризуються точковою симетрією  $C_{2v}$  і  $D_{3h}$  відповідно (в основному електронному стані). В конденсованій фазі взаємодія обох аніонів з локальним оточенням в значній мірі є схожою, що зумовлено близькістю їх конформаційних характеристик. Так, в аніоні  $\text{NO}_2^-$  рівноважна довжина зв'язку  $\text{N}-\text{O}$   $r_{\text{NO}} = 1.24 \text{ \AA}$  [2], а в аніоні  $\text{NO}_3^-$   $r_{\text{NO}} = 1.243 \text{ \AA}$  [3]. Розподіл електричного заряду в таких аніонах в значній мірі також є

подібним. Позитивний заряд локалізований на атомі азоту, а від'ємний заряд делокалізований на атомах кисню [4].

Перехід молекули з вільного стану в конденсоване середовище може супроводжуватися зміною її конформації (внутрішньої геометричної будови) та енергетичного спектру. В лужно-галоїдному кристалі найбільш вірогідною вважається вбудовування аніона  $\text{NO}_2^-$  чи  $\text{NO}_3^-$  у вузол аніонної підрешітки. При цьому, локальна симетрія домішкового аніону залишається не нижче його точкової симетрії у вільному стані. Так, відсутність розщеплення смуг двічі вироджених внутрішньо-молекулярних коливань  $\nu_3$  ( $E'$ ) та  $\nu_4$  ( $E'$ ) домішкового аніона  $\text{NO}_3^-$  в спектрі інфрачервоного (ІЧ) поглинання в кристалах  $\text{KCl}$  і  $\text{KBr}$  [5, 6] дозволяє припустити, що точкова симетрія домішкового аніона залишається такою ж (або близькою до неї), як у вільному стані –  $D_{3h}$ .

У водному розчині електроліту взаємодія аніона ( $A^-$ ) з оточенням в значній мірі зумовлена водневими зв'язками з молекулами розчинника та іон-іонною взаємодією з катіоном  $M^{n+}$ . З останнім аніони утворюють сольватно-розділені або контактні іон-парні комплекси  $M^{n+}-(A^-)_n$ , а також їх асоціати. Локальна симетрія аніона в такому розчині буде нижчою ніж у лужно-галоїдному кристалі. Останнє підтверджується експериментально встановленим фактом розщеплення смуг  $\nu_3$  і  $\nu_4$  в спектрі КР розчинів  $\text{M}(\text{NO}_3)_n$  (табл.1). Крім того, в спектрі КР водних розчинів нітратів лужних металів спостерігається смуга коливання  $\nu_2$  ( $A_2$ ) [7], яка у випадку симетрії  $MA$   $D_{3h}$  є активною тільки в спектрі ІЧ



Таблиця 1

Частота  $\nu_i$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) аніона  $\text{NO}_3^-$  в спектрі КР, середня відстань  $r_{\text{cs}}$  ( $\text{\AA}$ ) і енергія  $\Delta E_a$  ( $\text{ккал}\cdot\text{моль}^{-1}$ ) в водних розчинах електролітів при  $T = 300\text{ K}$

| Розчин                     | $r_{\text{cs}}$<br>[1, 9*] | $\Delta E_a$<br>[1] | $C_0$ | $\nu_1$ | $\nu_3$      | $\nu_4$    |
|----------------------------|----------------------------|---------------------|-------|---------|--------------|------------|
| $\text{LiNO}_3$            |                            | +0.56               | 1     | 1058    | 1428<br>1359 | 727        |
|                            |                            |                     | 9     | 1059    | 1441<br>1363 | 728        |
| $\text{NaNO}_3$            | 2.9                        | +0.14               | 1     | 1061    | 1419<br>1360 | 729        |
|                            |                            |                     | 9     | 1064    | 1425<br>1373 | 732        |
| $\text{KNO}_3$             | 3.1                        | -0.36               | 1     | 1060    | 1420<br>1365 | 727        |
|                            |                            |                     | 3     | 1061    | 1420<br>1365 | 729        |
| $\text{NH}_4\text{NO}_3$   |                            |                     | 5     | 1059    | 1418<br>1347 | 728        |
|                            |                            |                     | 15    | 1059    | 1409<br>1340 | 729        |
| $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ | 3.12*                      | +0.28               | 7     | 1060    | 1363<br>1426 | 727<br>748 |
| $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ | 2.8*                       |                     | 1     | 1060    | 1427<br>1344 | 727        |
|                            |                            |                     | 6     | 1059    | 1344<br>1448 | 728<br>750 |

поглинання. При концентрації нітратної солі  $C_0 = 1$  моль/л величина розщеплення  $\Delta\nu_3$  закономірно зростає зі збільшенням поверхневої густини заряду катіона  $M^{n+}$  ( $n = 1, 2$ ) відповідної іонної пари  $M^{n+}-(\text{NO}_3^-)_n$  в послідовності  $\text{K}^+$  ( $\Delta\nu_3 = 55\text{ cm}^{-1}$ )  $\rightarrow \text{Na}^+$  ( $59\text{ cm}^{-1}$ )  $\rightarrow \text{Li}^+$  ( $69\text{ cm}^{-1}$ ), а також  $\text{Ca}^{2+}$  ( $\Delta\nu_3 = 60\text{ cm}^{-1}$ )  $\rightarrow \text{Cd}^{2+}$  ( $83\text{ cm}^{-1}$ ). Таку тенденцію слід пов'язувати з пониженням точкової симетрії аніона. У вказаній послідовності  $M^{n+}$  спостерігається також високочастотний зсув смуг внутрішньо-молекулярних коливань (чи центру тяжіння дублетів смуг коливань  $\nu_3$  і  $\nu_4$ ). В водних розчинах  $\text{MNO}_3$  має місце подібна залежність частот внутрішньо-молекулярних коливань аніона  $\text{NO}_3^-$  від типу катіона  $M^+$  (табл.2), яка відповідає закономірному зменшенню ефективного розміру цього аніона [8]. Збільшення розглянутих частот внутрішньо-

молекулярних коливань корелює зі збільшенням густини пакування молекул води в гідратному оточенні іонної пари. Дійсно, зростання поверхневої густини заряду катіона (у вказаних вище послідовностях) відповідає зменшенню середньої відстані  $r_{\text{cs}}$  між молекулами розчинника, що оточують його, при збільшенні енергії  $\Delta E_a$  активації виходу молекул води з гідратної оболонки катіона [1]. Результати концентраційних вимірювань показали, що зближення аніона  $\text{NO}_3^-$  з катіоном  $M^{n+}$  який характеризується високою поляризаційною здатністю і визначається як позитивно гідратований іон (коли його радіус  $r_m$  є меншим ніж радіус вільної молекули води  $r_{\text{H}_2\text{O}} = 1.4\text{ \AA}$ ) таким, як  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  чи  $\text{Cd}^{2+}$  (при збільшенні  $C_0$ ) також супроводжується зростанням величини розщеплення  $\Delta\nu_3$ . В розчинах  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$  та



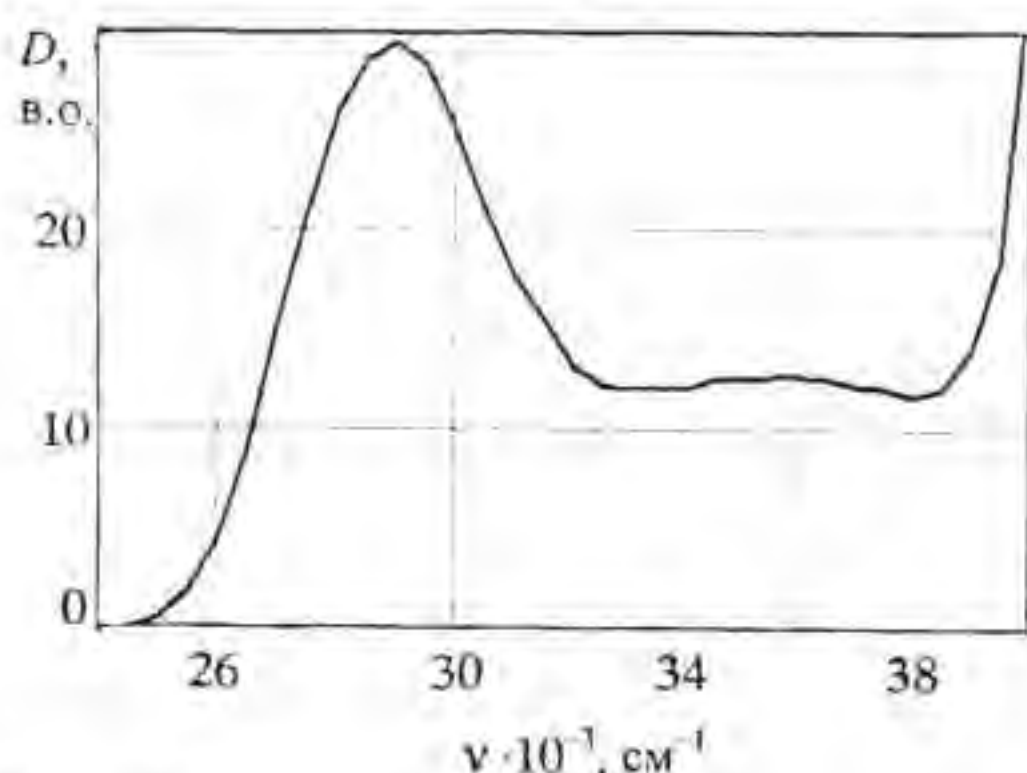


Рис. 1 Спектр поглинання домішкових аніонів  $\text{NO}_2^-$  у водному розчині  $\text{LiNO}_2$  при  $T = 300 \text{ K}$ .

$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$  ( $C_0 > 3$  моль/л) спостерігається розщеплення коливання  $\nu_4(\text{E}')$ . Найбільш значне розщеплення ( $\Delta\nu_3 = 109 \text{ cm}^{-1}$  і  $\Delta\nu_4 = 22 \text{ cm}^{-1}$ ) спостерігається у концентрованому розчині  $\text{Cd}(\text{NO}_2)_2$ . У розчині  $\text{KNO}_3$  величина  $\Delta\nu_3$  практично не залежить від  $C_0$  (в границях похибки вимірювань, яка не перевищувала  $\pm 2 \text{ cm}^{-1}$ ), а збільшення  $C_0$  у розчинах  $\text{NaNO}_3$   $\text{NH}_4\text{NO}_3$

було проведено дослідження його спектру електронного поглинання. Основну увагу приділено поведінці інтегральної інтенсивності ( $J$ ) дипольно дозволеної смуги  $^1\text{A}_1 \rightarrow ^1\text{B}_1$  (А) і забороненої по симетрії смуги  $^1\text{A}_1 \rightarrow ^1\text{A}_2$  (В). Таке дослідження проведено вперше. Смуга В розташована в ділянці спектру  $\Delta\nu = 32000 - 38000 \text{ cm}^{-1}$  (рис.1) і значно перекривається зі смугою А (з боку низьких частот) і смугою  $^1\text{A}_1 \rightarrow ^1\text{B}_2$  (С, з боку високих частот). Було проведено розділення контурів трьох вказаних смуг електронного поглинання. Допускалося, що спектральна залежність інтенсивності високо-частотного крила смуги А і низькочастотного краю смуги С мають експоненційний характер. Дійсно, для смуги А така залежність спостерігається в спектральній ділянці  $\Delta\nu = 30000 - 31800 \text{ cm}^{-1}$ , де внесок смуги В у сумарний спектр повинен бути незначним (рис.1). У вказаній ділянці спектру оптична густина смуги А зменшується в межах  $(0,9 - 0,6) D_{\text{max}}$ , де  $D_{\text{max}}$  є відповідне максимальне її значення. Довгохвильовий край смуги С в ділянці  $\Delta\nu = 39000 - 41000 \text{ cm}^{-1}$  також задовільно

Таблиця 2

Частота  $\nu_i$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) внутрішньо-молекулярного коливання в спектрі КР [8], положення максимуму  $\nu_{\text{max}}$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) і коефіцієнт екстинкції  $k_{\text{max}}$  ( $\text{л} \cdot (\text{моль} \cdot \text{см})^{-1}$ ) у максимумі смуги електронного поглинання аніона  $\text{NO}_2^-$  у водних розчинах  $\text{MNO}_2$  при  $300 \text{ K}$ . Концентрація  $C_0$  солі  $\text{MNO}_2$  дана в  $\text{моль} \cdot \text{л}^{-1}$ .  $T = 300 \text{ K}$

| Розчин          | $C_0$ | Перехід $\rightarrow$ |         |         | $^1\text{A}_1 \rightarrow ^1\text{B}_1$ |                  | $^1\text{A}_1 \rightarrow ^1\text{A}_2$ |                  |
|-----------------|-------|-----------------------|---------|---------|-----------------------------------------|------------------|-----------------------------------------|------------------|
|                 |       | $\nu_1$               | $\nu_2$ | $\nu_3$ | $\nu_{\text{max}}$                      | $k_{\text{max}}$ | $\nu_{\text{max}}$                      | $k_{\text{max}}$ |
| $\text{LiNO}_2$ | 9.4   | 1337                  | 825     | 1240    | 28900                                   | 25.8             | 36500                                   | 10.8             |
| $\text{NaNO}_2$ | 8.8   | 1332                  | 817     | 1240    | 28500                                   | 25.1             | 35500                                   | 10               |
| $\text{KNO}_2$  | 8     | 1327                  | 809     | 1239    | 28300                                   | 21               | 35000                                   | 6.7              |
| $\text{CsNO}_2$ | 10    | 1326                  | 807     | 1230    | 27900                                   | 20.8             | 34000                                   | 5.8              |

супроводжується деяким зменшенням величини  $\Delta\nu_3$ . Останнє можна пов'язувати з підвищенням локальної симетрії і власне точкової симетрії аніона в результаті посилення асоціації іон-парних комплексів (при зростанні  $C_0$ ). Вказаний ефект визначає посилення структурного впорядкування локального оточення домішкового аніона зі збільшенням радіусу катіона, оскільки при цьому зростає рухливість останнього (а також іон-парного комплексу) у розчині.

Відсутність вироджених коливань у аніона  $\text{NO}_2^-$  унеможливає використання методів коливальної спектроскопії для вивчення впливу середовища на його точкову симетрію. Тому

описується експоненційною залежністю. Оскільки порівнюються абсорбційні властивості аніона  $\text{NO}_2^-$  в різних матрицях, для смуг А і В було проведено спектральну корекцію, яка дозволяє урахувати вплив матриці на ефективне поле світлової хвилі. Розрахунки були виконані за формулою, що базується на моделі Лоренца. Скоректована інтегральна інтенсивність дорівнює

$$J = \theta \cdot \int k(\nu) \cdot \frac{d\nu}{\nu}, \text{ де } \theta = 9 n_D \cdot (n_D^2 + 2)^{-2}, n_D -$$

показник заломлення матриці при  $\lambda \sim 600 \text{ nm}$ ;  $\nu$  є частота в  $\text{cm}^{-1}$ . Значення  $n_D$  вимірювалися на рефрактометрі РПЛ-3. Дані табл.2 показують



кореляцію в поведінці смуг коливань  $\nu_i$  та електронного поглинання – спостерігається високочастотний зсув їхніх максимумів у вказаній вище послідовності  $M^+$ . При цьому, зростає інтенсивність смуг А і В – відповідне значення  $k_{\text{max}}$  (табл.2) і скоректованої за формулою (1) інтегральної інтенсивності  $J$  (рис.2). При концентрації  $C_0$  солі  $MNO_2$ , яка є близькою до насичення, відносна зміна  $J$  смуги А є малою ( $\delta J_A \sim 0.3$ ), зростання ж інтенсивності смуги В є досить значним ( $\delta J_B = 1.15$ ). Це показує, що в досліджуваних розчинах сила осцилятора переходу  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1B_1$  в аніоні  $NO_2^-$  є

впорядкування ближнього оточення молекулярного аніона і приводить до деякого підвищення його точкової симетрії. Кореляція між зростанням інтегральної інтенсивності електронно-коливальної смуги поглинання  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1A_2$  аніона  $NO_2^-$  та величини розщеплення вище вказаних коливальних смуг аніона  $NO_3^-$  підтверджує можливість зростання сили осцилятора електронного переходу  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1A_2$  внаслідок зниження точкової симетрії самого аніона. При цьому, визначено відносно малий вплив середовища на силу осцилятора переходу  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1B_1$ , що має інтерес для розгляду механізмів гасіння фотолумінесценції  ${}^1B_1 \rightarrow {}^1A_1$  у водних розчинах електролітів.

### Список використаних джерел

1. Адаменко І.І., Булавін Л.А. Фізика рідин та рідинних систем. К.: АСМІ, 2006. – 660 с.
2. Парсонідж Н., Стейвли Л. Беспорядок в кристаллах. М.: Мир, 1982. – Т.1. – 436 с.
3. Краснов К.С., Филиппенко Н.В., Бобкова В.А. и др. Молекулярные постоянные неорганических соединений. Л.: Химия, 1979. – 448 с.
4. Ravindran P., Delin A., Johansson B., Eriksson O., Wills J.M. Electron structure, chemical bonding, and optical properties of ferroelectric and antiferroelectric  $NaNO_2$  // Phys. Rev. B. – 1999. – 59, №3. – P. 1776 - 1785.
5. Бойко В.В., Кушніренко І.Я., Шинкаренко В.К., Щербаткий В.П. Структура низкотемпературних ИК-спектров поглинання кристаллов KCl и KBr с примесью анионов  $NO_2^-$  и  $NO_3^-$  // Журн. прикл. Спектроскопии. – 1987. – 46, №5. – С.755 -760.
6. Бойко В.В., Гайдидей Г.И., Кушніренко І.Я., Щербаткий В.П. Анггармонические взаимодействия в щелочно-галогенидных кристаллах с примесью молекулярных анионов различной симметрии // Вестник Киевского университета. Физика. – 1989. – № 30. – С. 27-35.
7. Володько Л.В., Ле Тхань Хоах. Колебательные спектры водных растворов нитратов // Журн. прикл. спектроскопии. – 1968. – 9, № 4. – С. 644-649.
8. Сакуи В.П. Коливальні частоти і конформація іона нітриту в конденсованих середовищах // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2005. – № 3. – С. 585-590.
9. Дорош А.К. Структура конденсированных систем. – Львов: Вища школа, 1981. – 176 с.

Надійшла до редколегії 15.12.2006

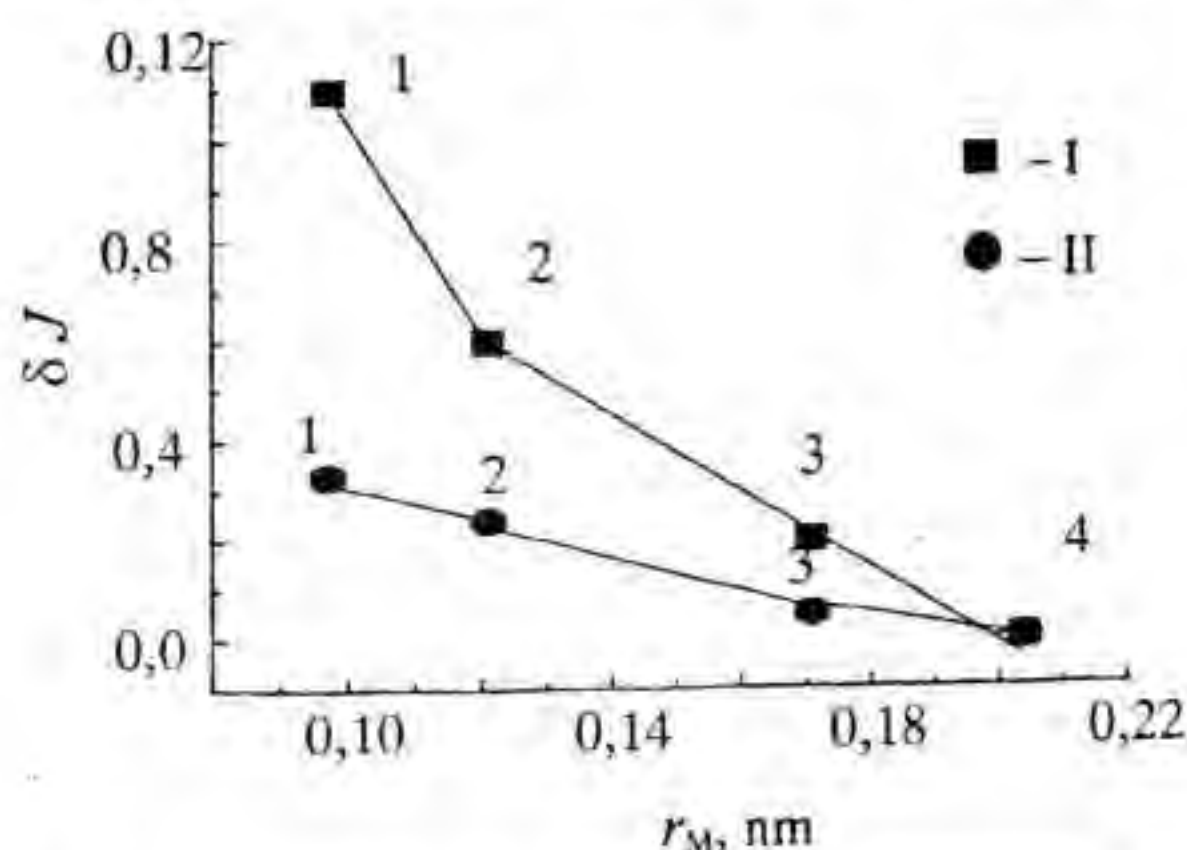


Рис.2. Залежність відносної зміни інтегральної інтенсивності  $\delta J$  смуги поглинання  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1A_2$  (I) і  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1B_1$  (II) аніона  $NO_2^-$  від радіуса  $r_M$  катіону  $M = Li(1, C_0 = 9.4 \text{ моль}\cdot\text{л}^{-1})$ ,  $Na(2, C_0 = 8.8)$ ,  $K(3, C_0 = 8)$ ,  $Cs(4, C_0 = 10)$  в водних розчинах  $MNO_2$  при  $T = 300 \text{ K}$ .

мало чутливою до зміни його локального оточення. Зростання параметру  $J_B$  можна пов'язувати зі збільшенням сили осцилятора переходу  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1A_2$  внаслідок зниження точкової симетрії аніону від  $C_{2v}$  до  $C_s$  або  $C_1$ .

Розглянуті дані експерименту показують якісну відповідність у поведінці оптичних характеристик домішкових аніонів  $NO_2^-$  та  $NO_3^-$ . Зростання густини пакування гідратного оточення домішкового аніона посилює збурення електронної оболонки та ядерного кістяка таких аніонів з боку ближнього оточення і визначає високочастотний зсув положення максимуму розглянутих оптичних смуг. Розщеплення смуг вироджених коливань аніона  $NO_3^-$  визначає особливості зміни симетрії локального оточення та його власної симетрії при зближенні останнього з катіоном лужного чи лужноземельного металу у водному розчині. Так, утворення асоціатів йонних пар  $M^+-NO_3^-$  при  $M^+ = Na^+$  та  $NH_4^+$  супроводжується зростанням структурного



УДК 537.226

Сіденко Т.С., канд.фіз.-мат. наук, ст. наук. сп.

### Апроксимаційні формули для дисперсії показників заломлення монокристала дифосфіда кадмію

Проведено апроксимацію дисперсії показників заломлення одновісних кристалів дифосфіда кадмію за кількома відомими емпіричними формулами (Церніке, Зельмейєра, Гартмана, Коші тощо). Порівняння теоретичних результатів з експериментальними даними, отриманими для показників заломлення світлової хвилі (звичайної та незвичайної), що поширюється перпендикулярно до оптичної осі кристала  $\text{CdP}_2$ , дозволило отримати аналітичні формули, які з досить високою точністю ( $\delta n/n \sim 10^{-2}$ ) описують дисперсію показників заломлення практично у всій області прозорості кристала  $\text{CdP}_2$  (від 0.6 до 8 мкм).

Ключові слова: дисперсія, показник заломлення світла, монокристал, дифосфід кадмію.

\*E-mail: sidenko@univ.kiev.ua

#### 1. Вступ

Для зменшення рівня оптичних втрат у функціональних елементах квантової електроніки, нелінійної та акустооптики широко використовуються багатопарові інтерференційні покриття [1]. Оскільки ефективність роботи цих елементів істотно зростає при наближенні до краю власного поглинання, де згідно закону нормальної дисперсії зростають також і значення показників заломлення, то при розробці ахроматичних покриттів для ширококутових оптичних систем актуальним є врахування дисперсії показників заломлення матеріалів функціональних елементів, особливо виготовлених із високозаломлюючих кристалів [2, 3].

В роботі отримані аналітичні формули для дисперсії показників заломлення одновісного кристала  $\text{CdP}_2$ , виміряних при кімнатній температурі, для випадків поширення світлових хвиль вздовж однієї з кристалографічних осей кристала ( $a$ ,  $b$ ) перпендикулярно до оптичної осі  $c$  з орієнтацією електричного вектора ( $E \perp c$ ) або ( $E \parallel c$ ), тобто для звичайної та незвичайної хвиль, в області прозорості кристала - від 0.6 до 8 мкм.

©Т.С. Сіденко, 2007

T.S. Sidenko, PhD, senior res.

### Approximation formulas for the refractive indices dispersion of cadmium diphosphide monocrystal

The approximation for the refractive indices dispersion of uniaxial cadmium diphosphide crystal by known (Zernike, Sellmeier, Gartmann etc.) empiric formulas was carried out. The comparison of theoretical results and experimental data, obtained for refractive indices of a light wave propagating transversely to the optic axis of the  $\text{CdP}_2$  crystal for both ordinary and extraordinary waves, has allowed to obtain the analytical formulas, describing with rather high accuracy ( $\delta n/n \sim 10^{-2}$ ) the refractive indices dispersion practically in the whole transparency range of the  $\text{CdP}_2$  crystal (from 0.6 up to 8 microns).

Key Words: dispersion, refractive index, monocrystal, cadmium diphosphide.

Такі аналітичні залежності особливо важливо знати при розрахунках ахроматичних покриттів для просвітлюючих інтерференційних систем, відрізаючих інтерференційних фільтрів та інших елементів квантової електроніки та нелінійної оптики [3, 4].

#### 2. Основні формули для апроксимації дисперсії показників заломлення світла

Як відомо [5], дисперсія показника заломлення світла в речовині визначається залежністю поляризації  $P(t)$  середовища від напруженості  $E(t)$  електричного поля світла, що поширюється в його об'ємі, частоти  $\omega$  або довжини хвилі світла  $\lambda$ . У рамках класичної електронної теорії Лорентц-Лоренца цей зв'язок визначається формулою [5, 6]

$$P(t) = \frac{e^2 E(t) N / m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}}, \quad (1)$$

де  $e$  і  $m$  – заряд і маса електрона,  $t$  – час,  $\omega_0$  – частота власних коливань електронів у атомах речовини,  $\beta$  – коефіцієнт затухання коливань.

З виразу (1) випливає наступна залежність показника заломлення середовища від частоти  $\omega$



коливання напруженості електричного поля  $E(t)$  світла

$$n^2 = 1 + \frac{e^2 N / \varepsilon_0 m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}} \quad (2)$$

Нехтуючи затушенням, тобто вважаючи у формулі (2)  $\beta = 0$ , отримаємо так звану двочленну формулу Зельмейєра для дисперсії показника заломлення [5, 6]

$$n^2 = 1 + \frac{e^2 N / \varepsilon_0 m}{\omega_0^2 - \omega^2} = 1 + \frac{A \lambda^2}{\lambda^2 - B}, \quad (3)$$

де  $A$  і  $B$  – деякі сталі. У більш загальному вигляді двочленну формулу (3) можна записати так:

$$n^2 = A + \frac{B \lambda^2}{\lambda^2 - C}. \quad (4)$$

Формулу (4) зазвичай називають двочленною формулою Церніке. Ще однією модифікацією двочленною формули є так звана формула Гартмана [5]

$$n = A + \frac{B}{(\lambda - C)^D}. \quad (5)$$

Із формули (3) випливає, що при  $\omega \rightarrow \omega_0$  показник заломлення зростає відповідно до закону нормальної дисперсії. При переході через точку  $\omega = \omega_0$  крива дисперсії має зазнавати розрив і змінюватися від  $+\infty$  до  $-\infty$ . Однак завдяки завжди існуючому незначному затушенню в середовищі при переході через цю точку функція не зазнає розриву, а показник заломлення стрибкоподібно змінюється від  $n > 1$  до  $n < 1$ . У цій області частот проявляється так звана аномальна дисперсія, проте далі буде розглядатися лише область прозорості кристала, де явище аномальної дисперсії не спостерігається.

Відомі також інші емпіричні формули, запро-

поновані для апроксимації дисперсійної залежності показників заломлення речовин. Наприклад, тричленна формула Зельмейєра [6, 7]

$$n^2 = 1 + \frac{A \lambda^2}{\lambda^2 - B} + \frac{C \lambda^2}{\lambda^2 - D} \quad (6)$$

та тричленна формула Церніке [7, 8]

$$n^2 = A + \frac{B \lambda^2}{C \lambda^2 - 1} + \frac{D \lambda^2}{E \lambda^2 - 1}. \quad (7)$$

Існують також апроксимаційні формули, отримані внаслідок розкладу залежності  $n(\lambda)$  в ряд за величиною  $\lambda$ , наприклад, формула Коші [5, 6]

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} + D \lambda^2 + E \lambda^4. \quad (8)$$

Вищенаведені формули будуть використані для знаходження невідомих сталих, які входять у них, шляхом порівняння з експериментальними даними для показників заломлення одновісного кристала  $\text{CdP}_2$ .

### 3. Апроксимаційні формули для дисперсії показників заломлення світла в одновісному кристалі $\text{CdP}_2$ .

Для знаходження апроксимаційних формул показників заломлення світла (звичайної та незвичайної хвиль) у монокристалі  $\text{CdP}_2$  використовувались експериментальні дані, отримані в роботі [9], приведені у табл. 1. Константи, що входять у емпіричні формули розділу 2, знаходились шляхом чисельного розв'язку системи нелінійних рівнянь для кількох значень (рівних кількості сталих, що входять в апроксимаційну формулу) довжин хвиль і відповідних їм значень показників заломлення, взятих з усього інтервалу експериментальних даних. В основному при всіх розрахунках використовувались значення

Таблиця 1

Дисперсія показників заломлення монокристалів  $\text{CdP}_2$  для звичайної ( $n_o$ ) і незвичайної ( $n_e$ ) хвиль

| Довжина хвилі, мкм        | 0.6  | 0.65 | 0.70 | 0.75 | 0.80 | 0.85 | 0.90 | 0.95 | 1.0 | 1.1  | 1.2  | 1.3  |
|---------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|-----|------|------|------|
| Показник заломлення $n_o$ | 3.5  | 3.42 | 3.35 | 3.28 | 3.22 | 3.19 | 3.15 | 3.12 | 3.1 | 3.07 | 3.05 | 3.03 |
| Показник заломлення $n_e$ | 3.37 | 3.29 | 3.23 | 3.15 | 3.12 | 3.08 | 3.05 | 3.02 | 3.0 | 2.98 | 2.96 | 2.94 |

| Довжина хвилі, мкм     | 1.4  | 1.5  | 2.0  | 2.5  | 3.0  | 3.5   | 4.0   | 4.5  | 5.0   | 6.0  | 7.0   | 8.0  |
|------------------------|------|------|------|------|------|-------|-------|------|-------|------|-------|------|
| Показник заломл. $n_o$ | 3.02 | 3.01 | 2.97 | 2.96 | 2.95 | 2.947 | 2.943 | 2.94 | 2.935 | 2.93 | 2.92  | 2.92 |
| Показник заломл. $n_e$ | 2.93 | 2.92 | 2.91 | 2.90 | 2.89 | 2.88  | 2.876 | 2.87 | 2.866 | 2.86 | 2.856 | 2.85 |



показників заломлення для  $\lambda = 0.6, 1.4, 2.0, 5.0, 7.0$  мкм. Спочатку аналізувались двочленні формули. Розрахунки, проведені за виразом (3) з використанням значень  $n$  при  $\lambda = 0.6$  і  $4.0$  мкм, дозволили отримати такі двочленні формули Зельмейєра для монокристала  $\text{CdP}_2$ :  
для звичайної хвилі

$$n_o = \sqrt{1 + \frac{7.587 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.117}}; \quad (9 \text{ а})$$

для незвичайної хвилі

$$n_e = \sqrt{1 + \frac{7.182 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.11}}. \quad (9 \text{ б})$$

На рис. 1 показано графічне зображення теоретичних розрахунків, проведених за формулами (9 а) – суцільна лінія, (9 б) – пунктирна лінія, та експериментальних даних для  $n_o(\lambda)$  – кружечки, для  $n_e(\lambda)$  – хрестики.

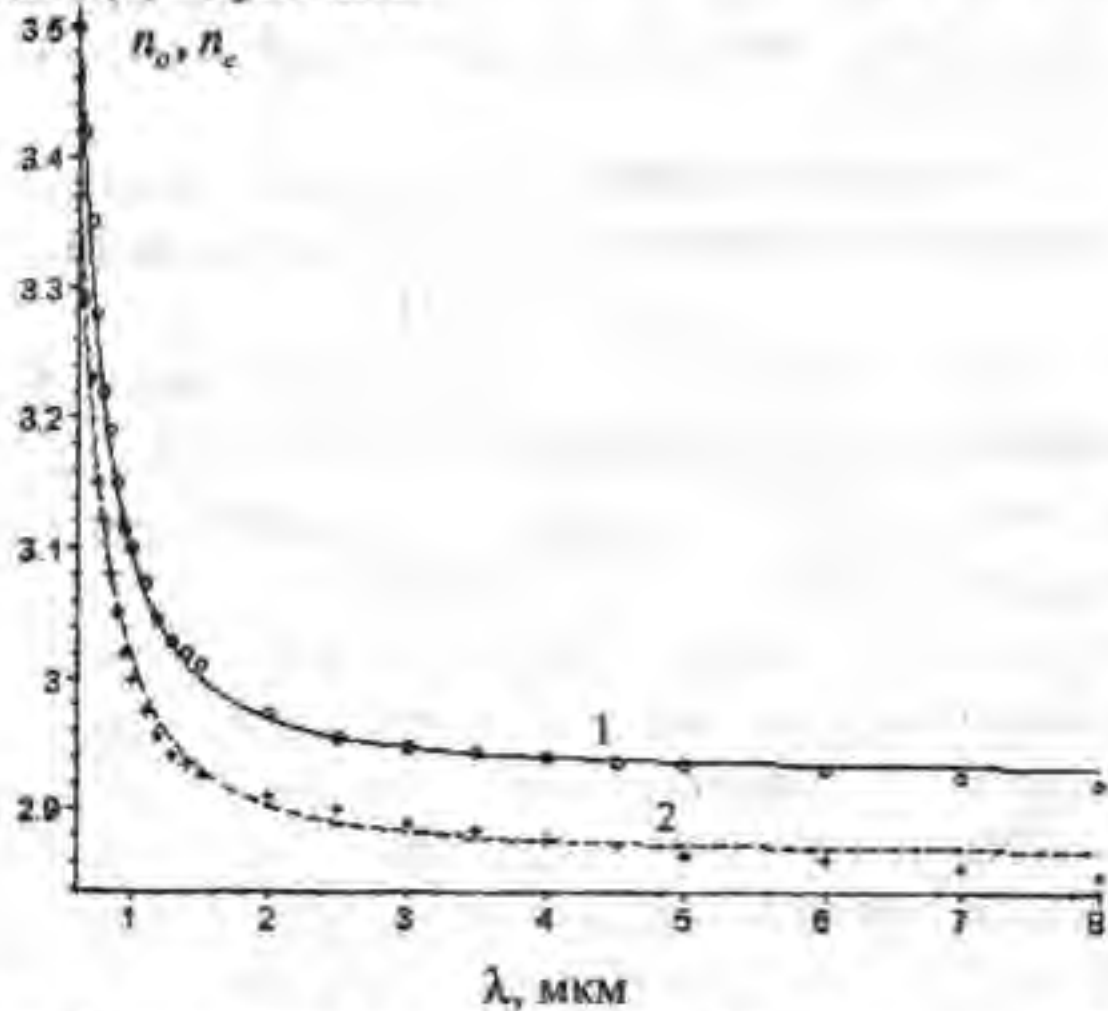


Рис. 1. Залежності  $n_o(\lambda)$  – крива 1,  $n_e(\lambda)$  – крива 2. Суцільна крива – розрахунки за формулою (9 а), пунктирна – розрахунки за формулою (9 б), точки – експеримент.

Як бачимо, має місце непогане узгодження теоретичних розрахунків з експериментальними даними на всьому розглядуваному інтервалі довжин хвиль. Найбільші відхилення, які однак не перевищують  $0.02 - 0.03$  (тобто відносна похибка  $(\delta n/n)$  не перевищує  $1\%$ ), спостерігаються у довгохвильовій області при  $\lambda > 6$  мкм, а для незвичайної хвилі – ще й в інтервалі  $2 - 4$  мкм, тобто апроксимація в цьому випадку трохи гірша, але також залишається у межах вищенаведеної похибки.

Розрахунки, проведені за виразом (4) з використанням значень  $n$  при  $\lambda = 0.6, 2.0$  і  $4.0$  мкм, дозволили отримати такі двочленні формули Церніке для монокристала  $\text{CdP}_2$ :

для звичайної хвилі

$$n_o = \sqrt{-3.509 + \frac{12.089 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.084}}; \quad (10 \text{ а})$$

для незвичайної хвилі

$$n_e = \sqrt{1.874 + \frac{6.309 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.12}}. \quad (10 \text{ б})$$

Відповідне графічне зображення приведено на рис. 2.

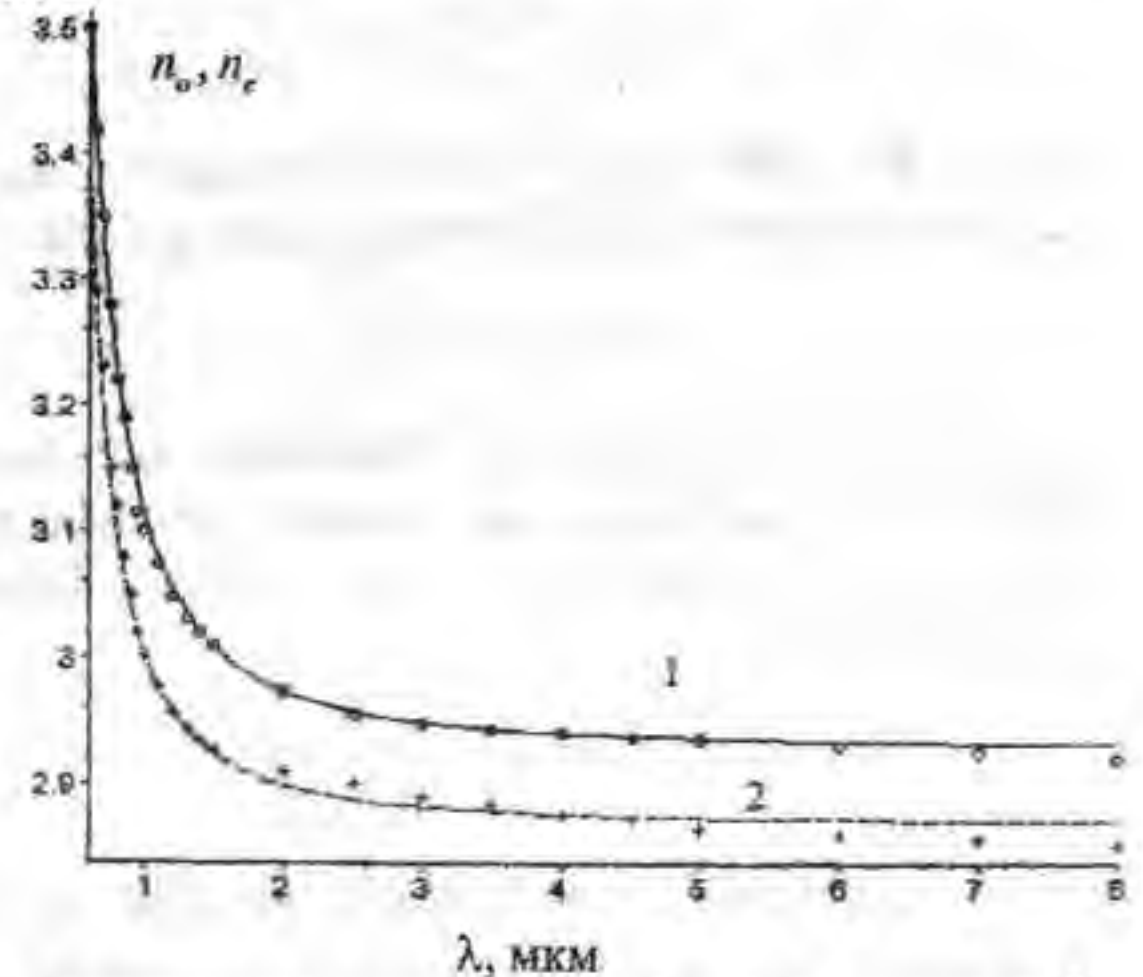


Рис. 2. Залежності  $n_o(\lambda)$  – крива 1,  $n_e(\lambda)$  – крива 2. Теоретичні розрахунки за формулами (10 а, б), точки – експеримент.

Як видно з рис. 2, для апроксимації дисперсійної залежності показників заломлення кристала  $\text{CdP}_2$  двочленними формулами Церніке також спостерігається непогане узгодження теоретичних розрахунків з експериментальними даними практично на всьому розглядуваному інтервалі довжин хвиль. Порівнюючи з попередніми результатами, бачимо, що наближення двочленною формулою Церніке, яка має три невідомі константи, дещо точніше описує дисперсійні залежності.

Розрахунки, проведені за виразом (5) з використанням експериментальних даних при  $\lambda = 0.6, 1.4, 2.0, 5.0$  мкм, дозволили отримати формули Гартмана для монокристалу  $\text{CdP}_2$  у такому вигляді:

для звичайної хвилі

$$n_o = 2.927 + \frac{0.141}{(\lambda - 0.14)^{1.8}}; \quad (11 \text{ а})$$

для незвичайної хвилі

$$n_e = 2.864 + \frac{0.08}{(\lambda - 0.272)^{1.65}}. \quad (11 \text{ б})$$

Відповідне графічне зображення для апроксимаційних формул Гартмана та їх порівняння з експериментальними даними показано на рис. 3.



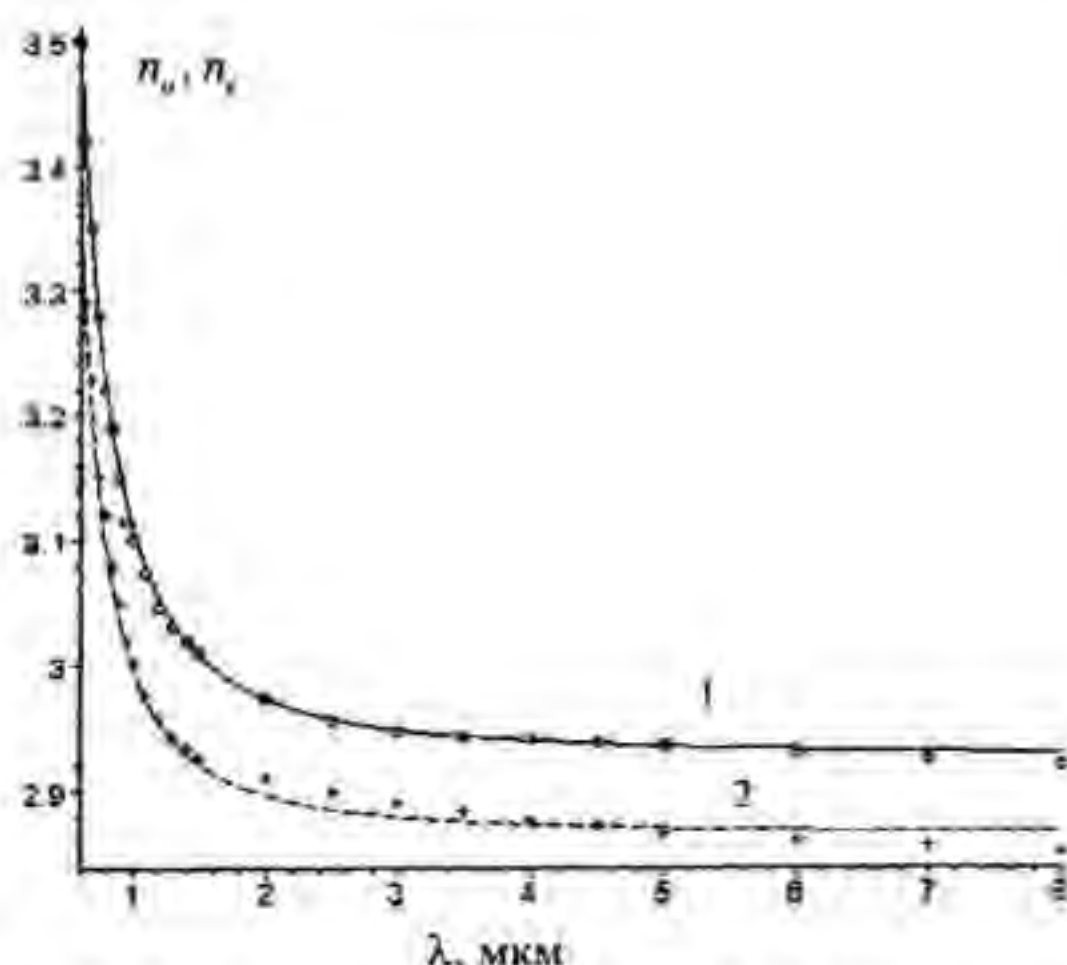


Рис. 3. Залежності  $n_o(\lambda)$  - крива 1,  $n_e(\lambda)$  - крива 2. Теорія - розрахунки за формулами (11 а, б).

Як видно з рис. 3, теоретичні розрахунки добре узгоджуються з експериментальними даними на всьому розглядуваному інтервалі довжин хвиль.

Апроксимація за формулою Коші (8) проводилась по п'яти значеннях показників заломлення монокристала CdP<sub>2</sub> для довжин хвиль  $\lambda = 0.6, 1.4, 2.0, 5.0, 6.0$  мкм. В результаті для показника заломлення звичайної хвилі отримано формулу Коші у вигляді

$$n_o = \sqrt{8.68 + \frac{0.66}{\lambda^2} + \frac{0.23}{\lambda^4} - 4.39 \cdot 10^{-3} \lambda^2 + 3.37 \cdot 10^{-5} \lambda^4}; \quad (12a)$$

для незвичайної хвилі

$$n_e = \sqrt{8.31 + \frac{0.25}{\lambda^2} + \frac{0.42}{\lambda^4} - 9.22 \cdot 10^{-3} \lambda^2 + 1.85 \cdot 10^{-5} \lambda^4}. \quad (12b)$$

Порівняння експериментальних даних із теоретичними розрахунками, проведеними за формулами (12 а), (12 б), показано на рис. 4.

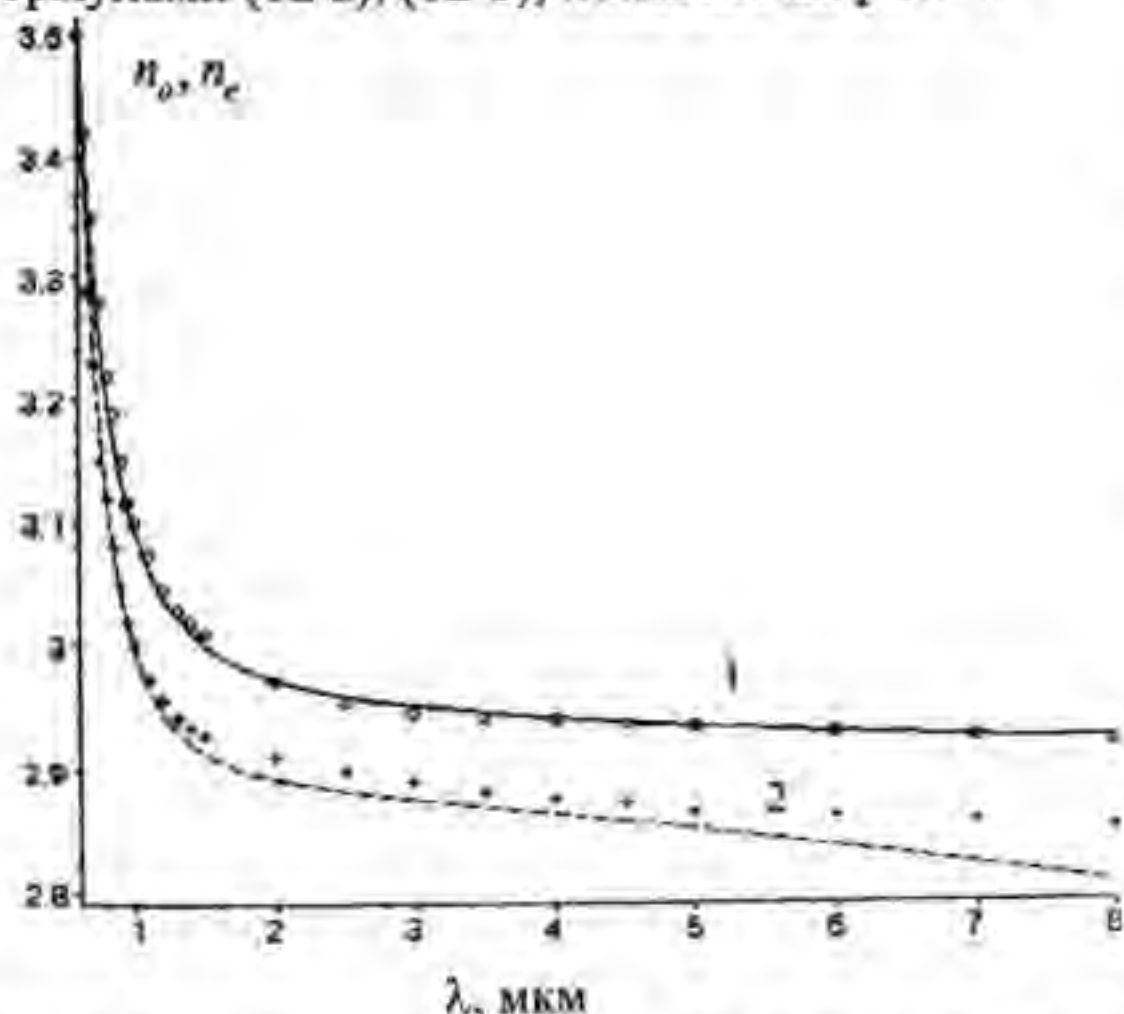


Рис. 4 Залежності  $n_o(\lambda)$  - крива 1,  $n_e(\lambda)$  - крива 2. Теорія - розрахунки за формулами (12 а, б).

Як видно з рис. 4, формула (12 а) досить точно апроксимує залежність  $n_o(\lambda)$  на всьому розглядуваному інтервалі довжин хвиль, формула (12 б) - гірше, особливо у довгохвильовій області (при  $\lambda > 5$  мкм).

Апроксимація за тричленними формулами Зельмейєра (6) дала такі результати: для звичайної хвилі

$$n_o = \sqrt{1 + \frac{7.71 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.114} - \frac{0.188 \lambda^2}{\lambda^2 + 3.558}}; \quad (13a)$$

для незвичайної хвилі

$$n_e = \sqrt{1 + \frac{6.4 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.126} + \frac{0.83 \lambda^2}{\lambda^2 + 0.23}}. \quad (13b)$$

Відповідне графічне зображення розрахунків  $n_o$  і  $n_e$  за знайденими для монокристала CdP<sub>2</sub> формулами Зельмейєра (13 а), (13 б) з експериментальними даними приведено на рис. 5.

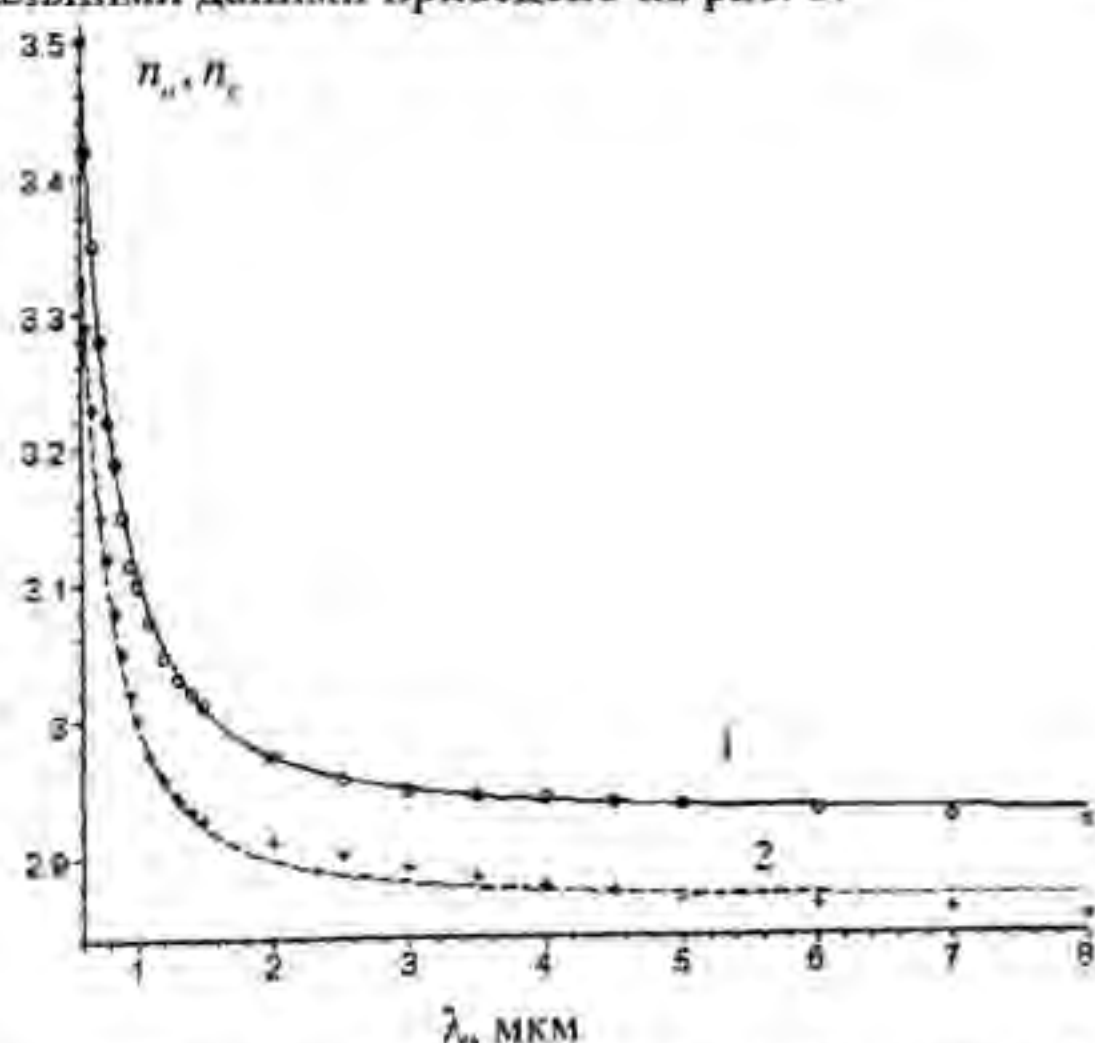


Рис. 5. Залежності  $n_o(\lambda)$  - крива 1,  $n_e(\lambda)$  - крива 2. Теорія - розрахунки за формулами (13 а, б).

Нарешті апроксимація за тричленними формулами Церніке (7) дала такі результати: для звичайної хвилі

$$n_o = \sqrt{7.88 + \frac{1.965 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.21} - \frac{1.32 \lambda^2}{\lambda^2 + 0.72}} \quad (14a)$$

для незвичайної хвилі

$$n_e = \sqrt{7.49 + \frac{0.998 \lambda^2}{\lambda^2 - 0.27} - \frac{0.474 \lambda^2}{\lambda^2 + 16.4}}. \quad (14b)$$

Порівняння експериментальних даних із теоретичними розрахунками, проведеними за формулами (14 а), (14 б), показано на рис. 6. Як видно з цього рисунка, апроксимація за тричленними формулами Церніке дає хороше узгодження з експериментом, особливо для залежності  $n_e(\lambda)$  у довгохвильовій області. Це найкраща зі знайдених для  $n_e(\lambda)$  апроксимацій.



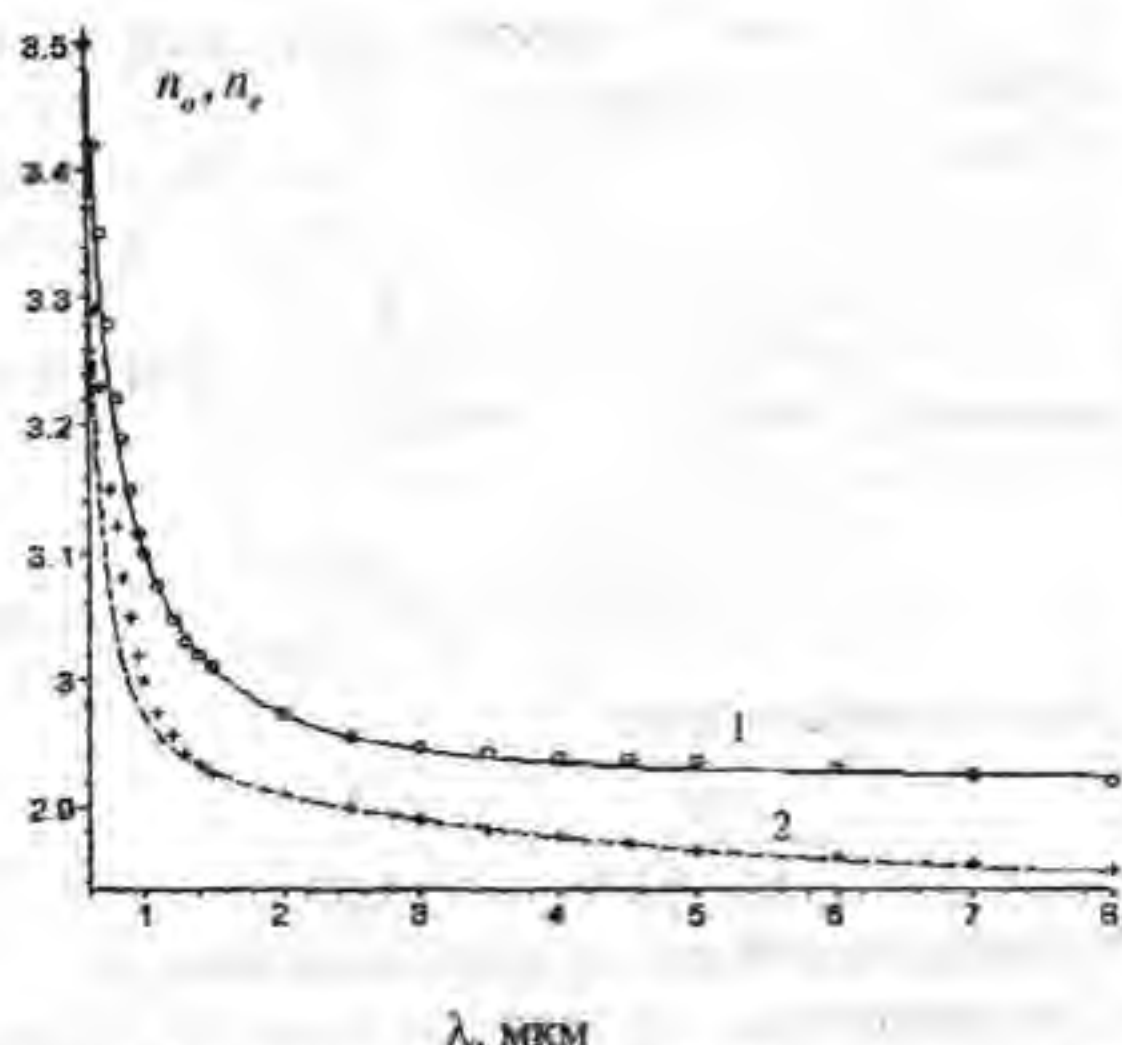


Рис. 6. Залежності  $n_o(\lambda)$  – крива 1,  $n_e(\lambda)$  – крива 2. Теорія – розрахунки за формулами (14 а, б).

Таким чином, із проведених в роботі розрахунків та їх порівняння з експериментальними даними можна зробити висновок, що всі отримані формули з досить високою точністю (а з наведених рисунків видно, що максимальне відхилення від експерименту становить 0.02, тобто відносна похибка не перевищує 1%) описують дисперсійні залежності  $n_o(\lambda)$ ,  $n_e(\lambda)$  в області прозорості та на краю власного поглинання одновісного кристала  $\text{CdP}_2$ . Тому не обов'язково використовувати складні функціональні залежності, такі як у тричленних формулах Зельмейєра, Церніке та в формулі Коші, а в залежності від складності подальших розрахунків, наприклад для просвітлюючих покриттів на основі монокристала дифосфіда кадмію, цілком достатньо буде записати двочленні формули Церніке або Гартмана, які мають лише по три довільні константи. Хоча, якщо необхідно мати найточніший опис дисперсійної залежності  $n_e(\lambda)$ , особливо у довгохвильовій області, то слід користуватися формулами Церніке (14).

#### 4. Висновки

В роботі отримано аналітичні формули, які описують дисперсію показників заломлення світла (звичайної та незвичайної хвиль), що поширюється перпендикулярно до оптичної осі одновісного монокристала дифосфіда кадмію, на краю власного поглинання та практично у всій області його прозорості (0.6 – 0.8 мкм).

Встановлено, що найбільш прийнятними як з точки зору кількості параметрів та простоти аналітичної залежності, так і з точки зору точності опису експериментальних даних (вона становить не менше 1%), є двочленні формули Зельмейєра (9 а, б), Церніке (10 а, б) та Гартмана (11 а, б). Слід зазначити, що інші знайдені в роботі апроксимаційні формули також добре описують експериментальні дисперсійні залежності показників заломлення звичайної та незвичайної хвиль у кристалі  $\text{CdP}_2$ . Приведено аналітичні записи цих формул і побудовано графіки теоретичних та експериментальних залежностей  $n_o(\lambda)$ ,  $n_e(\lambda)$  для всіх розглянутих апроксимацій.

#### Список використаних джерел

1. McLeod H.A. Thin-Film Optical Filters. – London: Adam Hilger, 1985.
2. Власенко Ю.В., Лисица М.П., Фекешигази И.В. Нелинейные оптические свойства гиротропных кристаллов  $\text{CdP}_2$  и  $\text{ZnP}_2$ . // Квантовая электроника. – 1985. – Вып. 29. – С. 36-48.
3. Trukhan V.M., Sheleg A.U., Fekeshgazi I.V. Cadmium diphosphide and zinc diphosphide single crystals – promising materials for electronic engineering. // Photorelectronics. – 2004. – No 13. – P.15-18.
4. Орлов С.В., Первак Ю.А., Фекешигази И.В. К оптимизации конструкций многослойных покрытий // ЖПИС. – 1994. – Т. 41, Вып. 1. – С. 138-141.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970. – 855 с.
6. Дитчберн Р. Физическая оптика. – М.: Наука, 1965. – 631 с.
7. Zernike F. Refractive indices of ammonium dihydrogen phosphate and potassium dihydrogen phosphate between 0.2 and 1.5  $\mu$ . // JOSA. – 1964. – Vol. 54. – No 10. – P. 1215-1220
8. Kirby K.W., DeShazer L.G. Refractive indices of 14 nonlinear crystals isomorphic to  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ . // JOSA (B). – 1987. – Vol. 4. – No 7. – P. 1072-1078.
9. Fekeshgazi I.V., Vlasenko Yu.V., Sidenko T.S. Effect of the refraction index dispersion of optical elements on the base of  $\text{CdP}_2$  on the efficiency of antireflective coating performance // Abstr. of Intern. Conf. "Problem of Optics and High Techn. Mater. Sci." Kyiv, 2004. – P. 166-167.

Надійшла до редколегії 16.03.2007



УДК 519.9

Усенко К.В., к.ф.-м.н. доцент

## Класифікація станів двочастинкових квантових каналів переносу інформації

Класифікація станів двочастинкових квантових каналів переносу інформації побудована на підставі незвідних подань групи симетрії простору станів кубітів та властивостей спектру матриці густини. Показано, що причиною розплутування станів може бути виникнення ненульових власних значень матриці густини. Серед станів з невиникненням матрицею густини розплутані стани утворюють двовимірну поверхню особливих станів.

Ключові слова: квантовий канал, переплутаність, незвідні подання

E-mail: usenko@univ.kiev.ua

### Частина 1.

### Передмова

Принципова відмінність законів розповсюдження і взаємодії квантових носіїв інформації від класичних має наслідком принципово нові інформаційні можливості квантових каналів переносу інформації. Головною відмінністю квантових носіїв є існування станів паралельних квантових каналів переносу інформації з неусувними кореляціями між частинами каналу – переплутаних станів [1, 2, 5, 6, 7, 8]. Значна, порівняно з класичними паралельними каналами, складність простору станів квантового каналу переносу інформації має наслідком необхідність використання для повного вимірювання стану складних експериментальних методів, як квантова томографія [1, 2], а для опису множини станів – переповнених базисів простору станів [3, 4]. Вичерпне дослідження властивостей переплутаних станів можливе лише за умови побудови вичерпної класифікації переплутаних станів, що має спиратись на симетрійні властивості просторів станів складових частинок паралельного квантового каналу – кубітів. Певний успіх в використанні симетрії простору станів кубітів для опису переплутаних

C.V. Usenko, PhD

## Classification of two-particle quantum channels of information transfer

Classification of states of two-particle quantum channels of information transfer is built on the basis of irreducible representations of qubit state space group of symmetry and properties of density matrix spectrum. It is shown that the reason of state disentanglement can be in degeneration of non-zero density matrix eigenvalues. Among the states with non-degenerate density matrix disentangled states form two-dimensional surface of special states.

Key Words: quantum channel, entanglement, irreducible representation

станів вже досягнутий [10, 11, 12, 9, 14], але лишаються невирішеними питання про обов'язковість симетрії станів композитних квантових систем та про вичерпність класифікації станів по незвідних представленнях групи симетрії простору станів кубітів. Слушна відповідь на ці два питання є головною темою роботи.

Класична теорія інформації значною мірою базується на твердженні про те, що носій інформації зі скінченною кількістю можливих станів може бути поданий за допомогою сукупності двостанових носіїв інформації – бітів. Підставою для такої точки зору є той факт, що довільне вимірювання (а саме вимірювання дають інформацію) має своїм результатом кожного разу тільки одне зі скінченного набору можливих значень. Дійсно, навіть вимірювання величин, які ми зазвичай вважаємо неперервними, відбуваються з певною похибкою і результати, що відрізняються менше ніж на похибку, тлумачаться, як однакові. Скінченний набір можливих значень, в свою чергу, може бути перенумерований. Запис номера значення в двійковому форматі здійснюється послідовністю нулів/одиничок, яка і є побітовим представленням стану носія інформації.

Загальною рисою всіх імплементацій біту є належність його станів до двоелементного про-



сторю  $B_2$ .

Квантовим аналогом біту має бути квантовий капал з двома можливими станами, який отримав назву „кубіт“. Прикладами кубіту є дворівневий атом, електрон з двома можливими напрямками спіну, фотон з двома можливими напрямками поляризації.

Спільною рисою кубітів є специфіка статистики вимірювань станів. Для кожного чистого стану довільної квантової системи існує рівно один детектор, для якого ймовірність реєстрації системи в цьому стані дорівнює одиниці. Для кубіту в заданому чистому стані існує також рівно один детектор, для якого ймовірність реєстрації кубіту в цьому стані дорівнює нулю. Найпростішим прикладом є вимірювання лінійної поляризації фотонів за допомогою призми Ніколя: для фотона в стані з поляризацією, паралельною до площини поляризації призми, ймовірність реєстрації в звичайному промені дорівнює одиниці, а в незвичайному – нулю, а інших можливостей для реєстрації фотона призма Ніколя не надає.

Інформація зазвичай кодується не одним, а багатьма бітами. Ці біти можуть переноситись одним каналом послідовно, або одночасно декількома каналами, і в тому і в тому разі вважається, що взаємовплив окремих бітів відсутній або може бути компенсований технічними засобами. З огляду на це базовим об'єктом дослідження в класичній теорії інформації є саме біт, а головними задачами є визначення характеристик каналу, що обмежують швидкість переносу інформації, методи компенсації втрат інформації, методи оцінки надійності каналу. Каналом називають довільний прилад обробки інформації, навіть такий, що тільки зберігає інформацію протягом деякого часу.

Послідовні багатобітові квантові канали відрізняються від класичних тільки властивостями кожного окремого кубіта і не потребують окремого розгляду. Паралельні ж канали принципово відрізняються від класичних можливістю існування неусувних кореляцій між окремими підканалами. В цій роботі досліджується задача класифікації станів двочастинкових паралельних квантових каналів переносу інформації. Ефективність запропонованих методів класифікації демонструється на двох важливих прикладах – паракубіті, що є спільним

станом пари двостанових частинок, та паракутріті, що є композитним станом кубіту та кутріту.

## Паралельні канали переносу інформації

Одним з перших усвідомлених проявів квантової природи була здатність електромагнітного поля випромінюватись/поглинатись тільки цілими частинками – квантами електромагнітного поля або ж фотонами. Класичні канали переносу інформації теж здійснюють перенос окремими порціями – бітами, але досягається вона шляхом спеціальних технічних вигадок, тоді як створення джерела окремих фотонів є, як на сьогодні, важливою науковою, навіть ще не технічною, задачею.

Класичні канали переносу інформації бувають паралельними тільки з огляду на прискорення переносу. Паралельний канал повністю подібний до послідовного, тільки замість миті переносу черговий біт ідентифікується номером каналу. Інформація, що переноситься системою паралельних каналів, є функцією від станів окремих каналів.

Квантові паралельні канали, на відміну від класичних, можуть мати неусівні, суто квантові кореляції, оскільки множина станів системи каналів є більшою за добуток множин станів підканалів. На перший погляд, останнє твердження суперечить лінійності гільбертових просторів, векторами яких зображуються стани довільної квантової системи. Насправді стани, принаймні чисті, зображуються не довільними векторами простору станів  $|\psi\rangle$ , а променями  $\{W|\psi\rangle : \forall W \in C \& W \neq 0\}$  – всі вектори, що відрізняються множителем, відповідають одному стану. Кількість незалежних (дійсних) параметрів довільного чистого стану в  $N$ -вимірному просторі однієї підсистеми складає  $2N - 2$ , в  $M$ -вимірному просторі другої підсистеми –  $2M - 2$ , а в  $N * M$ -вимірному просторі композитної системи складає  $2N * M - 2$  і перевищує загальну кількість параметрів підсистем на величину  $2(N - 1)(M - 1)$ , більшу нуля для всіх нетривіальних композицій. Наприклад, для паракубіта, що має чотиривимірний простір станів, існує шість довільних параметрів чистого стану, тоді як кожен кубіт має тільки по два параметри. Так само пара кутрітів має шестивимірний



простір станів, існує десять довільних параметрів чистого стану, тоді як комбінація кубіта з кутритом має тільки шість параметрів (чотири – кутрита, та два – кубіта).

Як наслідок, не кожен чистий стан композиційної системи є композицією чистих станів своїх підсистем, певна і доволі значна частина чистих станів утворюється мішаними станами підсистем.

Мішані стани каналу, квантові або ж класичні, відрізняються від чистих тим, що вони готуються, з певною частотою, в різних чистих станах. Існує принципова можливість здійснення контролю за тим, в якому саме з чистих станів готувався канал в черговому акті. Водночас, в послідовності актів переносу, в якій канал готувався перші  $p_1 N$  разів в першому стані, потім  $p_2 N$  разів в другому і так далі, статистика вимірювань не буде відрізнятися від подібної серії, в якій випадково чи прогнозовано канал готувався в різних станах в іншому, складнішому, порядку, але так, що загальна кількість випадків першого стану дорівнює тому ж значенню  $p_1 N$ , другого –  $p_2 N$ . Таким чином, інформація, закодована в розподілі мішаного стану каналу по чистих станах, закладається в канал в процесі створення стану, а відмінність стану каналу від запланованого може бути просто результатом недосконалості приладів, що готують канал.

Чисті стани каналу готуються однаково в кожному акті переносу інформації, а статистичні відхилення результатів вимірювань спостережуваних характеристик стану каналу є проявом квантової невизначеності і свідчать про неузгодженість вимірювального прилада з джерелом. У разі повної узгодженості чисті стани реєструються відповідним детектором з ймовірністю одиниця і не реєструються жодним іншим – статистичний розподіл реєстрації стану каналу відсутній. Така узгодженість між джерелом станів квантової системи та вимірювальним приладом відома, як неруйнівне вимірювання.

В паралельному квантовому каналі переносу інформації не завжди існує сукупність вимірювальних приладів станів підканалів, здатна забезпечувати неруйнівні вимірювання. Кожен з чистих станів паралельного каналу, що не може бути поданий комбінацією незалежних станів підканалів, не може бути без редукації стану

вимірюваний приладами, що незалежно реєструють стани кожного підканалу. Під час взаємодії частинок підканалів з аналізаторами створюються мішані стани підканалів, яким завжди властива статистична невизначеність результатів вимірювань. Таким чином, статистична невизначеність виникає в процесі вимірювання стану складових частин паралельного квантового каналу переносу інформації.

Інформація, що народжується в кожному акті переносу чистого стану паралельного квантового каналу в процесі вимірювання стану однієї з частинок каналу, природньо, не може бути інформацією про стан каналу в цілому, тож вона повинна мати відношення до стану інших частинок каналу, а це можливе лише у випадку кореляції результатів вимірювань станів частинок паралельного каналу. З огляду на кореляційні властивості суто квантового походження виникло уявлення про переплутаність станів.

Кореляція між частинками каналу має місце і в тому разі, коли певну частину актів переносу канал готується з однією частинкою в першому стані і другою теж в першому, іншу частину актів переносу – з частинками в других станах і так далі. Такий стан паралельного квантового каналу є мішаним. Інформація в такий канал закладається в процесі підготовки стану каналу, замість народжуватись в процесі вимірювання. Кореляції, обумовлені переплутаністю станів, якісно відрізняються від класичних, про що свідчать нерівності Белла.

Дослідження особливих властивостей квантових паралельних каналів потребує використання специфічної міри цих властивостей. Фізичною характеристикою неусувної статистичної невизначеності є ентропія фон Неймана. Вона співпадає з ентропією Шеннона у власному базисі матриці густини і дорівнює нулю для чистих станів. Ентропія Шеннона, як незалежна від фізичної реалізації міра невизначеності розподілу ймовірностей, має певні властивості щодо поділу статистичної системи на підсистеми. Так, для системи, що складається з незалежних підсистем, ентропія Шеннона дорівнює сумі ентропій підсистем, тоді як в протилежному випадку повністю корельованої системи ентропія Шеннона кожної підсистеми дорівнює ентропії системи в цілому.



Переплутані чисті стани відрізняються ненульовою ентропією Нейманна підсистем і одночасно нульовою - системи. Надлишок ентропії, що виникає внаслідок поділу системи на підсистеми, отримав назву відносної ентропії переплутування [1]. В подальшому було продемонстровано певні проблеми з ефективністю оцінки переплутаності за цією величиною [5] і побудовані інші міри [6] і критерії [7, 8] переплутаності.

## 1 Стани кубіту

Опис фізичних властивостей кубіту дається його станами. Чисті стани подаються нормованими векторами двовимірного гільбертова простору  $\mathcal{H} = C^2$ . Аналогами класичних станів є певні стани квантової системи  $|0\rangle$  та  $|1\rangle$ , які ми можемо обрати за базис простору станів кубіту.

### 1.1 Чисті стани

Довільний чистий стан кубіта характеризується вектором стану

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle \quad (1)$$

Вектор стану є лінійною комбінацією базисних векторів і тому означається двома комплексними числами  $c_0$  та  $c_1$  – коефіцієнтами представлення стану в заданому базисі. Ці числа не є повністю незалежними, оскільки всі вектори, що відрізняються тільки ненульовим множником, спільним для обох коефіцієнтів,  $\tilde{c}_0 = Cc_0$ ,  $\tilde{c}_1 = Cc_1$ , задають один фізичний стан. Найчастіше представником стану обирається один з нормованих векторів  $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ , тоді лишається можливість домножати коефіцієнти тільки на довільний фазовий множник  $\tilde{c}_0 = e^{i\psi} c_0$ ,  $\tilde{c}_1 = e^{i\psi} c_1$ .

Довільний чистий стан

$$c_0 = e^{i\psi} \cos \theta/2, \quad c_1 = e^{i\psi+i\phi} \sin \theta/2 \quad (2)$$

повністю визначається двома дійсними параметрами  $\phi$ ,  $\theta$ , множина яких співпадає з множиною точок сфери, що її називають сферою Пуанкаре (квантова оптика) або сферою Блоха (фізика твердого тіла).

Квантовим аналогом пари станів класичного біту є кожна пара діаметрально протилежних точок сфери Пуанкаре. Кожна з таких пар складається з ортогональних один до одного станів і задає пару векторів

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |\theta, \phi\rangle; \\ |1\rangle &= |\pi - \theta, \phi + \pi\rangle; \end{aligned} \quad (3)$$

які утворюють базис в просторі станів кубіту.

Замість пари точок дискретного простору станів класичного каналу квантовий канал надає для переносу інформації всю множину пар діаметрально протилежних точок сфери Пуанкаре.

### 1.2 Матриця густини кубіту

Матриця густини дає більш універсальний спосіб опису станів.

Для довільного чистого стану матриця густини є проектором на одновимірний підпростір векторів, колінеарних стану

$$\hat{\rho}(\psi, \theta) = |\psi, \theta\rangle \otimes \langle \psi, \theta|, \quad (4)$$

і тому в заданому базисі має таке представлення

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(\theta, \phi) &= (1 + \cos \theta)/2 |0\rangle \langle 0| + (1 - \cos \theta)/2 |1\rangle \langle 1| \\ &+ (\sin \theta)/2 \left( e^{-i\phi} |0\rangle \langle 1| + e^{i\phi} |1\rangle \langle 0| \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Квантовий канал переносу інформації, що з певною частотою  $p$  отримує від джерела стан  $|1\rangle$ , а з частотою  $1 - p$  – стан  $|0\rangle$ , має мішаний

стан кубіту, що може бути поданий, як суміш чистого стану  $|1\rangle$  з вагою  $2p - 1$  і рівноважного з вагою  $2(1 - p)$

$$\hat{\rho}(p, \theta, \phi) = (1 - p) |0\rangle \langle 0| + p |1\rangle \langle 1| = 2(1 - p) \frac{1}{2} \hat{1} + (2p - 1) |1\rangle \langle 1|. \quad (6)$$



### 1.3 Вимірювання та редукція станів

Кореляції станів багаточастинкового квантового каналу передачі інформації спостерегаються шляхом вимірювання станів, тому повна класифікація кореляційних властивостей станів спирається на детальний аналіз особливостей вимірювання композитних станів декількох частинок.

Процес вимірювання стану довільної квантової системи супроводжується редукцією стану до одного з власних станів вимірювального приладу. Повний опис процесу вимірювань спирається на відокремлення аналізу стану та детектування.

В процесі аналізу відбувається взаємодія вимірюваної частинки та аналізатора. Типовими прикладами є взаємодія поляризованого фотона з призмою Ніколя або ж електрона з магнітним полем. Результатом такої взаємодії є розщеплення руху фотону залежно від його поляризації або електрону залежно від орієнтації спіна відносно магнітного поля. Суттєвим є також, що фотон або електрон буде рухатись в певному напрямку (з деякою ймовірністю), навіть якщо до взаємодії з аналізатором поляризація (або спін) не відповідали жодному з можливих кінцевих станів, тобто якщо стан частинки до аналізатора був суперпозицією базисних станів.

#### 1.3.1 Вимірювання квантової частинки

На початок взаємодії частинки з аналізатором матриця густини системи „частинка-аналізатор“ є добутком матриць густини незалежних підсистем  $\hat{\rho}_f = \hat{\rho}_p \otimes \hat{\rho}_a$ . В результаті взаємодії вона перетворюється на суміш (це перетворення не є унітарним!)

$$\hat{\rho}_f = \sum_{\forall k} p_k \hat{\rho}_p^{(k)} \otimes \hat{\rho}_a^{(k)}. \quad (7)$$

Ця суміш складається з добутків матриць густини незалежних станів частинки та аналізатора  $\hat{\rho}_f^{(k)} = \hat{\rho}_p^{(k)} \otimes \hat{\rho}_a^{(k)}$ . Вага кожного добутку визначається часткою відповідного стану частинки

$$p_k = \text{Tr}(\hat{\rho}_p^{(k)} \hat{\rho}_p) \quad (8)$$

в початковому її стані. Саме ця величина і підлягає вимірюванню, як очікувана частка  $k$ -того

можливого стану в вимірюваному стані частинки.

Вважається, що всі матриці густини підстанів  $\hat{\rho}_p^{(k)}$  є ортогональними між собою

$$\hat{\rho}_{p,a}^{(k)} \hat{\rho}_{p,a}^{(m)} = \hat{\rho}_{p,a}^{(k)} \delta_{k,m} \quad (9)$$

і утворюють повну систему

$$\sum_{\forall k} \hat{\rho}_{p,a}^{(k)} = \hat{I}_{p,a}. \quad (10)$$

Після взаємодії частинки з аналізатором відбувається детектування результатів взаємодії. Найпростішим варіантом детектування є поглинання частинки деяким детектором з повного набору. В цьому варіанті припускається, що кожен з підстанів частинки  $\hat{\rho}_p^{(k)}$  може бути поглинений (з ймовірністю 1) тільки одним з детекторів і не може бути поглинений жодним іншим, тому відносна частка відліків кожного з детекторів дає оцінку ймовірності відповідного підстану.

Більш вишуканим є детектування станів аналізатора. Перевагою цього варіанту є те, що частинка після аналізатора залишається в добре відомому стані [16, 17, 18, 19], такий вимірювальний прилад одночасно є генератором заданих станів. Суттєвим недоліком такого генератора є те, що стан створюється з деякою ймовірністю, меншою за одиницю, тобто не в кожному акті генерації утворюється саме заданий, конкретний, потрібний стан.

#### 1.3.2 Вимірювання кубіту

В двовимірному просторі станів ортогональні проєктори утворюють пари, для кожного заданого проєктора

$$\hat{P}_0(\theta, \phi) = |\theta, \phi\rangle \langle \theta, \phi|$$

існує єдиний проєктор, ортогональний до заданого

$$\begin{aligned} \hat{P}_1(\theta, \phi) &= \hat{I} - \hat{P}_0(\theta, \phi) \\ &= |\pi - \theta, \phi + \pi\rangle \langle \pi - \theta, \phi + \pi|. \end{aligned}$$

Як наслідок, матриця густини довільного стану після взаємодії з аналізатором змінюється, перетворюючись на суміш власних станів аналізатора

$$\hat{\rho} \xrightarrow{\theta, \phi} p \hat{\rho}(\theta, \phi) + (1 - p) \hat{\rho}(\pi - \theta, \phi + \pi)$$



Взаємодія з аналізатором не змінює стан системи тільки в тому разі, коли він ще до взаємодії з аналізатором був сумішшю власних станів аналізатора (так звані неруйнівні вимірювання). Канал, в якому стани готуються і вимірюються за допомогою однакових (або узгоджених) аналізаторів, не відрізняється за своїми властивостями від класичного каналу, тоді як канал, стани якого готуються в довільному базисі, якісно відрізняється від класичного, оскільки вимірювання кожного конкретного стану відбувається з втратою частини інформації про стан.

Ортогональне розвинування одиничного оператора, що діє в просторі станів кубіту, складається з двох проєкторів  $\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|$  та  $\hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|$ , що для кожного чистого стану задають амплітуди  $c_{0,1}$  ймовірностей реєстрації частинки відповідним детектором  $\hat{P}_{0,1}|\psi\rangle = c_{0,1}|0,1\rangle$ . Для мішаного стану  $\hat{\rho}$  ймовірності реєстрації частинки відповідним детектором задаються проєкуванням матриці густини  $\hat{P}_{0,1}\hat{\rho}\hat{P}_{0,1} = p_{0,1}\hat{P}_{0,1}$  на підпростір, що відповідає детектору. І для чистих і для мішаних станів в результаті проєкування втрачається частина параметрів стану. Для чистого стану втрачається один з двох параметрів стану - значення кута  $\phi$  на сфері Пуанкаре, тоді як для мішаного з трьох параметрів стану лишається тільки один.

### 1.3.3 Квантова томографія

Визначення всіх трьох параметрів стану кубіту потребує принаймні трьох незалежних вимірювань, що використовуватимуть несумісні розвинування одиничного оператора. За приклад таких вимірювань можна вказати такі набори проєкторів:  $P_{z|0,1} = \frac{1}{2}(1 \pm \sigma_z)$ ,  $P_{x|0,1} = \frac{1}{2}(1 \pm \sigma_x)$ ,  $P_{y|0,1} = \frac{1}{2}(1 \pm \sigma_y)$ . Кожне з вимірювань дозволяє визначити тільки одну з компонент вектора  $\vec{r}$ , що характеризує матрицю Блоха кубіту.

Заміна одного представлення одиничного оператора іншим подібна в наведеному прикладі до переходу до вимірювання проєкції вектора Блоха  $\vec{r}$  на іншу вісь, що має здійснюватись шляхом „повороту“ вимірювального прилада в умовному фазовому просторі. Саме тому метод [2] вимірювання стану квантової системи шляхом здійснення вимірювань необхідної кількості некоммутуючих спостережуваних отримав назву квантової томографії.

## 2 Переплутування станів

Більша за скінченну потужність простору станів квантового каналу переносу інформації унеможливорює зведення станів складного каналу до простої комбінації станів незалежних кубітів. Разом з тим принаймні деякі (наприклад, базисні) стани складного каналу, якщо розмірність його простору станів є степенем двійки, можна подати прямим добутком потрібної кількості кубітових станів. Таким чином, стани складного каналу мають поділятися на подібні класичним станам і такі, що не мають класичного аналога. Останні отримали назву переплутаних станів. В цьому розділі розглядаються переплутані комозитні стани багатостанової системи.

### 2.1 Багатостанові системи

Квантовий канал переносу інформації з розмірністю простору станів  $\dim \mathcal{H} = N$  більшою за два не заслуговує терміну „кубіт“. Підкреслити разом і квантові властивості і нетривіальну розмірність простору можна за допомогою терміну „куніт“, що поєднує квантові властивості з  $N$ -вимірністю.

Довільний стан куніту може бути поданий коефіцієнтами розвинування цього стану в ряд за векторами ортонормованого базису  $\{|k\rangle; k = 1 \dots N\}$

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N \psi_k |k\rangle; \quad \sum_{k=1}^N |\psi_k|^2 = 1 \quad (11)$$

З огляду на умови нормування та довільності фазового множника множина значень коефіцієнтів частого стану куніту є еквівалентною  $2(N-1)$ -вимірній сфері.

#### 2.1.1 Мультикубіти (куніти)

Особливим варіантом кунітів є квантові канали переносу інформації з розмірністю простору станів, що дорівнює степеню двійки  $\dim \mathcal{H} = N = 2^d$ .

Довільний стан класичного каналу переносу інформації з такою розмірністю розширюється до прямого добутку окремих бітів  $[b_0, \dots, b_{d-1}] = [b_0] \otimes \dots \otimes [b_{d-1}]$ , що є станами окремих однобітових класичних каналів



переносу інформації. Саме в такий спосіб класичний канал переносить інформацію довільної складності.

На відміну від класичного, в квантовому каналі переносу інформації тільки деякі вектори можуть бути подані добутками базисних векторів кубітів

$$|b_0, \dots, b_{d-1}\rangle = |b_0\rangle \otimes \dots \otimes |b_{d-1}\rangle, \quad (12)$$

тоді як довільний стан кубіту є складнішим, ніж прямий добуток кубітів. Дійсно, стан кубіту визначається  $2(2^d - 1) = 2^{d+1} - 2$  параметрами, тоді як стан прямого добутку  $d$  кубітів -  $2^d$  параметрами. Навіть паракубіт ( $d = 2$ ) має 6 параметрів стану, тоді як пара окремих кубітів - тільки 4.

Існування додаткових порівняно з набором кубітів, параметрів мультикубітного стану свідчить про існування додаткових властивостей мультикубітних станів, що не можуть бути зведені до властивостей набору кубітів.

## 2.2 Паракубіт

Найпростішим нетривіальним кубітом є паракубіт - система з чотиривимірним простором станів, що її можна намагатись зобразити за допомогою пари кубітів.

Оскільки чисті стани кубіту задаються двома дійсними числами, кількості параметрів пари кубітів не вистачає, аби поставити їх у відповідність чистому стану паракубіта, тільки за припущення про можливість утворення чистого стану паракубіту певними комбінаціями мішаних станів окремих кубітів кількість параметрів

стає достатньою. Саме такі чисті стани паракубіту, що складаються з мішаних станів кубітів, і мають властивості, яких не може бути у класичних каналів переносу інформації.

Будемо використовувати позначення  $|\rangle\rangle$  для векторів в просторі станів паракубіту,  $|\rangle$ ,  $| \rangle$  - першого та другого кубітів. Надалі припускатимемо, що існує можливість розрізняти перший та другий кубіти, наприклад, за взаємодією з магнітним полем (спіновий кубіт) та електричним (просторова хвильова функція в дворівневому атомі - просторовий кубіт).

Фізичний зміст надлишкових параметрів станів паракубіту слід шукати серед додаткових варіантів станів, відмінних від прямого добутку станів двох кубітів.

### 2.2.1 Чисті стани паракубіту

Розглянемо спочатку чисті стани паракубіту. Вони задаються вектором стану

$$|\psi\rangle\rangle = \sum_{k,m=0,1} \psi_{k,m} |k\rangle \otimes |m\rangle \quad (13)$$

Чотири комплексні коефіцієнти цієї суми (вісім дійсних чисел) задовольняють умову нормування  $\sum_{k,m=0,1} |\psi_{k,m}|^2 = 1$  і означені з точністю до спільного фазового множника, тому є 6 різних дійсних чисел, що задають стан паракубіту. Множиною цих чисел є 6-вимірна сфера.

Стан першого/другого кубіту отримується усередненням матриць густини паракубіту по можливих станах другого/першого кубіту

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_1 &= \sum_{m'=0,1} \langle m' | \hat{\rho}_{para} | m' \rangle = \sum_{m,k,k'=0,1} \psi_{k,m}^* \psi_{k',m} |k'\rangle \langle k| \\ \hat{\rho}_2 &= \sum_{k'=0,1} \langle k' | \hat{\rho}_{para} | k' \rangle = \sum_{k,m,m'=0,1} \psi_{k,m}^* \psi_{k,m'} |m'\rangle \langle m| \end{aligned} \quad (14)$$

маємо

$$\begin{aligned} |0,0\rangle\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle; \\ |0,1\rangle\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle; \\ |1,0\rangle\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle; \\ |1,1\rangle\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Такі стани відповідають класичному розкладенню парабіта на пару бітів.

Якщо ж власні значення матриць густини першого/другого кубіту відмінні від нуля та одиниці, стани кубітів не є чистими. Одним з

Унітарними перетвореннями базисів просторів стану першого та другого кубітів кожна з цих матриць густини може бути зроблена діагональною, що є еквівалентним вибору в якості базису власних векторів цих матриць.

Якщо одне з власних значень матриці густини першого/другого кубіту дорівнює нулю (друге, відповідно, одиниці), стани кубітів теж є чистими і в деякому наборі базисів стан паракубіту є прямим добутком станів кубітів. Обираючи відповідні стани кубітів за  $|0,1\rangle$  та  $|0,1\rangle$ .



прикладів такого стану є ЕПР-стан

$$|EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\phi}|0\rangle \otimes |1\rangle + e^{-i\phi}|1\rangle \otimes |0\rangle)$$

Матриці густини першого та другого бітів в цьому стані є однаковими і відповідають рівномірному розподілу можливих станів

$$\begin{aligned}\rho_f &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|); \\ \rho_s &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|).\end{aligned}\quad (16)$$

Такий стан паракубіту є стовідсотково некласичним, оскільки має нетривіальні властивості не тільки з точки зору класичної теорії інформації, а й з фізичної точки зору. Оскільки ЕПР-стан паракубіту є чистим, його ентропія дорівнює нулю, тоді як ентропія кожного з кубітів дорівнює одиниці. Перевищення ентропії підсистем над ентропією системи є важливою особливістю некласичних станів, які отримали назву переплутаних (entangled).

### 2.2.2 Мішані стани паракубіту

Довільний мішаний стан паракубіту означається його матрицею густини

$$\rho_{para} = \sum_{m,m'=1..4} \rho_{m,m'} |m\rangle\langle m'|, \quad (17)$$

що має, як ермітова матриця, незалежними параметрами 16 дійсних чисел, а з урахуванням нормованості ( $\sum_{m=1..4} \rho_{m,m} = 1$ ) – 15 незалежних дійсних параметрів. Обираючи за базисні стани прямі добутки базисів кубітів (15), маємо представлення матриці густини

$$\rho_{para} = \sum \rho_{m,k;m',k'} |m,k\rangle\langle m',k'|, \quad (18)$$

з якого згортою по станах одного з кубітів легко отримати вирази для матриць густини другого кубіту

$$\begin{aligned}\rho_f &= \sum \rho_{m,k;m',k} |m\rangle\langle m'|, \\ \rho_s &= \sum \rho_{m,k;m,k'} |k\rangle\langle k'|.\end{aligned}$$

З урахуванням нормування та ермітовості матриць густини результатом згортки є такі співвідношення між коефіцієнтами матриць густини паракубіта та його складових

$$\begin{aligned}\rho_{00}^{(f)} &= \rho_{00,00} + \rho_{01,01}; \\ \rho_{01}^{(f)} &= \rho_{00,10} + \rho_{01,11}; \\ \rho_{00}^{(s)} &= \rho_{00,00} + \rho_{10,10}; \\ \rho_{01}^{(s)} &= \rho_{00,01} + \rho_{10,11}.\end{aligned}\quad (19)$$

Тут враховано, що кубіт визначається одним з двох дійсних діагональних коефіцієнтів матриці густини, наприклад,  $\rho_{00}^{(f,s)}$ , та одним з двох комплексних недіагональних коефіцієнтів  $\rho_{01}^{(f,s)}$ .

Рівнянь (19) не вистачає, аби за коефіцієнтами  $\rho_{00}^{(f,s)}$ ,  $\rho_{01}^{(f,s)}$  обох матриць стану кубітів визначити всі коефіцієнти  $\rho_{m,k;m',k'}$  матриці стану паракубіту, отже навіть повне дослідження окремих складових паракубіту не дозволяє відновити його стан, необхідно додатково аналізувати методи повного вимірювання станів квантового каналу.

## 3 Визначення стану

Визначення стану квантової системи є одним з різновидів вимірювання. Окреме вимірювання може мати на меті визначення середнього значення певної спостережуваної, невизначеності цього значення, може навіть розподілу ймовірностей спостереження кожного можливого значення. Визначення стану квантової частинки має на меті отримання всіх компонентів матриці густини системи і тому має вміщувати набір вимірювань розподілів ймовірностей різних несумісних спостережуваних.

Аналіз проблеми визначення стану доцільно розпочати з детального опису простору станів багатостанової системи. Квантова теорія зазвичай дозволяє спостережуванам мати не тільки дискретний, а й неперервний спектр, припускаючи тільки, що простір станів є гільбертовим, тобто має дискретний базис. З іншого боку, класична теорія інформації взагалі обмежується розглядом каналів переносу інформації, що характеризуються простором станів з дискретною кількістю точок. Квантовим узагальненням таких класичних каналів є квантові системи зі скінченним базисом простору станів, коли кожен вектор базису відповідає одному класичному стану каналу, а за рахунок квантових властивостей стве можливим існування суперпозиційних станів каналу.



### 3.1 Ймовірності і базиси

Набір підстанів (7), на які аналізатор проектує вимірюваний етап, є обов'язково повним (інакше частина станів взагалі лишиться непоміченою). Бажано також, аби цей набір був ортогональним (умова незалежності подій), а простір кожного з підстанів був одновимірним (умова повноти вимірювань). За цих умов кожен з підстанів є чистим і визначається вектором стану  $|k\rangle$ . Матриця густини такого стану

$$\hat{\rho}^{(k)} = |k\rangle \langle k| \quad (20)$$

має необхідні для проектора властивості

$$|k\rangle \langle k| |k'\rangle \langle k'| = |k\rangle \langle k| \delta_{k,k'}; \quad \sum_{k=1, \dots, N} |k\rangle \langle k| = \mathbb{I},$$

а вектори  $\{|k\rangle : k = 1, \dots, N\}$  утворюють базис простору станів.

Результатами вимірювання є ймовірності реєстрації кожного з базисних станів

$$p_k = \langle k | \hat{\rho} | k \rangle, \quad (21)$$

або значення  $N - 1$  моментів спостережуваної  $\hat{O}$  діагональної в цьому базисі

$$\hat{O} = \sum_{k=1, \dots, N} O_k |k\rangle \langle k|. \quad (22)$$

Моменти спостережуваної  $\langle \hat{O}^n \rangle = \text{Tr}(\hat{O}^n \hat{\rho})$  обчислюються за розподілом ймовірностей

$$\langle \hat{O}^n \rangle = \sum_{k=1, \dots, N} O_k^n \langle k | \hat{\rho} | k \rangle = \sum_{k=1, \dots, N} O_k^n p_k.$$

Якщо відомі значення всіх  $N - 1$  незалежних моментів (вони є незалежними, якщо всі власні значення матриці спостережуваної є різними), можна обчислити весь розподіл ймовірностей. Кількість потрібних вимірювань, точніше, точність оцінки ймовірностей або моментів спостережуваної визначається стандартними методами математичної статистики.

Таким чином, кожна спостережувана з не-виродженою системою власних значень породжує базис простору станів, асоційований з цією спостережуваною та набір проекторів на власні стани, що характеризує властивості станів, ре-дукованих в процесі вимірювання заданої спостережуваної.

### 3.2 Сходинкові оператори

Скінченновимірні простори станів практично довільної розмірності в квантовомеханічних задачах добре відомі – це незвідні представлення групи ізотропії тривимірного простору, що характеризуються певним значенням моменту імпульсу. Власні вектори оператора проекції моменту на задану вісь породжуються, як результат послідовної дії одного з спеціальних операторів  $\hat{L}_{\pm}$  на анулюючий вектор другого з цієї пари операторів.

Важливою для подальшого дослідження властивістю цих операторів є те, що подібний зв'язок між базисом простору станів і парою операторів може бути побудований для довільного базису.

Позначимо  $\{|k\rangle : k = 1, \dots, N\}$  довільним чином впорядкований базис  $N$ -вимірного простору станів розглядуваної квантової системи. Для кожного базису можна означити пару операторів  $\hat{L}_{\pm}$ , що зорганізують послідовність векторів базису – сходинкових операторів

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &\stackrel{\text{Def}}{=} \sum_{k=1}^N \sqrt{(N-k+1)} |k+1\rangle \langle k| \\ \hat{L}_- &\stackrel{\text{Def}}{=} \sum_{k=1}^N \sqrt{(N+1-k)} |k-1\rangle \langle k| \end{aligned} \quad (23)$$

Результатом дії оператора  $\hat{L}_+$  на довільний вектор  $|k\rangle$  є наступний вектор  $|k+1\rangle$  або нуль (якщо вектор мав найбільший номер). Так само результатом дії оператора  $\hat{L}_-$  на довільний вектор  $|k\rangle$  є попередній вектор  $|k-1\rangle$  або нуль (якщо вектор мав найменший номер). Оператор

$$\begin{aligned} \hat{L}_3 &\stackrel{\text{Def}}{=} (\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+)/2 \\ \hat{L}_3 &= \sum_{k=1}^N (k - (1+N)/2) |k\rangle \langle k| \end{aligned} \quad (24)$$

має вектори базису власними. Перенумерація  $|k\rangle \rightarrow |m = k - (1+N)/2\rangle ; m = -N/2, \dots, N/2$  доповнює аналогію між довільним базисом і базисом незвідного представлення групи ізотропії.

Важливо підкреслити, що оператори  $\hat{L}_{\pm}$  будуються для кожного ортогонального базису незалежно від того, має цей базис відношення до групи ізотропії справжнього простору, чи ні. Для кожного базису ці оператори задають послідовність векторів базису, тобто спосіб вишування базису. Якщо з фізичних міркувань виявляється необхідним змінити послідовність



векторів базису, потрібно одночасно змінювати сходишкові оператори базису – сходишкові оператори є асоційованими до базису простору станів.

Сходишкові оператори утворюють базис алгебри матриць в просторі станів. Оскільки спостережувані величини подаються ермітовими матрицями, довільна спостережувана має представлення нормально впорядкованою комбінацією сходишкових операторів

$$\hat{O} = \sum_{m,n=1}^N O_{m,n} \hat{L}_+^m \hat{L}_-^n; \quad O_{m,n} = O_{n,m}^* \quad (25)$$

Кожна спостережувана, що є діагональною в обраному базисі, має власні значення  $O_k$ , що інтерполюються функцією  $o(x)$  від власних значень  $k = (N+1)/2$  оператора  $\hat{L}_3$  і тому сама є тією ж функцією  $\hat{O} = o(\hat{L}_3)$  від цього оператора

$$\hat{O} = \sum_{\forall k} o(k - (1+N)/2) |k\rangle \otimes \langle k| \quad (26)$$

### 3.3 Аналізатори

Результатом взаємодії вимірюваної системи з аналізатором є редукція матриці густини системи до суміші власних станів аналізатора, тому аналізатор подається системою своїх власних векторів, або ж системою пов'язаних з цими векторами сходишкових операторів. Важливо зауважити, що система власних векторів аналізатора може бути впорядкована довільним чином і кожному впорядкуванню відповідає свій набір сходишкових операторів.

Для кожного аналізатора результатом вимірювання є розподіл ймовірностей  $\{p_k : k = 1 \dots N\}$ , або  $N-1$  моментів спостережуваної  $\hat{L}_3$ , що дають  $N-1$  дійсних чисел – незалежних характеристик матриці густини вимірюваного стану.

Довільна матриця густини, як ермітова матриця з одиничним слідом, має  $N^2 - 1$  незалежних дійсних параметрів –  $N-1$  незалежних значень діагональних елементів та  $N(N-1)/2$  комплексних значень над діагоналлю. Тому одна серія вимірювань, що дає тільки  $N-1$  значень параметрів стану, не може повністю визначити стан досліджуваної системи, потрібно  $N+1$  серій вимірювань, що використовують

суттєво різні базиси, тобто такі, що не перетворюються один в інший простою перестановкою векторів. Асоційовані цим базисам оператори  $\hat{L}_3^{\{m\}}$  повинні не комутувати один з іншим. Приклад такої послідовності взаємно некомутованих операторів легко побудувати, задавши послідовність кутів  $\phi^{\{m\}} = m\pi/(N+1)$ , тоді оператори

$$\hat{L}_3^{\{m\}} = \cos \phi^{\{m\}} \hat{L}_3 + \frac{\sin \phi^{\{m\}}}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-), \quad (27)$$

не комутують кожен з кожним

$$[\hat{L}_3^{\{m\}} \hat{L}_3^{\{n\}}] = \frac{\sin \phi^{\{m-n\}}}{2} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-), \quad (28)$$

і мають власними векторами послідовність потрібних базисів, а результати вимірювань кожної з спостережуваних  $\hat{L}_3^{\{m\}}$  визначають додатково  $N-1$  дійсних чисел – незалежних характеристик матриці густини вимірюваного стану. Загальна кількість вимірюваних величин співпадає з кількістю дійсних параметрів матриці густини і в такий спосіб отримується повна інформація про статистичні властивості стану квантового каналу переносу інформації.

Викладена схема задає реалізацію метода квантової томографії в застосуванні до довільної квантової системи зі скінченновимірним простором станів.

Наведені міркування свідчать, що повне вимірювання властивостей квантового стану неможливе без вимірювання несумісних спостережуваних. Наслідком цього є неможливість здійснення приладу, що був би здатний клонувати стан квантового каналу, тобто неможливість точного копіювання станів довільного квантового каналу переносу інформації. Винятком є канал, щодо якого заздалегідь відомо, який саме набір базисних станів використано в процесі підготовки стану. Саме такі канали з посередньою селекцією станів відповідають уявленням про властивості класичних каналів переносу інформації.

Продовження в наступному випуску.

### Література

- [1] V. Vedral and M.B. Plenio, Entanglement Measures and Purification Procedures, Phys.Rev. A **57** (1998) 1619-1633; quant-ph/9707035



- [2] S. Mancini, V. I. Man'ko, E. V. Shchukin, P. Tombesi, J. Opt. B: Quant. Semiclass. Opt. **5**, S333 (2003).
- [3] W.K. Wootters and B.D. Fields, Optimal state-determination by mutually unbiased measurements. *Ann. Physics*, 191:363-381, 1989.
- [4] G. Björk, J. L. Romero, A. B. Klimov and L. L. Sánchez-Soto, Mutually unbiased bases and discrete Wigner functions, quant-ph/0608173
- [5] R. Horodecki, M. Horodecki, Jaynes principle versus entanglement, quant-ph/9709010
- [6] C.H.Bennett, D.P.DiVincenzo, J.Smolín and W.K.Wootters, Phys.Rev A **54**, 3814 (1997)
- [7] P.Horodecki, Phys.Lett.A **232**, 333 (1997).
- [8] P.Horodecki, M.Horodecki and R.Horodecki, Phys.Rev.Lett. **80**, 5239-5242 (1998).
- [9] K.K.Manne and C.M.Caves, Entanglement of Formation of Rotationally Symmetric States, quant-ph/0506151.
- [10] W.K.Wootters, Phys.Rev Lett. **80**, 2245 (1998).
- [11] B. M. Terhal and K. G. H. Vollbrecht, Phys. Rev. Lett. **85**, 2625 (2000).
- [12] K. G. H. Vollbrecht and R. F. Werner, Phys. Rev. A **64**, 062307 (2002).
- [13] G. Giedke, M. M. Wolf, O. Krüger, R. F. Werner, and J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **91**, 107901 (2003).
- [14] J. Schliemann, Phys. Rev. A **68**, 012309 (2002).
- [15] Zyczkowski K. and Sommers H.-J., J. Phys. A **34**, 7111-7125 (2001)
- [16] H.P. Yuen, J.H. Shapiro, IEEE Trans. Inf. Theory **24**, 657 (1978);
- [17] J.H. Shapiro, H.P. Yuen, IEEE Trans. Inf. Theory **25**, 179 (1979);
- [18] H.P. Yuen, J.H. Shapiro, IEEE Trans. Inf. Theory **26**, 78 (1980).
- [19] D.T. Smithey, M. Beck, M.G. Raymer, A. Faridani, Phys. Rev. Lett. **70**, 1244 (1993).
- [20] D.-G. Welsch, W. Vogel, T. Opatrny, Progr. Opt. **39**, 63 (1999).

Надійшла до редакції 14 лютого 2007 р.



УДК: 539.171

Чалий О.В., д.ф.-м.н., проф.,  
Чалий К.О., д.ф.-м.н., доц.

## Розмірні залежності критичних параметрів та фізичних властивостей просторово обмежених рідин

*Вивчені залежності критичних параметрів та фізичних властивостей просторово обмежених рідин (ПОР) від характерних лінійних розмірів рідинних систем різної геометрії. Проведений критичний аналіз робіт, де досліджувався зсув критичної температури ПОР.*

*Ключові слова: критична явища, рідини, просторова обмежена геометрія, зсув критичної температури*

*E-mail: avchal@iitp.kiev.ua, kirchal@univ.kiev.ua*

Синтез двох сучасних фізичних напрямів – фізики наносистем та фізики фазових переходів – продовжує викликати підвищений інтерес, який в останні роки все ширше розповсюджується на рідинні системи. В цій роботі головна увага буде приділена принциповим питанням дослідження розмірних ефектів в критичній поведінці фізичних властивостей просторово обмежених рідин (ПОР).

**Кореляційні властивості ПОР.** Послідовний теоретичний розгляд за допомогою методів статистичної фізики рідинних систем, в яких мають місце критичні явища, вимагає знаходження парної кореляційної функції (КФ)  $G_2$  флуктуацій параметра порядку (в індивідуальних рідинах – флуктуацій густини). Як відомо, для просторово необмежених середовищ існує декілька способів одержання КФ  $G_2$ , що використовують методи скейлінгової теорії [1], ренормалізаційної групи [2] та інші підходи. Для ПОР досить ефективним виявився метод розрахунку КФ  $G_2$  як функції Гріна оператора Гельмгольца з певними граничними умовами на поверхнях, що обмежують малий об'єм рідини в заданій геометрії (див., наприклад, [3] та посилання в ній). Цей метод, зокрема, майже п'ятнадцять років тому був використаний для знаходження КФ  $G_2$  флуктуацій густини ПОР в циліндричному зразку [4], що має малий радіус  $a$  площині  $x, y$  та одночасно великий (порівняно з радіусом кореляції  $\xi$ ) лінійний розмір вздовж вісі циліндру  $z$ . При обчисленнях були використані однорідні

Chalyi A., Dr., Prof.,  
Chalyi K., Dr., As.Prof.

## Dimensional dependences of critical parameters and physical properties in finite-size liquids

*Dependences of critical parameters and physical properties of finite-size liquids (FSL) on linear sizes of liquid systems are examined. Critical analysis is given concerning studies of the shift of the critical temperature in FSL.*

*Keywords: critical phenomena, liquids, reduced geometry, shift of the critical temperature.*

граничні умови  $G_2(a, z) = 0$  на боковій поверхні  $r = a$ . Із отриманих точних результатів для КФ  $G_2$  може бути записаний такий наближений вираз:

$$G_2(r, z) \sim J_0(\mu_1 r / a) \exp \left[ -\sqrt{\Lambda_0^2 \tau^{2\nu} + \mu_1^2 / a^2} |z| \right] \quad (1)$$

Тут  $J_0(u)$  – циліндрична функція Беселя нульового порядку,  $\mu_1 = 0,24048$  – її перший корінь, а  $\Lambda_0 = 1/\xi_0$  – обернене значення амплітуди радіуса кореляції, яке в класичних рідинах має порядок  $\Lambda_0 \approx 10 \text{ нм}^{-1}$ . В рідинах біологічної природи  $\xi_0$  має порядок амплітуди радіуса Флорі, яка може бути суттєво більшою за величиною порівняно з класичними рідинами [5].

Оскільки в загальному випадку КФ  $G_2$  ПОР не має експоненціального вигляду, то природно визначити радіус кореляції  $\xi$  флуктуацій густини за допомогою наступного співвідношення:  $\xi = (M_2)^{1/2}$ , де  $M_2$  – нормований другий просторовий момент КФ  $G_2$ . Враховуючи основний внесок (1) до КФ  $G_2$ , можна отримати такий вираз для радіуса кореляції  $\xi$  у випадку ПОР циліндричної геометрії [3,4]:

$$\xi = \xi_0 [\tau + (\mu_1 \xi_0 / a)^{1/\nu} (1 + \tau)]^{-\nu} \quad (2)$$

З формули (2) випливає, що на відміну від просторово необмежених рідин, для яких радіус кореляції  $\xi$  аномально зростає при досягненні критичної температури ( $\tau = 0$ ), в циліндричному зразку ПОР з нульовою граничною умовою для КФ  $G_2$  на поверхні  $r = a$  значення  $\xi(\tau = 0)$  залишається скінченим.



У зв'язку з наведеними формулами (1) і (2) зробимо наступні зауваження, які будуть важливими для подальшого обговорення:

1. Цілком природно, що КФ  $G_2$  для ПОР не співпадає з відомою із теорії фазових переходів КФ  $G_2$  для просторово необмежених рідин, яка відповідає апроксимації Оріштейна-Церніке (ОЦ). Необхідний граничний перехід до наближення ОЦ забезпечується лише у випадку, коли радіус циліндру стає достатньо великим порівняно з радіусом кореляції ( $a \gg \xi$ ), як впливає з наведеної нижче формули

$$G_2 \rightarrow \int_1^\infty e^{-v|z|} J_0(r\sqrt{v^2 - \Lambda^2}) dv = \frac{\exp(-\Lambda\sqrt{r^2 + z^2})}{\sqrt{r^2 + z^2}},$$

2. Отриманий в [3] загальний вираз для КФ  $G_2$  в ПОР демонструє осцилюючу та поступово спадаючу при зростанні аргументу  $r$  зміну КФ  $G_2(r, z)$ , а звідси й радіальної функції розподілу  $g=1+G_2$ . Цей результат, який можна інтерпретувати як просторове впорядкування всередині циліндричного зразку, знаходить своє підтвердження в результатах чисельного моделювання радіальної функції розподілу  $g(r)$  за допомогою методу Монте-Карло для ПОР [6].

3. Зрозуміло, що зміна граничних умов та геометрії ПОР, а також так званого геометричного фактора  $K$ , який визначає відношення характерного лінійного розміру ПОР  $L$  до амплітуди радіуса кореляції  $\xi_0$  (для циліндричних ПОР геометричний фактор  $K = a/\xi_0$ ), може самим суттєвим чином вплинути на аналітичний вигляд КФ  $G_2$ , радіуса кореляції  $\xi$  та, відповідно, на критичні параметри і фізичні властивості ПОР. Прямим підтвердженням цього висновку є результати, отримані не тільки для циліндричних ПОР, але й для ПОР з геометрією плоского прошарку [7], паралелепіпеда [8], сфери [9]. Таким чином, до поняття певного класу універсальності просторово обмеженої системи необхідно включити всі вказані ознаки (однакові граничні умови, однаковий тип геометрії, однакові значення геометричного фактору), які є додатковими до відомих ознак класів універсальності просторово необмежених рідин (однакова просторова розмірність, однакова розмірність параметра порядку, однаковий тип міжмолекулярної взаємодії в сенсі її коротко- або далекосяжності, однакова симетрія гамільтоніана чи флуктуаційної частини відповідного термодинамічного потенціалу). Саме тільки у випадку, коли всі зазначені ознаки виконуються разом, критична поведінка просторово обмежених систем різної природи (ПОР, просторово обмежених магнетиків,

мезомасштабних медико-біологічних об'єктів тощо) стає схожою, тобто універсальною (ізоморфною) [10].

**Розмірні залежності фізичних властивостей ПОР.** Зупинимось спочатку на вивченні розмірної залежності тих фізичних властивостей ПОР, які характеризуються аномальним зростанням в об'ємній фазі. До таких величин відносяться ізотермічна стисливість (в загальному випадку – сприйнятливості системи), ізохорна та ізобарна теплоємності, радіус кореляції тощо. Для визначеності розглянемо критичну поведінку ізотермічної стисливості  $\beta_1$  ПОР з геометрією довгого паралелепіпеда квадратного перерізу (див. деталі в [8]). Для характеристики просторової обмеженості такої системи введемо геометричний фактор  $K = L_1/\xi_0$ , де  $L_1$  – довжина короткої сторони паралелепіпеда, причому  $L_1 \ll L_2$  ( $L_2$  – довга сторона). Залежність ізотермічної стисливості  $\beta_1$  від температурної змінної  $\tau$  і геометричного фактору  $K$  описується формулою

$$\beta_1 = (\beta_T)_0 \left[ \tau + (2\sqrt{2}\pi/K)^{1/2} (1+\tau) \right]^\tau, \quad (3)$$

де  $(\beta_T)_0$  – амплітуда ізотермічної стисливості. Вираз в квадратних дужках позначимо через  $\tau(K)$ . Це є нова температурна змінна ПОР, яка задає відхилення критичної температури  $T_c(K)$  обмеженої рідини від критичної температури  $T_c$  об'ємної фази, тобто  $\tau(K) = [T_c(K) - T_c]/T_c(K)$ . Слід зазначити, що для ПОР іншої геометрії вирази для температурної змінної мають такий вигляд:  $\tau(H) = \tau + (\pi\xi_0/H)^{1/2} (1+\tau)$  для циліндроподібної пори з товщиною  $H$ ;  $\tau(a) = \tau + (\mu_1\xi_0/a)^{1/2} (1+\tau)$  для циліндричної пори радіуса  $a$ .

1. Розглянемо *закритичну область*, в якій температура  $T$  задовольняє нерівності  $T > T_c > T_c(K)$ . Рис. 1 ілюструє цей 1-й випадок, де закритичній області відповідає в якості приклада температура  $T_1$ , яка перевищує критичні температури рідини в необмеженій і обмеженій геометрії. Тоді маємо такі співвідношення:

$$\tau = \frac{T_1 - T_c}{T_c} > 0, \quad \tau(K) = \frac{T_1 - T_c(K)}{T_c(K)}$$

$$\tau + (2\sqrt{2}\pi/K)^{1/2} (1+\tau) > 0, \quad (2\sqrt{2}\pi/K)^{1/2} (1+\tau) = \tau(K) - \tau = \frac{T}{T_c(K)} - \frac{T}{T_c} =$$

$$T \frac{T_c - T_c(K)}{T_c T_c(K)} > 0, \text{ звідки похідна}$$



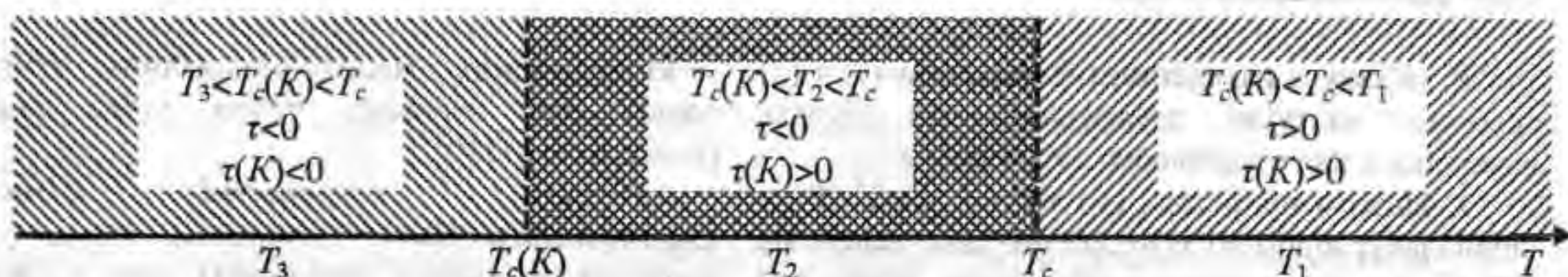


Рис. 1. Закритична ( $T_1$ ), проміжна ( $T_2$ ) та докритична ( $T_3$ ) області індивідуальної рідини в обмеженій геометрії.

$$\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T = \frac{\gamma}{\nu} \beta_T \frac{(2\sqrt{2}\pi/K)^{1/\nu} (1+\tau)}{\tau(K)K} > 0. \quad (4)$$

Таким чином, у закритичній області із збільшенням лінійного розміру обмеженої рідини (короткої сторони  $L_1$  паралелепіпеду, товщини  $H$  щілиноподібної пори, радіуса  $a$  циліндричної пори) ізотермічна стисливість  $\beta_T$  зростає, наближаючись за умови  $L_1, H, a \gg \xi$  до свого об'ємного значення  $(\beta_T)_{bulk}$  знизу.

Додатковим аргументом щодо вірності отриманих результатів для розмірної залежності ізотермічної стисливості рідин слугують розрахунки ефектів просторової обмеженості, виконані в [8,10]. Вони підтверджують той висновок, що у закритичній області зменшення лінійних розмірів призводять до зменшення радіусу кореляції  $\xi$  флуктуацій густини і, як наслідок, до зменшення ізотермічної стисливості  $\beta_T$  рідинних систем (в загальному випадку – сприйнятливості  $\chi$ ). Це твердження пояснюється в термінах скейлінгової формули  $\beta_T \sim \xi^{2-\eta}$ , де критичний індекс  $\eta$  аномальної розмірності парною кореляційною функції (КФ)  $G_2$  приймає такі значення:  $\eta=0$  в наближенні Орнштейна-Церніке,  $\eta=0,037 + O(\epsilon^5)$  в методі  $\epsilon$ -розкладів, де  $\epsilon = 4 - d$  ( $d$  – просторова розмірність системи) [2]. Експериментальне значення критичного індексу  $\eta \approx 0,05$ . Наведена формула є прямим наслідком співвідношення між ізотермічною стисливістю рідини  $\beta_T$  та КФ  $G_2$ , яке визначається "теоремою стисливості":  $\rho k_B T \beta_T = 1 + [G_2(r) dr]$ .

2. Далі проаналізуємо залежність ізотермічної стисливості обмеженої рідини  $\beta_T$  від геометричного фактору  $K$ , коли температура  $T$  рідинної системи в точності співпадає з критичною температурою  $T_c$  об'ємної фази, тобто при  $\tau = (T - T_c)/T_c = 0$ . В цьому випадку маємо  $\tau(K) = [T_c - T_c(K)]/T_c(K) = (2\sqrt{2}\pi/K)^{1/\nu} > 0$ , а для похідної ізотермічної стисливості  $\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T$  отримусмо з використанням відомої тотожності

між критичними індексами  $\gamma = \nu(2 - \eta)$  такий вираз:  $\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T \sim K^{(\gamma/\nu)-1} \sim K^{1-\eta} > 0$ . Це

співвідношення показує, що ізотермічна стисливість зростає приблизно за квадратичним законом із збільшенням лінійного розміру ПОР, оскільки  $\beta_T \propto K^{2-\eta}$ , де  $2 - \eta \approx 1,95$ .

3. Тепер розглянемо таку ситуацію, коли температура  $T_2$  в ПОР (рис. 1) знаходиться між критичними температурами необмеженої та обмеженої рідини:  $T_c(K) < T_2 < T_c$ . Іншими словами, рідинна система перебуває одночасно у закритичній області обмеженої системи та у докритичній області об'ємної рідинної фази. В цьому випадку маємо такі співвідношення:

$$\tau = \frac{T_2 - T_c}{T_c} < 0, \quad \tau(K) = \frac{T_2 - T_c(K)}{T_c(K)} > 0,$$

$$\tau(K) = -|\tau| + (2\sqrt{2}\pi/K)^{1/\nu} (1 - |\tau|), \quad (|\tau| < 1),$$

$$\tau(K) - \tau = \frac{T_2}{T_c(K)} - \frac{T_2}{T_c} = T_2 \frac{T_c - T_c(K)}{T_c T_c(K)} > 0.$$

Звідси випливає, що похідна  $\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T$  зберігає той же знак, що і в попередніх двох випадках, а саме:  $\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T = \beta_T \frac{\gamma}{\nu} \frac{\tau(K) - \tau}{\tau(K)\tau} > 0$ . Таким чином, залишається в силі зроблений вище висновок щодо збільшення ізотермічної стисливості до свого об'ємного значення при зростанні геометричного фактору  $K$ .

4. Нарешті, розглянемо випадок, коли температура ПОР відповідає докритичному стану як в необмеженій, так і в обмеженій геометрії. На рис. 1 така температура позначена через  $T_3$ , причому  $T_3 < T_c(K) < T_c$ . В цьому разі знак похідної  $\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T$  змінюється на протилежний. Дійсно, для докритичного стану рідинної системи маємо  $\tau = \frac{T_3 - T_c}{T_c} < 0$ ,  $\tau(K) = \frac{T_3 - T_c(K)}{T_c(K)} < 0$ ,  $|\tau| - |\tau(K)| = \left(\frac{2\sqrt{2}\pi}{K}\right)^{1/\nu} (1 - |\tau|) > 0$ ,



що дає для похідної  $\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T$  такий вираз:

$$\left(\frac{\partial \beta_T}{\partial K}\right)_T = -\frac{\gamma \beta_T (1 + \tau) - |\tau(K)|}{\nu K |\tau(K)|} < 0.$$

Таким чином, у докритичній області температур ізотермічна стисливість наближається до об'ємного значення зверху при зростанні лінійного розміру ПОР. Підкреслимо, що зроблені висновки відносно розмірної залежності ізотермічної стисливості ПОР розповсюджуються також на всі рівноважні та нерівноважні властивості обмежених систем різної природи та різної геометрії за умови, що йдеться про ті властивості, які в об'ємній фазі мають сингулярності (розбіжності) за скейлінговими степеневими законами з від'ємними показниками (без врахування ефектів просторової і часової дисперсії).

Заключне зауваження в цьому підрозділі стосується вивчення розмірної залежності тих властивостей ПОР, які прямують до нуля з наближенням до критичних точок в об'ємній фазі. До таких величин відносяться обернена ізотермічна стисливість (або обернена сприйнятливості системи), яка пояснює обертання в нуль коефіцієнта самодифузії при досягненні критичної точки за умови нехтування ефектами просторової нелокальності та пам'яті. Прикладами подібних величин є також швидкість звуку, коефіцієнт температуропровідності тощо.

Для визначеності розглянемо критичну поведінку коефіцієнту самодифузії  $D$  для ПОР циліндричної геометрії. За певних умов коефіцієнт самодифузії характеризується такою формулою [12]:

$$D = D_0 \left[ \tau + \left( \frac{\mu_1 \xi_0}{a} \right)^{1/\nu} (1 + \tau) \right]^\gamma. \quad (5)$$

де  $D_0$  – амплітуда коефіцієнту самодифузії. Оскільки єдина принципова відміна формули (5) від розглянутого вище виразу (3) для ізотермічної стисливості полягає в зміні знаку показника степеня перед критичним індексом  $\gamma$  (звичайно, зміна геометричного фактору  $K$  не є в цьому випадку принциповою), то це приводить до природного наслідку – заміни всіх попередніх висновків на прямо протилежні. Так, в докритичній області коефіцієнт самодифузії повинен зростати зі збільшенням радіусу пори  $a$ , що підтверджується прямими теоретичними розрахунками та результатами експериментальних досліджень (див. деталі в [12,13]).

### Розрахунки критичної температури ПОР.

На закінчення коротко торкнемось проблеми зсуву критичних параметрів (зокрема, критичної температури) ПОР у зв'язку з теоретичними роботами [14-16].

Як відомо (див., наприклад, [3,4,9,10], де містяться також посилання на попередні дослідження цієї проблеми), критична температура ПОР  $T_c(K)$ , якій відповідає екстремум в температурній залежності певної фізичної властивості, виявляється меншою за критичну температуру  $T_c$  рідини в об'ємній фазі. Для визначення зсувів критичної температури  $\Delta T_c(K) = T_c - T_c(K)$  та інших критичних параметрів ПОР (густини, зовнішнього поля тощо), по результатах аналізу поведінки КФ  $G_2$  для ПОР різної геометрії, були отримані формули вигляду  $\Delta \tau(K) = [\Delta T_c(K)/T_c(K)] = f(L)^{1/\nu}$ , де функція  $f(L)$  приймає різні значення в залежності від геометрії ПОР. Так,  $f(L) = \pi \xi_0 / H$  для щілиноподібної пори завтовшки  $H$ ,  $f(L) = \mu_1 \xi_0 / a$  для циліндричної пори радіусу  $a$ . Слід зазначити, що ці формули 1) повністю узгоджуються із загальними висновками гіпотези скейлінгу для просторово обмежених систем [17,18]; 2) фактично не містять підгонюваних параметрів, оскільки коефіцієнти в формулах безпосередньо визначаються розв'язками відповідних диференціальних рівнянь і природним чином залежать від геометрії кожної конкретної задачі. Тому твердження про те, що при одержанні співвідношення для величини зсуву критичної температури в [9,10] було задано наперед значення радіусу кореляції  $R_c = L/\pi$  поблизу нової критичної температури, є помилковим та віддзеркалює, як і в деяких інших коментарях, лише власні недоведені припущення автора роботи [16].

В [16] стверджується також, що розрахунки зсувів  $\Delta T_c(K)$ , проведені в [9,10], базуються на використанні КФ наближення ОЦ, яка слідує з класичної теорії критичних явищ Ландау. Цей висновок є, безумовно, помилковим принаймні через дві причини: 1) для розрахунків  $\Delta T_c(K)$  в [9,10] були використані не КФ  $G_2$  наближення ОЦ, а відповідні КФ  $G_2$  для ПОР (див., наприклад, формулу (1)); 2) класична теорія критичних явищ Ландау, як відомо, не враховує флуктуацій, і тому з неї не може слідувати теорія критичних флуктуацій ОЦ.

Крім того, автор [16] помилково скористався для обчислень значенням амплітуди радіуса кореляції  $\xi_0 = 0.36$  нм в рідкому  $^4\text{He}$  для області нижче температури  $\lambda$ -переходу (замість



потрібного в даному випадку значення  $\xi_0=0,14$  нм, отриманого в [19] для області вище температури  $\lambda$ -переходу та використаного в [20,21]). Ця помилка суттєво впливає на результати розрахунків [16], змінюючи їх в багато разів. Тому наведені в порівняльній таблиці [16] чисельні значення розрахунків температурного зсуву в тонких шарах гелію насправді є невірними. Натомість, як легко перевірити, коректні розрахунки, які задовільно описують експериментальні дані щодо особливостей теплоємності та зсуву температури  $\lambda$ -переходу рідкого  $^4\text{He}$  для широкого інтервалу розмірів мезопор діаметром від 30 нм до 8,17 мкм в циліндричній геометрії та для тонких плівок товщиною від 48 нм до 57 мкм, в тому числі експерименту, проведеного в умовах мікрогравітації на навколоземній орбіті [22], були опубліковані в [20,21] та представлені в [10]. Таким чином, всі основні висновки роботи [16] не відповідають дійсності.

Що стосується результатів, отриманих в [14,15], то вони також мають теоретичні та методичні помилки. Наведемо деякі з них.

1. Висновок [14,15] та багатьох інших публікацій автора [14-16] про те, що середня густина флуктуацій  $\rho_f=(2\div 3)\rho_c$ , є невірним через те, що середнє значення лінійної флуктуації густини  $\langle \rho - \rho_c \rangle = 0$ , якщо для усереднення використовувати функцію розподілу флуктуацій, яка містить скалярні інваріанти параметру порядку в рідинних системах.

2. Так саме невірним є твердження автора [14], що обмеженими системами поблизу критичної точки слід вважати лише такі, в яких кількість флуктуацій дорівнює  $N_f \approx 1\div 3$ . Це твердження знаходиться в очевидному протиріччі з фундаментальними положеннями статистичної фізики.

3. На підставі результатів експериментальних досліджень гравітаційного ефекту в рідинах автором [14-16] було запропоновано в свій час (див., наприклад, [23]) ввести в польову змінну  $h$  деяке гіпотетичне внутрішнє поле, яке відповідає за взаємодію флуктуацій густини. Разом з тим зрозуміло, що ніякого подібного внутрішнього поля, додаткового до звичайної міжмолекулярної взаємодії, існувати не може.

4. Для коректної теоретичної інтерпретації експериментальних даних [23] обов'язково необхідно брати до уваги вплив температурних градієнтів, які дають суттєвий внесок в польову змінну  $h$ , враховуючи конструктивні особливості – скляні вікна в металевому корпусі камери, в якій проводяться експерименти по

гравітаційному ефекту в критичній області. До речі, лінійні розміри цієї камери є цілком макроскопічними ( $L \approx 10$  см), що не дозволяє використовувати отримані експериментальні результати для дослідження критичних явищ в ПОР.

### Список використаних джерел

1. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 1982. – 382 с.
2. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и  $\epsilon$ -разложение. – М.: Мир, 1980.
3. Чалий О.В., Цехмістер Я.В., Чалий К.О. Процеси впорядкування та самоорганізації у флуктуаційних моделях відкритих систем. – К.: Віпол, 2001. – 224 с.
4. Чалий К.О., Чалий О.В. Критичні явища в просторово обмежених середовищах циліндричної геометрії // УФЖ, –1992, –Т.37, №9. –С.1434-1440.
5. де Жен П. Идеи скейлинга в физике полимеров. – М.: Мир, 1982. – 368 с.
6. Антонченко В.Я., Булавин Л.А., Давыдов А.С., Ильин В.В. Основы физики воды. – К.: Наукова думка, 1991.
7. Chalyi A.V., Chalyi K.A., Chernenko L.M., Vasil'ev A.N. Critical behaviour of confined systems // Cond. Matt. Phys., –2000. –V. 3, № 2(22), –P. 335-358.
8. Chalyu K.A. Model of Choline Receptor: Properties of Liquid System with Geometry of the Long Bar // Phys. of Alive, –2003, –V. 11, № 1. –P. 51-57.
9. Чалий К.О. Специфіка критичних явищ в малих об'ємах рідин. Дис. канд. фіз.-мат. наук. 1996.
10. Чалий К.О. Рівноважні та нерівноважні властивості мезомасштабних рідинних систем в критичній області. Дис. докт. фіз.-мат.наук. 2006.
11. Чалий К.О. Класи універсальності для просторово обмежених систем різної природи в контексті розвитку нанотехнологій та наномедицини // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки, –2005. №2. –С. 378-385.
12. Булавін Л.А., Чалий К.О. Вплив просторової обмеженості на самодифузію молекул води в пористому склі // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2006, № 1, – С. 328-337.



13. Булавін Л.А., Кармазіна Т.В., Кленко В.В., Слісенко В.І. Нейтронна спектроскопія конденсованих середовищ. –К.: Академперіодика, 2005. –640 с.
14. Альохін О.Д. Радіус кореляції і рівняння стану обмежених систем поблизу критичної точки // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2006, № 1, – С. 315-317.
15. Альохін О.Д. Властивості малих нанофлуктуаційних систем поблизу критичної точки // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2006, № 3, – С. 399-401.
16. Альохін О.Д. Розрахунки критичних температур малих обмежених систем // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2006, № 4, – С. 357-359.
17. Fisher M.E. In “Critical Phenomena”. Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi”, –V. 51 / Ed. M.S. Green. –New York: Academic, 1971.
18. Binder K. Phase transitions in reduced deometry // Annu. Rev. Phys. Chem., –1992, –V. 43, –P. 33-59.
19. Singhaas A., Ahlers G. Universality of static properties near the superfluid transition in  $^4\text{He}$  // Phys. Rev. B, –1984, –V. 30, # 9, –P. 5103-5115.
20. Chalyy K.A. Heat capacity of cylindrically confined helium: theoretical predictions versus experimental data // Low Temp. Phys. –2004. –Vol. 30, № 9, –P. 686-690; Fiz. Nizk. Temp. –2004. –Vol. 30, № 9, –P. 913-919.
21. Чалий К.О. Особливості теплоємності обмеженого рідкого гелію  $^4\text{He}$  поблизу  $\lambda$ -точки в плоских мезомасштабних порах // УФЖ. –2006, –Т. 51, № 9, –С. 863-868.
22. Lipa J.A., Swanson D.R., Nissen J.A., Geng Z.K., Williamson P.R., Stricker D.A., Chui T.C.P., Israelsson U.E., Larson M. Specific Heat of Helium Confined to a 57- $\mu\text{m}$  Planar Geometry near the Lambda Point // Phys. Rev. Lett., –2000, –V. 84, –P. 4894-4897.
23. Альохін О., Рудніков Є. Гравітаційний ефект у високотемпературних рідинах поблизу критичної точки // ЖФД, –2004, –Т. 8, № 2, –С. 103-121.

Надійшла до редакції 12.03.2007



111-401 34-19987D  
1005-282-C-3713  
K.O. Brown  
Harrisburg, Pa.

Міщенко О.М.  
вського, 2  
-60

Видруковано ФОП Цибенко О.М.  
адреса: вул. Якубовського, 2  
тел.: 360-26-60



Наукова бібліотека  
ім. М. Максимовича  
**КНУ**  
ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



**12823JB**

45 чит зал періодики та дисерт Ц. 20.00



