

05(К УН)
Вісн



ВІСНИК

КИЇВСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Випуск № 2

КИЇВ 2007

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК № 2, червень 2007

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ
ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12829JB

40 - чиф. зап. періодична та дисерт. Ц. 20 00

Редакційна колегія:

- **Головний редактор** – **Булавін Леонід Анатолійович**, академік НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор
- **Відповідальний секретар** – **Анісімова Тетяна Харитонівна**, старший науковий співробітник

Члени редколегії:

- **Адаменко Ірина Іванівна**, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Акименко Віталій Володимирович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Анісімов Анатолій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Анісімов Ігор Олексійович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет);
- **Гарашенко Федір Григорович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Єжов Станіслав Миколайович**, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Кириченко Володимир Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Козаченко Юрій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Левитський Сергій Михайлович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет);
- **Макара Володимир Арсенійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Мелешко В'ячеслав Володимирович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Перестюк Микола Олексійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Попов Юрій Дмитрович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Скришевський Валерій Антонович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет).

Друкується за рекомендаціями Вчених Рад фізичного, радіофізичного, механіко-математичного факультетів та факультету кібернетики.

Адреса редакційної колегії:

03022, вул. Глушкова, 2, корп. 6,
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
факультет кібернетики,
тел. (044) 259-01-49

ISBN 966-76-52-00-9

З М І С Т

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Каліон В.А., Каліон В.В. Математичне моделювання ймовірності банкрутства страхової компанії за умови перестрахування	9
Леонов Ю.Г., Ясинський В.В. Про зображення кратних вінцевих добутків груп Z_2	14
Масютка О.Ю. Про задачу екстраполяції векторної стаціонарної послідовності	18
Немчанінова Т.М. Групи Групи з нескінченним центральним нециклічним метациклічним комунтантом	21
Погоріляк О.О. Моделювання подвійно стохастичних процесів Пуассона з певною точністю та надійністю	29
Тегза А.М. Побудова моделі гауссового однорідного ізотропного випадкового поля з заданими точністю і надійністю в L_p , $1 \leq p \leq 2$	33
Швилов В.В. Про число ідеалів кільця верхніх трикутних матриць	36

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Балога С.І. Асимптотика розв'язків L-діагональних систем	43
Гавриленко О.В. Осесиметрична задача співудару твердого сферичного тіла з поверхнею каверни	47
Доля О.В., Червінко О.П., Сенченков І.К. Вібродозігрів шаруватої пружно-в'язкопружної прямокутної призми при високочастотному силовому навантаженні	54
Калайда О.Ф. Симетричні двосторонні локальні та нелокальні кубічні сплайни	59
Карнаухов В.Г., Карнаухова Т.В., П'ятецька О.В. Вплив деформацій зсуву на активне демпфірування вимушених гармонічних коливань прямокутної пластини з шарнірним закріпленням торців за допомогою ортотропних актуаторів	62
Константінов О.В. Нелінійна динаміка системи резервуар-рідина в умовах слабкої гравітації	65
Крєневич А.П. Про стохастичні рівняння не розв'язані відносно "похідної" в гільбертовому просторі	70
Лісняк В.С. Неголономна геометрія в її головних висновках	74
Михайленко В.В., П'ятецький В.О., Лушиков О.В. Про структуру амплітудних визначальних рівнянь непружних п'єзоелектричних тіл при гармонічному навантаженні	80
Мольченко Л.В., Лоос І.І., Індіамінов Р.Ш. Магнітопружність конічної оболонки з врахуванням ортотропної електропровідності в	85

геометрично нелінійній постановці	
Моєсєнков Ю.Б. Постановка задачі та структура асимптотичних розв'язків при дослідженні одно- та багаточастотних режимів коливань в збурених системах з розподіленими параметрами	91
КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА	
Антонюк М.А. Інформаційні технології переводять освіту на якісно новий рівень	97
Бейко І.В., Бодачівська Л.Ю., Зінько П.М. Системний аналіз процесів підвищення техніко-експлуатаційних характеристик свердловин	101
Бомба А.Я., Скопєцький В.В. Просторові нелінійні сингулярно збурені крайові задачі типу «конвекція-дифузія» в анізотропних середовищах	105
Братійчук А.М. Точні зображення для характеристик системи $M^6/G/1/b$ відновлюючим рівнем вхідного потоку	114
Власюк А.П., Мартинюк П.М., Федорчук Н.А. Двовимірна задача фільтраційної консолідації ґрунту з урахуванням повзучості його скелету в умовах тепло-солепереносу	121
Головач В.М. Мінімаксне оцінювання детермінованих даних лінеаризованої задачі Нав'є-Стокса в умовах невизначеності	127
Горбачук В.М., Гаркуша Н.І. Рівноважні зміщені стратегії кооперації та узагальнення лідерства дуополії	131
Горіщина І.А., Годовніков М.В. Аналіз методів визначення базової інфляції	135
Горностай М.П. Про застосування кластерного аналізу до побудови інформаційних систем, здатних навчатися	139
Іванов Є.В., Карнаух Т.О. Алгоритмічні властивості області визначення функцій, заданих скінченними R -перетворювачами	145
Іванов І.Ю. Генерація схеми RSA в умовах обмеженості обчислювальних ресурсів	148
Іксанов О.М. Про інтегро-функціональне рівняння, пов'язане з нерухомими точками згладжуючих перетворень	151
Касьянюк В.С., Польща М.В. Застосування теорії можливостей в задачах кластеризації даних	155
Кудін В.І., Оноцький В.В. Про точний алгоритм методу базисних матриць	160
Кудін Г.І., Бублик С.Б. Синтез лінійних дискретних систем керування з крайовими умовами засобами псевдообернення. II	164
Лебєдєв С.О., Прищєна О.В. Стохастичні системи із повторними викликами та нетерплячими вимогами	169
Маляр М.М., Баранник В.Ф. Спосіб згортки цільових функцій для задач вибору	174
Росохата П.О., Росохатий В.К. Різницеві схеми для моделювання біосенсорних систем	177
Рубльов Б.В. Порівняння метрики дотичних та метрики Хаусдорфа	181
Савкіна М.Ю. Існування оцінки метода найменших квадратів параметрів моделі нелінійної сплаймової регресії	186
Сухтасєва А.М., Хаджиєв Дж. О классах полугрупп, определяемых с	192

помощью инвариантных линейных функционалов	
Яценко В.О., Семенів О.В., Кашіпровський О.І. Моделювання спектральних кривих та оцінювання вмісту хлорофілу в рослинності	200

РАДІОФІЗИКА

Афанас'єва Т.В., Гринчук О.А., Коваль І.П., Находкін М.Г. Адсорбція кисню на поверхні Ge/Si(001)	207
Барчук О.І., Оберемок С.А., Родіонова Т.В., Савенков С.М. Поляризаційні характеристики структур полікремнієвих плівок	211
Білоусов І.В. Формування силіцидного шару в двовимірних дефектах на поверхні кремнію	219
Брендель М.О., Данилов В.В., Макаров Д.Г., Нечипорук О.Ю. FDTD- аналіз проходження електро-магнітної хвилі крізь структуру з фотонною забороненою зоною	223
Гайдай* Ю.О., Ковторов А.М., Сидоренко В.С., Сирота А.В., Ляшенко О.С. Невзаємний фазовий зсув для ТМ-мод у плівках ферит- гранатів	227
Жарких Ю.С., Лисоченко С.В., Третяк О.В. Формування плівок аерогелю кремнезему на поверхні кремнію	231
Зубков В.В., Баужа О.С. Магнітні властивості квантових точок із врахуванням спин-орбітальної взаємодії.	235
Зушко А.В., Мусатенко Ю.С., Курашов В.П. Стиснення відео для втратних мереж на основі мультиописів у просторі хвильового та Карунена-Лоева перетворень	241
Іванюта О.М., Прокопенко О.В. НВЧ аналізатор біоактивних рідин	248
Кисіль О.О., Спориш І.М. Фотоніка ДНК/C ₆₀ супрамолекул в водних флюїдах для наномедицини	253
Кононов М. В., Радченко С. П., Скриначенко З. М., Айдоян Г. В. Застосування оцінок флуктуаційного розсіяння ультразвукових хвиль для класифікації статистично-неоднорідних середовищ	258
Коротков П.А., Фелінський Г. С. Аналіз спектрів комбінаційного розсіяння кристала ніобату літію та аморфних кварцових волокон	263
Мельник П.В., Находкін М.Г., Федорченко М.І. Формування та електронні властивості інтерфейсу Sb/Ge(111)	271
Місник А.В., Кононов* М.В. Прогнозування втрат пакетів у телекомунікаційній інфраструктурі за флуктуацією затримки	277
Павлюк С.П., Савицький С., Солтис Р., Тіщенко І. Збільшення прямого опору кристала напівпровідникового ліода при екстремально великих прямих ударних струмах	281
Пархоменко Д. А., Усков С.А., Смирнов С. М., Акустооптичний 2 x 2 комутатор оптичних сигналів.	286
Ткаченко А.В., Ананьїна О.Ю. Моделювання процесів взаємодії атомарного водню з дефектною поверхнею Ge(100)-(2x1)	291
Хоменко А. Ю., Кислюк В. В., Говорун Д. М. Вплив вологості на вольт -	296

амперні характеристики пуринових основ ДНК у
полікристалічному стані

СУЧАСНА ФІЗИКА

Новиков М.М., Макара В.А., Копань В.С. Кафедра фізики металів фізичного факультету КНУ (до 75-річчя з дня заснування)	303
Альохін О.Д., Білоус О.І., Подкур Ю.В. Експериментальна перевірка рівняння критичної в'язкості	308
Гаврюшенко Д.А. Просторовий розподіл концентрації компонентів бінарного розчину в зовнішньому полі	311
Держипольська Л.А., Гнатовський О.В., Удалов Є.П. Моделювання роботи цифрового голографічного корелятора за умови фазових перешкод в робочому пучку	314
Зеленський С.Є., Колесник О.С., Копишинський О.В. Простий оптичний метод оцінки температури за кривою загасання світіння	321
Копань Ю.В., Хуторянська Н.В., Копань В.С. Булат і багатошаровий композиційний матеріал	324
Лисов В.І., Цареградська Т.Л., Турков О.В., Яриш В.В. Квантово- механічний розрахунок основних характеристик процесу фазового розшарування в рідких бінарних сплавах	329
Лопатинський А.М., Фесенко О.М., Лопатинська О.Г., Чегель В.І., Довбенко Г.І., Поперенко Л.В., Ушенін Ю.В. Вплив поверхневої структури на стабільність параметрів сенсорів на основі поверхневого плазмонного резонансу	334
Макаренко О.В., Євтушенко А.Ю. Індикатриса розсіювання світла еталонним зразком	339
Охріменко Б.А., Яблочкова К.С. Оцінка параметрів двошарового потенціалу для молекули води в рідкому стані	342
Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Нелінійна спектроскопія фулеренів	349
Соколовський Б.І., Склярчук В.М., Плевачук Ю.О. Електропровідність і термо-е.р.с. розплавів на основі гелуру	354
Усенко К.В. Класифікація станів двочастинкових квантових каналів переносу інформації. Частина 2	358
Шайкевич І.А., Шибіко Я.А., Мельниченко Л.Ю., Пророк В.В. Спектральні залежності еліпсометричних параметрів тонких плівок високопровідних металів при збудженні поверхневих поляритонів	367
Слізаров О.І., Слізаров М.О., Журав В.В., Руденко О.П. Особливості електропровідності дисперсної системи вологого ґрунту	371
Маломуж М.М. Кластерна структура та її прояв в особливостях фазової діаграми двовимірного кулонівського газу	378
Охріменко Б.А., Яблочкова К.С. Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію $N-H$ зв'язку молекули NH_3	388

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ЙМОВІРНОСТЕЙ

УДК 519.21

Віталій А. Каліон, к.ф.-м.н., доцент,
Валерія В. Каліон, студентка

Математичне моделювання ймовірності банкрутства страхової компанії за умови перестрахування

В статті розглядається вплив перестрахування на ймовірність банкрутства страхової компанії в класичній моделі й визначається оптимальний рівень резервів, що мінімізує ймовірність банкрутства. Зокрема, показано, яким чином можуть бути знайдені оптимальні рівні резервування, коли преміальні надбавки перестраховику залежать від рівня резервів. Обговорюється можливість використання отриманих результатів для ринку страхових послуг України.

Ключові слова: ймовірність банкрутства, страхова компанія, перестрахування, математичне моделювання.

E-mail: kalion@univ.kiev.ua

1 Вступ

На розвинених ринках страхових послуг у світі одним із найголовніших інструментів гарантування фінансової надійності страхової компанії є перестрахування. Тому дослідження впливу перестрахування на ймовірність банкрутства страхової компанії, як методу забезпечення від страхових ризиків, є актуальною проблемою в сучасній актуарній математиці. Попередні дослідження впливу перестрахування на ймовірність банкрутства були присвячені, в основному, впливу перестрахування на поправочний коефіцієнт регулювання Лундберга [1,2]. Причиною використання тут коефіцієнта Лундберга була відносна простота його обчислення у ситуаціях, коли безпосередньо ймовірність банкрутства обчислити неможливо. Розвиток чисельних алгоритмів обчислення наближення ймовірності банкрутства зробив більш простим і обчислення рівнів резервування, що мінімізують ймовірність банкрутства.

Метою даної роботи є вивчення впливу перестрахування на ймовірність банкрутства страхової компанії в класичній моделі для ринку страхових послуг України. Компанії, для яких проводилися розрахунки рівнів резервування, що мінімізують ймовірність банкрут-

V. V. Kalion, Ph.D, Associate Professor,
V. V. Kalion, student

Mathematical modeling of probability of ultimate ruin of an insurance company with reinsurance

At the paper the effect of reinsurance on the probability of ultimate ruin in the classical surplus process and consider a retention level as optimal if it minimizes the ruin probability was studied. It was shown that optimal retention levels can be found when the reinsurances premium loading depends on the retention level. The result implementation into Ukrainian insurance market is discussed.

Key Words: ruin probability, insurance company, reinsurance, mathematical modeling.

ва, обиралися з врахуванням їхнього рейтингу, рівня початкових резервів (в приведених сумах) та питомої ваги платежів перестрахування в загальній сумі страхових платежів за даними, що наведені на сайті Товариства Актуаріїв України www.insuranceTop.com. Поставленим завданням є визначення оптимальних рівнів резервування страхових компаній, що мінімізують ймовірність банкрутства. Зокрема, показується, яким чином можуть бути знайдені оптимальні рівні резервування, коли преміальні надбавки перестраховику залежать від рівня резервів. Для вивчення впливу на ймовірність банкрутства страхової компанії різних типів договорів перестрахування і рівнів резервування у роботі використовуються чисельні алгоритми.

2 Основна частина

У класичній моделі ризиковий резерв $U(t)$ за час t визначається як

$$U(t) = u + ct - X(t), \quad (1)$$

де u – величина ризикового резерву при $t = 0$, c – величина страхових премій, що зібрані до моменту часу t (одержання премій передбачається безперервним), а $X(t)$ – сумарні страхові виплати до моменту t . Страхові премії обчис-

люються з відносною ризиковою надбавкою $\theta > 0$. Сумарні виплати являють собою складний Пуассонівський процес, і, без втрати загальності, можна припустити, що параметр у розподілі Пуассона дорівнює 1. Величина індивідуальних виплат має функцію розподілу $P(x)$, і вважаємо (знову без втрати загальності), що цей розподіл має середнє 1. При цьому величина інтенсивності надходження страхових премій розраховуються з урахуванням суми страхових виплат й відносною ризиковою надбавкою θ : $c = 1 + \theta$. Тоді ймовірність банкрутства $\psi(u)$ визначається у вигляді

$$\psi(u) = P(U(t) < 0, t > 0). \quad (2)$$

Нехай тепер страхова компанія має договір перестрахування, згідно з яким при настанні страхового випадку перестраховик виплачує страховій компанії суму $h(X_i)$. Тут X_i – i -та виплата страхової компанії, причому $0 \leq h(X_i) \leq X_i$. Припустимо далі, що премії при перестрахуванні обчислюються з врахуванням надбавки перестраховика ξ , де $\xi > \theta$.

Припускаючи, що виплати перестраховальних премій здійснюються безперервно, ризиковий резерв страхової компанії $U(t, h)$ за час t визначається у вигляді:

$$U(t, h) = u + (1 + \theta)t - (1 + \xi)t(1 - E[h(X_i)]) - \sum_{i=1}^{N(t)} h(X_i) \quad (3)$$

де $N(t)$ – число страхових випадків до моменту часу t . Для цього процесу позначимо ймовірність банкрутства $\psi(u, h)$, і визначимо її як

$$\psi(u, h) = P(U(t, h) < 0, t > 0). \quad (4)$$

Будемо розглядати випадок, коли $h(X) = \min(X, M)$, що відповідає ексцедентному перестрахуванню з рівнем резервування M . Нашою метою є знаходження оптимальних рівнів резервування, які мінімізують $\psi(u, h)$. Розглянемо для п'яти комбінацій ризикових надбавок θ/ξ два розподіли індивідуальних виплат: експоненційний та Парето. Зауважимо, що, на відміну від експоненційного розподілу, розподіл Парето має більш щільний хвіст.

Розглянемо модель із дискретним часом

$$\psi(u, M) = (k + 1 - \beta u/M) \psi(k, M) + (\beta u/M - k) \psi(k + 1, M), \quad (7)$$

де k – ціле число таке, що $k \leq \beta u/M < k + 1$. Значення $\psi(u, M)$, які були обчислені для різних M , які являють собою добуток цілого числа

для складного Пуассонівського розподілу із наступними властивостями [3, с.119 - 121]:

- величини індивідуальних виплат $X \in Z^+$ із середнім β , де $\beta > 1$,
- параметр Пуассона для очікуваного числа виплат в одиницю часу $= 1 / [(1 + \theta)/\beta]$,
- величина премій, які зібрані до моменту часу t , дорівнює 1.

Для цієї моделі ризиковий резерв $Z(n)$ ($n \geq 0$) для даного початкового рівня резервування u ($u \in Z$), а ймовірність банкрутства задається виразом

$$\psi_d(u) = P(T < \infty) \quad (5)$$

де

$$T = \begin{cases} \min \{n: Z(n) \leq 0, n = 1, 2, \dots\}; \\ \infty, Z(n) > 0, n = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Слідуючи [3], ми можемо оцінити $\psi_d(\beta u)$ як наближення до $\psi(u)$. Тоді ймовірність банкрутства α може бути обчислена рекурсивно. Отже, нехай g_k й $G(k)$ для $k = 0, 1, 2, \dots$, – це ймовірності того, що сумарні виплати в одиницю часу рівні або менші за k , причому $g_k = P(X = k)$, $G(k) = P(X \leq k)$. Тоді величина g_k може бути обчислена згідно рекурентної формули [4, с.23]. Загальний алгоритм обчислення ймовірності банкрутства тоді має вигляд:

$$\psi_d(0) = 1/(1 + \theta), \quad (6)$$

$$\psi_d(u) = g_u \left(\psi_d(u-1) - \sum_{j=1}^{u-1} g_j \psi_d(u-j) - 1 + G(u-1) \right)$$

для $u \geq 1$.

Нехай $\psi(u, M)$ позначають ймовірність банкрутства при ексцедентному перестрахуванні $h(X) = \min(X, M)$. Для того, щоб можна було застосовувати алгоритм обчислення наближених значень $\psi(u, M)$, що був описаний вище, дискретизуємо розподіл індивідуальних виплат на $0, M/\beta, 2M/\beta, \dots, M$, де $\beta \in Z$. Якщо значення u , для яких необхідно обчислити $\psi(u, M)$, не є добутком цілого числа й M/β , тоді таке значення може бути обчислене з використанням лінійної інтерполяції.

на 0.001. Оптимальним значенням M буде добуток цілого числа на 0.001, що мінімізує $\psi(u, M)$.

Було проведено дослідження ринку страхових послуг України згідно з даними, що наведені на сайті Товариства Актуаріїв України www.insurancefor.com. Компанії, для яких проводилися розрахунки рівнів резервування, що мінімізують ймовірність банкрутства обиралися з врахуванням їхнього рейтингу, початкових резервів (в приведених сумах) та питомої ваги платежів перестраховування в загальній сумі страхових виплат.

У Таблиці 1 наведені значення M , які мінімізують значення $\psi(u, M)$ для обраних значень величини u , для випадку експоненційно розподілених індивідуальних виплат.

В останньому рядку Таблиці 1 для порівнян

ня наведені значення M , які максимізують поправочний коефіцієнт Лундберга.

На Рис. 1 наведені значення $\psi(u, M)$ (суцільні лінії) і верхня границя для коефіцієнта Лундберга (точки) для $u = 10, 20, 30, 45, 53$, при $\theta = 0.1$ та $\xi = 0.15$. Очевидно, що при оптимальному рівні резервування ймовірність банкрутства набагато менша, ніж $\psi(u)$. До того ж, при оптимальному рівні резервування границя для коефіцієнта Лундберга перебуває дуже близько до ймовірності банкрутства. Рис. 2 ілюструє ситуацію, коли $\theta = 0.1$ та $\xi = 0.3$. У цьому випадку ймовірність банкрутства при оптимальному рівні резервування не більш ніж на 2 % нижче, ніж $\psi(u)$.

Таблиця 1.

Оптимальні рівні резервування (M) у випадку ексцедентного перестраховування й експоненційно розподілених індивідуальних виплат.

Назва компанії	u (в приведених сумах)	Ризикові надбавки страхування (θ) та перестраховування (ξ)				
		0.1/0.15	0.1/0.2	0.1/0.3	0.2/0.3	0.2/0.4
Добробут	10	0.865	1.583	2.821	0.845	1.529
АКВ «Гарант»	20	0.858	1.557	2.727	0.838	1.507
СК «ТАС»	30	0.856	1.549	2.698	0.836	1.509
Омега	45	0.854	1.544	2.683	0.834	1.495
Захід-Резерв	53	0.853	1.542	2.675	0.833	1.490
R		0.851	1.533	2.643	0.832	1.486

Таблиця 2.

Оптимальні рівні резервування (M) у випадку ексцедентного перестраховування й Парето-розподілених індивідуальних виплат.

Назва компанії	u (в приведених сумах)	Ризикові надбавки страхування (θ) та перестраховування (ξ)				
		0.1/0.15	0.1/0.2	0.1/0.3	0.2/0.3	0.2/0.4
Добробут	10	1.137	2.548	6.238	1.107	2.446
АКВ «Гарант»	20	1.124	2.475	5.716	1.095	2.383
СК «ТАС»	30	1.120	2.452	5.575	1.092	2.363
Омега	45	1.117	2.440	5.500	1.089	2.351
Захід-Резерв	53	1.114	2.430	5.461	1.086	2.338
R		1.111	2.408	5.326	1.084	2.325

$$\psi(u; M) : \exp \{-R(M) u\}$$

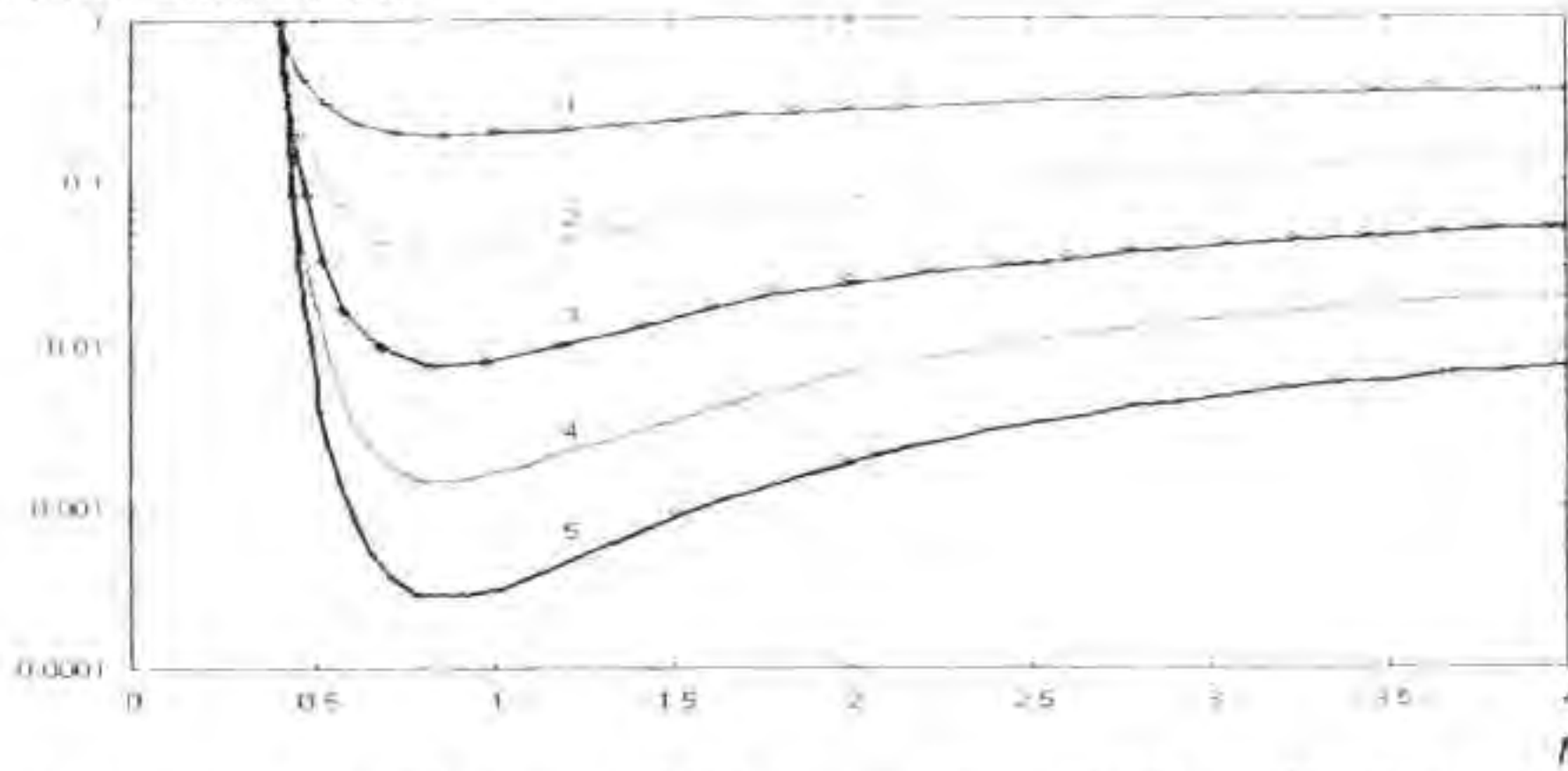


Рис. 1. Значення $\psi(u; M)$ та $\exp \{-R(M) u\}$ для (1) $u = 10$, (2) $u = 20$, (3) $u = 30$, (4) $u = 45$, (5) $u = 53$; X_i – мають експоненційний розподіл; $\theta = 0.1$; $\xi = 0.15$.

$$\psi(u; M) : \exp \{-R(M) u\}$$

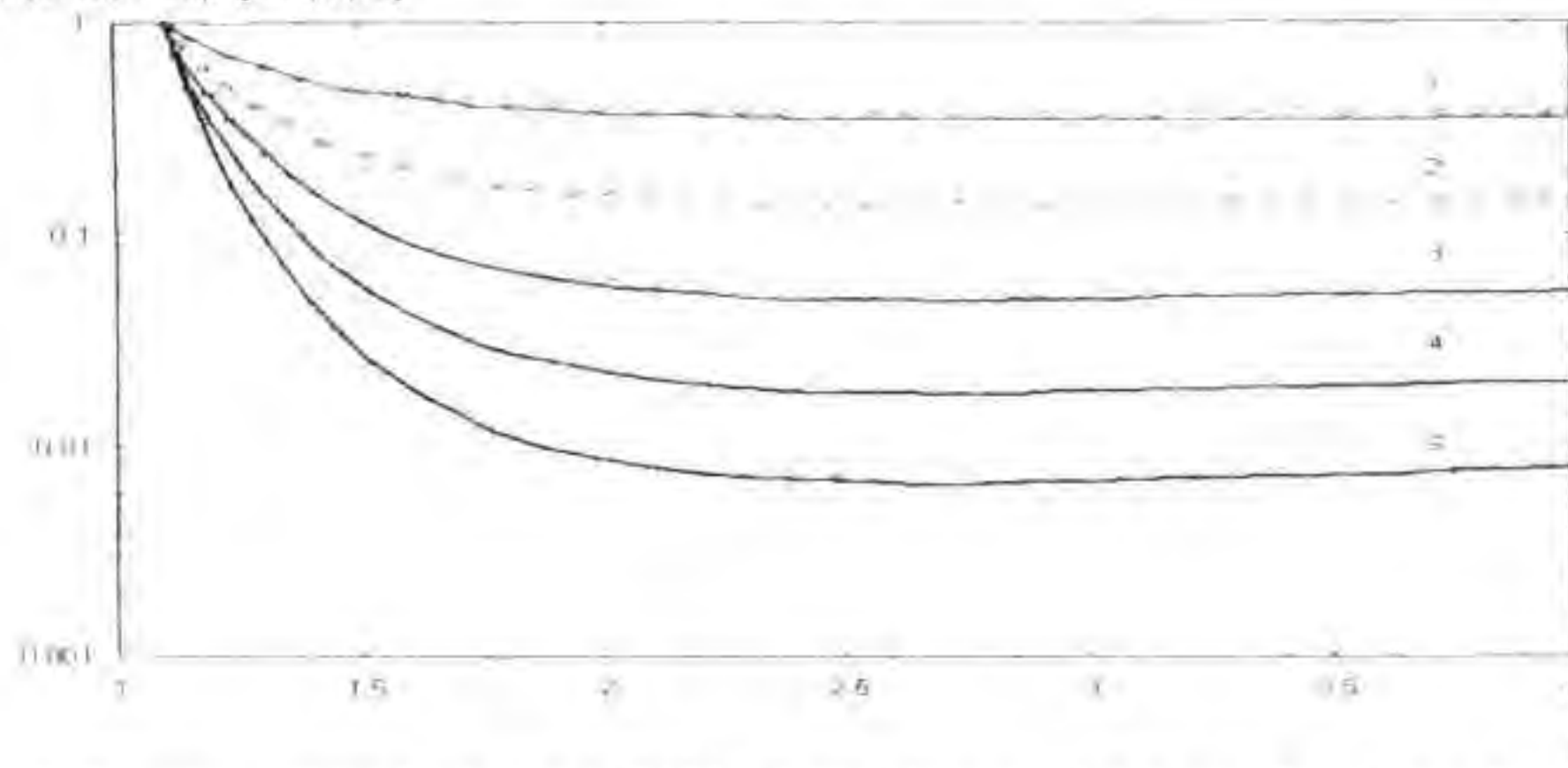


Рис. 2. Значення $\psi(u; M)$ й $\exp \{-R(M) u\}$ для (1) $u = 10$, (2) $u = 20$, (3) $u = 30$, (4) $u = 45$, (5) $u = 53$; X_i – мають експоненційний розподіл; $\theta = 0.1$; $\xi = 0.3$.

$$\psi(u; M) : \exp \{-R(M) u\}$$

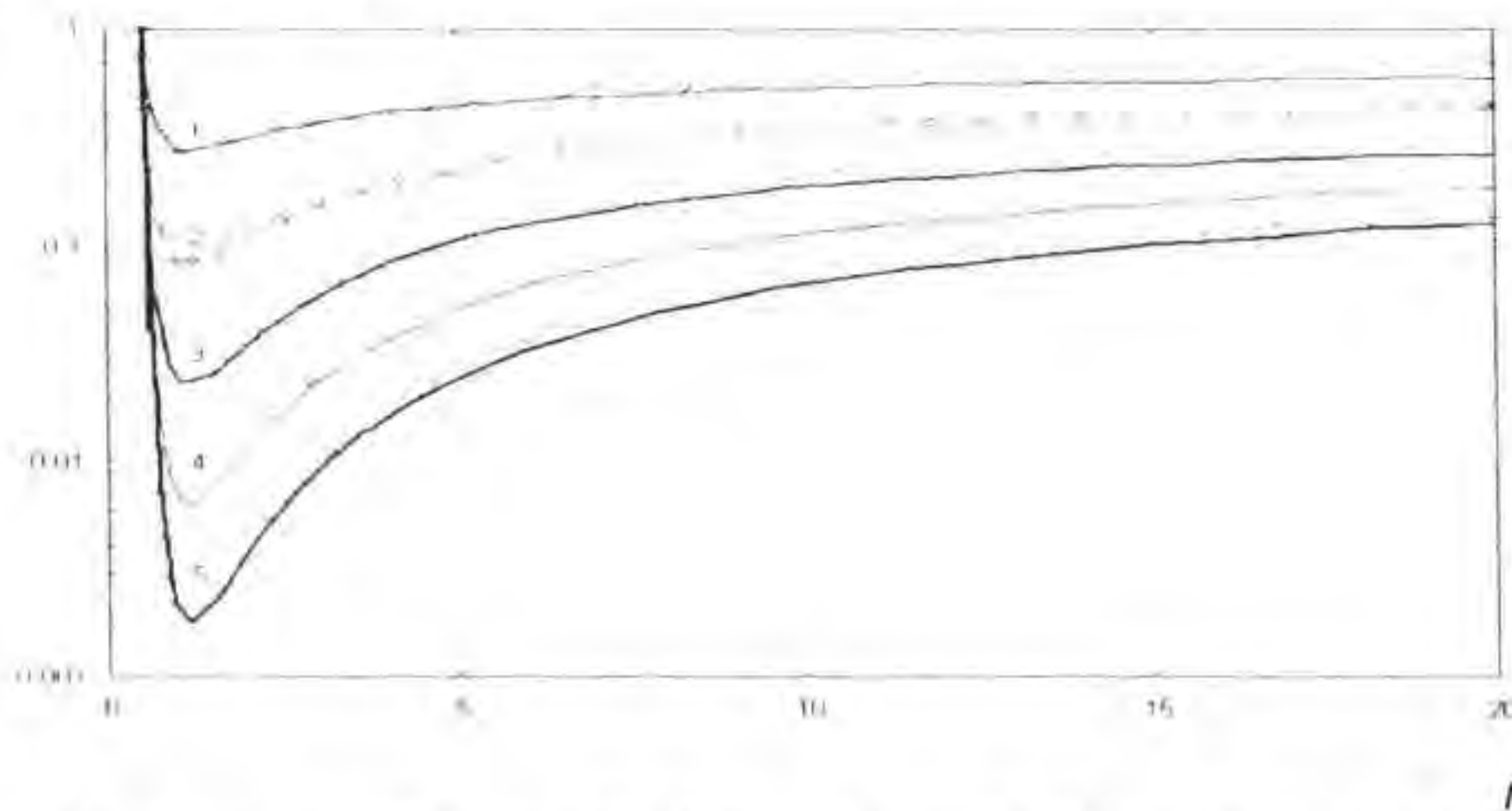


Рис. 3. Значення $\psi(u; M)$ й $\exp \{-R(M) u\}$ для (1) $u = 10$, (2) $u = 20$, (3) $u = 30$, (4) $u = 45$, (5) $u = 53$; X_i – мають розподіл Парето; $\theta = 0.1$; $\xi = 0.15$.

Розглянемо Парето-розподілені індивідуальні виплати $P(x) = 1 - (1 + x)^{-\xi}$. У Таблиці 2 наведено значення M , які мінімізують величину $\psi(u; M)$ для деяких значень u . В останньому рядку цієї таблиці для порівняння наведено значення M , які максимізують поправочний коефіцієнт Лундберга. Результати, що наведені у Таблиці 2, подібні до результатів, що наведені у Таблиці 1. Знову можемо побачити, що, принаймні, для великих значень u , вибір M , з метою максимізувати поправочний коефіцієнт Лундберга, є вдалою альтернативою вибору M , що мінімізує ймовірність банкрутства.

На Рис. 3 представлені значення $\psi(u; M)$ й верхньої межі коефіцієнта Лундберга для $u = 10, 20, 30, 45, 53$ при $\theta = 0.1$ та $\xi = 0.15$, а Рис. 4 – при $\theta = 0.2$ та $\xi = 0.4$. З графіків видно, що ексцедентне перестраховування викликає істотне зниження ймовірності банкрутства. Таким чином, верхня межа коефіцієнта Лундберга перебуває поряд з межею ймовірності банкрутства при оптимальному рівні резервування. Однак, зі зростанням M верхня межа коефіцієнта Лундберга відрізняється від $\psi(u; M)$, хоча $R(M) \rightarrow 0$ при $M \rightarrow \infty$.

3 Висновки

1. Показано, що ймовірність банкрутства може бути обчислена у випадку, якщо сукупний процес виплат є складним Пуассонівським процесом й визначено тип чинного договору перестраховування. Величина рівня резервування M , що мінімізує $\psi(u; h)$, близька за величиною до рівня резервування, що максимізує поправочний коефіцієнт Лундберга.
2. Розрахунок оптимальних рівнів резервування у випадку ексцедентного перестраховування може бути дуже чутливим до дискретності індивідуального розподілу кількостей виплат.
3. Страховій компанії, що має відносно малий початковий рівень резервування, необхідно вдаватися до перестраховування в першу чергу.
4. Використання вітчизняними компаніями перестраховування, як інструменту забезпечення від фінансових втрат при надто великому числі страхових випадків, має дуже важке значення.
5. Лише незначне число компаній в Україні відповідають теоретичним стандартам, що

відображають європейський рівень розвитку страхового ринку. Так, наприклад, СК «ТАС», що належить до п'ятірки лідерів рейтингу страхових компаній України в 2005-2006 рр., має питому вагу платежів перестраховування у загальних платежах близько 5 %, в той час, коли рівень перестраховування, що мінімізує ймовірність банкрутства в 15-20 разів вищий.

6. При порівнянні теоретичних й реальних рівнів резервування (M), виявилось, що тільки лідери останніх років мають рівні резервування, які близькі до теоретичного рівня, що мінімізує ймовірність банкрутства. Тобто інші страхові компанії беруть на себе лівову частку страхових виплат, не вдаючись до перестраховування. Останнє дуже підвищує ймовірність банкрутства для страхової компанії. Відмітимо, що на страховому ринку України нехтування інструментом перестраховування має тенденцію до зростання.

Список використаних джерел

1. Бауэрс Н., Гербер Х., Джонс Д., Несбитт С., Хикман Дж. Актуарная математика. Перевод с англ. / Под ред. В.К.Малиновского.- М.: Янус-К.-2001.- 656 с.
2. Штурко В.В. Побудова оцінок ймовірності банкрутства страхових компаній у класичній моделі ризику // Банківська справа. - 2001.- № 5.- С. 57-61.
3. Dickson D.C.M., Waters H.R. Reinsurance and ruin // Insurance Mathematics and Economics.- 1999.- V.19.- P.61-80.
4. Panjer H.H. and Willmot G.E. Insurance risk models.- Schaumburg: Society of Actuaries. Ill.- 1992.- 132p.
5. Steenackers A. and Goovaerts M.J. Optimal reinsurance from the viewpoint of the cedent / Transactions of the 24-th International Congress of Actuaries.- 1992.- V.2.- P.271-300.
6. Waters H.R. Some mathematical aspects of reinsurance // Insurance: Mathematics and Economics.- 1983.- V.2.- P.17-26.

Надійшла до редколегії 21.06.2007

УДК 512

Юрій Г. Леонов, к.ф.-м.н., доцент,
Василь В. Ясинський, аспірант

Про зображення кратних вінцевих добутоків груп $\mathbb{Z}_2$

В роботі вивчається зображення кратних вінцевих добутоків циклічних груп порядку 2 унітрикутними матрицями над полем з двох елементів. Отримано матричний вигляд твірних елементів цих груп.

Ключові слова: вінцевий добуток, зображення, шаблон.

E-mail: leonov_yu@yahoo.com

1 Вступ

У роботі [1] отримано точне зображення кратних кінцевих та нескінчених вінцевих добутоків груп порядку 2 унітрикутними матрицями над полем з двох елементів. Далі аналогічне зображення було описано у роботі [2] для кратних вінцевих добутоків циклічних груп довільного простого порядку. Однак, властивості цих зображень до сих пір були мало дослідженими.

Назвемо групою Калужніна $P_{p,n}$ n -кратний вінцевий добуток груп порядку p , побудований в [3]. В даній роботі продовжимо вивчати зображення груп $P_{2,n}$, яке було почате в [1]. Ми вкажемо матричний вигляд твірних елементів цих груп для будь-яких натуральних n .

2 Зображення кратних вінцевих добутоків

Згідно [4], кожний елемент групи Калужніна $y \in P_{2,n}$ зобразимо у вигляді таблиці $y = [y_{0,1}, y_{1,1} + y_{1,2}t_1, \dots, y_{n-1,1} + y_{n-1,2}t_1 + \dots + y_{n-1,2^{n-1}}t_1 \dots t_{n-1}]$, де на k -му місці ($k=0, 1, \dots, n-1$) в таблиці стоять многочлени $y_k(t_1, \dots, t_k)$, які є представниками мінімального степеня класів сміжності кільця многочленів $\mathbb{Z}_2[x_1, \dots, x_k]$ по модулю ідеала, породженого многочленами виду $x_1^2 - x_1, \dots, x_k^2 - x_k$. Такі многочлени називаються редукованими.

Опишемо унітрикутне точне зображення груп $P_{2,n}$ згідно [1]. Нехай $t_1 \dots t_m$ - деякий одночлен. Висотою такого одночлена називається число

Y. G. Leonov, Cand.Sci (Tech.), Associate Professor,
V. V. Yasinsky, PhD student

On representation of wreath powers of groups $\mathbb{Z}_2$

The faithful representation of wreath powers of groups $\mathbb{Z}_2$ is studied.

Key Words: wreath products, representation, mask.

$$h(t_1 \dots t_m) = 1 + \sum_{i=1}^m 2^{i-1}.$$

Будь-який многочлен може бути однозначно представлений у вигляді суми одночленів попарно різних висот. У наших позначеннях

$$y_k(t_1, \dots, t_k) = \sum_{j=1}^{2^k} y_{k,j} t(j), \quad (1)$$

де $t(j)$ - одночлен висоти j , $t(1)=1$. Висотою многочлена називається найбільша з висот одночленів в сумі (1) з ненульовим коефіцієнтом.

Визначимо дію таблиці $y \in P_{2,n}$ на многочлен g висоти j . Для даних n та g складемо таблицю елемента $\bar{g}$ в вінцевому добутку $P_{2,n}$ наступним чином. Перші n координат таблиці будемо вважати нульовими, а останню координату візьмемо рівною g . Легко побачити, що визначення коректне та $\bar{g} \in P_{2,n+1}$.

Нехай $\tau_{n,m}: P_{2,n} \rightarrow P_{2,m}$ - гомоморфізм, який забирає зайві координати в таблицях у разі $n > m$ і дописує необхідні нульові многочлени в координати таблиці у випадку $n < m$. Розглянемо елемент групи $P_{2,n+1}$

$\bar{g}^{\tau_{n,n+1}(y)^{-1}} = \tau_{n,n+1}(y) \cdot \bar{g} \cdot (\tau_{n,n+1}(y))^{-1}$. Усі координати його таблиці нульові, окрім, можливо останньої. Многочлен, який є останньою координатою, визначимо просто як g^y . Із означення можна побачити, що висота многочлена $h(g^y)$ співпадає з висотою $h(g)$. Будемо казати, що многочлен

g^y отримано за допомогою дії елемента y на многочлен g .

Визначимо зображення $f_n: P_{2,n} \rightarrow UT_{2^{n+1}}(2)$.

Висота многочлена в останній координаті таблиці $y \in P_{2,n}$ є обмеженою числом 2^{n+1} . Розглянемо одноклени $t(j)$ висот $j=1, 2, \dots, 2^{n+1}+1$ та многочлени

$$t(j)^y = \sum_{i=1}^j u_{i,j} \cdot t(i).$$

Візьмемо квадратну матрицю $A=f_n(y)$ розмірності $2^{n+1}+1$ з умовою

$$A_{i,j} = \begin{cases} 0, & i > j \\ u_{i,j}, & i \leq j \end{cases}$$

Теорема 1 [1]. При будь-якому $n \geq 1$ зображення, яке визначено вище

$$f_n: P_{2,n} \rightarrow UT_{2^{n+1}}(2)$$

є мономорфізмом. Не існує ізоморфних вкладень групи $P_{2,n}$ в групу унітрикутних матриць над $\mathbb{Z}_2$ меншої розмірності.

Із означення добутку таблиць вінецьких добутків зрозуміло, що многочлен $t(j)^y$ не залежить від фіксованого числа n . Дію y на $t(j)$ можна визначити у вінецьвому добутку $P_{2,m}$, $m=[\log_2(j+1)]$, припустивши, що $t(j)^y = t(j)^{r_{n,n+1}(y)}$. Для редукованого многочлена $h(t_1, \dots, t_i)$ можна розглянути мономорфізм ψ_k в групу $P_{2,k}$, $k > i$, вибираючи у таблиці елемента $\psi_k(h(t_1, \dots, t_i))$ усі нульові координати, за винятком останньої, рівної многочлену h .

Позначимо $\Xi_{i,n} = \tau_{i,n}(\psi_i(t(2^{i-1})))$. Систему твірних групи $P_{2,n}$ у наших позначеннях можна вибрати наступним чином

$$P_{2,n} = \langle \Xi_{i,n} \mid i = 1, \dots, n \rangle.$$

За заданим нами зображенням легко отримати матричний вигляд елементів $\psi_i(t(2^{i-1})) \in P_{2,i}$. А саме, матриця $A = f_i(\psi_i(t(2^{i-1})))$ відрізняється від одиничної в групі $UT_{2^{i+1}}(2)$ одним елементом $A_{2^{i-1}, 2^{i+1}} = 1$.

Отримані таким чином матричні зображення елементів не сумісні між собою. Наша мета – отримати матричне зображення твірних елементів групи $P_{2,n}$ в групі матриць $UT_{2^{n+1}}(2)$. Для

цього ми повинні розглянути вкладення елементів $\psi_i(t(2^{i-1}))$ у групу нескінченновимірних унітрикутних матриць $UT_\infty(2)$.

Розглянемо групу $P_{2,\infty}$ нескінченнократних вінецьких добутків груп $\mathbb{Z}_2$. Її елементи записуються аналогічно кінцевому випадку у вигляді таблиць – необмеженої послідовності редукованих многочленів. Будь-яка група $P_{2,n}$ під дією відображення $\tau_{n,\infty}$ має свою природну копію у групі $P_{2,\infty}$, яка складається з усіх таблиць з нульовими многочленами, починаючи з $n+1$ -ої координати. У роботі [1] було вказано зображення групи $P_{2,\infty}$ нескінченновимірними унітрикутними матрицями з $UT_\infty(2)$ (рядки та стовпчики таких матриць індексуються натуральними числами). Звідси існує вкладення і для кожної групи $P_{2,n}$, як копії підгрупи з $P_{2,\infty}$. Таким чином, нашим завданням стає проблема отримання матричного зображення елементів $\Xi_{i,\infty} = \tau_{i,\infty}(\psi_i(t(2^{i-1}))) \in P_{2,\infty}$, i – натуральне число.

Для дослідження нескінченновимірних матриць в роботі [1] було вказано мову шаблонів, яка містить наступне. Зафіксуємо деяке натуральне число n та розглянемо множину $SH_n(2)$ квадратних матриць розмірності n вигляду

$$Y = \begin{pmatrix} Y_{1,1} & Y_{1,2} & \dots & Y_{1,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ Y_{n,1} & Y_{n,2} & \dots & Y_{n,n} \end{pmatrix},$$

де усі матриці $Y_{i,j}$ є нескінченновимірними матрицями над полем з двох елементів з нулями під головною діагоналлю, $Y_{i,j} \in UT_\infty(2)$, $Y_{i,j}$ має нульову головну діагональ при $i > j$ та інших обмежень не існує. Множина $SH_n(2)$ відносно звичайної операції добутку квадратних матриць є групою.

Нехай

$$X \in UT_\infty(2), \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,2} & x_{1,3} & \dots \\ 0 & 1 & x_{2,3} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

де $x_{i,j} \in \mathbb{Z}_2$.

Будемо вважати $x_{i,i} = 1$ та $x_{i,j} = 0$, $i < j$.

Зафіксуємо деяке натуральне число n . Для пари (i,j) , $i=1, 2, \dots, n$; $j=1, 2, \dots, n$ розглянемо матрицю

$$X_{i,j} = \begin{pmatrix} x_{i,j} & x_{i,j+n} & x_{i,j+2n} & \dots \\ x_{i+n,j} & x_{i+n,j+n} & x_{i+n,j+2n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Група $UT_\infty(2)$ ізоморфна групі $SH_n(2)$ для будь-якого натурального n . У якості ізоморфізму можливо розглянути відображення $sh_n: UT_\infty(2) \rightarrow SH_n(2)$ вигляду

$$sh_n(X) = \begin{pmatrix} X_{1,1} & X_{1,2} & \dots & X_{1,n} \\ & \dots & \dots & \\ X_{n,1} & X_{n,2} & \dots & X_{n,n} \end{pmatrix}.$$

для будь-якого $X \in UT_\infty(2)$.

Матрицю $sh_n(X)$ будемо називати шаблоном матриці розмірності n . Враховуючи ізоморфізм, ми будемо писати

$$X = \begin{pmatrix} X_{1,1} & \dots & X_{1,n} \\ & \dots & \\ X_{n,1} & \dots & X_{n,n} \end{pmatrix}.$$

Нехай $y \in P_{2,\infty}$, $y = [y_0, y_1(t_1), y_2(t_1, t_2), \dots]$.

Визначимо обмеження $y|_x$ таблиці уздовж шляху $x \in \mathbb{Z}_2$, як таблицю

$$[y'_0, y'_1(t_1), y'_2(t_1, t_2), \dots],$$

де $y'_0(t_1, \dots, t_i)$ можна отримати з $y_{i+1}(t_1, \dots, t_{i+1})$ за допомогою гомоморфізму φ_x , який задано на змінних за правилом $t_1 \rightarrow x, t_2 \rightarrow t_1, \dots, t_i \rightarrow t_{i-1}, t_{i+1} \rightarrow t_i$ та розповсюджене на весь многочлен природним шляхом.

У роботі [1] зображення f групи $P_{2,\infty}$ унітрикутними матрицями було описано рекурентно за допомогою шаблонів.

Теорема 2 [1]. Нехай $y \in P_{2,\infty}$, f - наше зображення (мономорфізм) групи $P_{2,\infty}$ у групі $UT_\infty(2)$. Тоді

$$f(y) = \begin{pmatrix} f(y|_0) & y_0 \cdot f(y|_0) \\ f(y|_0) + f(y|_1) & f(y|_{y_0+1}) \end{pmatrix}.$$

Тут сума матриць означає поелементне додавання, а добуток матриці на нуль дає нульову матрицю. У тій ж самій роботі при доведенні даної теореми вже було отримано зображення для еле-

мента $\Xi_{1,\infty}$, таблиця якого має вигляд $[1, 0, 0, \dots] \in P_{2,\infty}$.

Лема [1]. Має місце рівність

$$f(\Xi_{1,\infty}) = \begin{pmatrix} E & E \\ 0 & E \end{pmatrix},$$

де E - одинична матриця у групі $UT_\infty(2)$, а 0 - нескінченновимірний нульовий матриця, яка складається з усіх нулів (нульова матриця).

Ми можемо представити елемент $\Xi_{1,\infty}$ у вигляді шаблонів більшої розмірності. Наприклад, використовуючи означення шаблонів та дану лему, маємо:

$$f(\Xi_{1,\infty}) = \begin{pmatrix} E & E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & E \\ 0 & 0 & 0 & E \end{pmatrix}.$$

Отримаємо зображення елементів $\Xi_{i,\infty}$ шаблонами розмірності 2^i .

Теорема 3. Нехай $A_i = sh_{2^i}(f(\Xi_{i,\infty}))$. Тоді $(A_i)_{s,s} = E$, при $s \in \{1, \dots, 2^i\}$, $(A_i)_{s,l} = E$, при $s = 2^{i-1}$ та усіх $l > s$. Для інших пар $s, l \in \{1, \dots, 2^i\}$ матриці $(A_i)_{s,l}$ є нульовими.

Доведення. Доводити будемо індукцією за i . База індукції для $i=1$ слідує з вищенаведеної леми. Припустимо вірність твердження для усіх елементів $\Xi_{i,\infty}$, $i < n$ та покажемо вірність для $\Xi_{n,\infty}$. Помітимо, що при обмеженні таблиці уздовж $x \in \mathbb{Z}_2$ ми маємо (для $n > 0$) $\varphi_x(t(2^n)) = 0$, при $x=0$ та $\varphi_x(t(2^n)) = t(2^{n-1})$, при $x=1$. Звідси та за теоремою 2 виконується:

$$sh_{2^i}(f(\Xi_{n,\infty})) = \begin{pmatrix} E & 0 \\ E + f(\Xi_{n-1,\infty}) + f(\Xi_{n-1,\infty}) \end{pmatrix}.$$

Користуючись визначенням шаблонів та індукцією для матриці A_{n-1} , як шаблона розмірності 2^{n-1} , ми маємо можливість перейти від даного шаблона розмірності 2 до шаблону розмірності 2^n (при цьому буде зручно одиничну та нульову матриці також зобразити у вигляді шаблонів розмірності 2^{n-1}). Звідси одразу отримується твердження теореми.

Розглянемо відображення

$f_{(n)}: UT_{\infty}(2) \rightarrow UT_{2^{n-1}+1}(2)$, при якому нескінченновимірній матриці ставиться у відповідність головна її підматриця порядку $2^{n-1}+1$. В силу трикутності матриць це епіморфізм. Відзначимо, що якщо у матриці-шаблоні зустрічаються лише елементи E та 0 , то вкладення легко отримати при $m \geq n$. Для цього необхідно взяти головну підматрицю матриці $sh_m(A)$ порядку n та виконати відображення елементів цієї матриці за принципом $E \rightarrow 1, 0 \rightarrow 0$. Таким чином задане відображення є коректним та являється епіморфізмом.

Отримавши зображення елемента $\Xi_{i,\infty}$ шаблонами розмірності 2^i , ми надалі маємо можливість рекурентно переходити до шаблонів більших розмірностей. Для зображення твірних елементів $\Xi_{i,n}$ групи $P_{2,n}$ у групі $UT_{2^{n-1}+1}(2)$ розглянемо шаблони розмірності 2^n для кожної матриці $f(\Xi_{i,\infty}), i = 1, \dots, n$. Позначимо

$B_{i,n} = sh_{2^n}(f(\Xi_{i,\infty}))$. З попередньої теореми та з визначення шаблонів виходить, що

$$\begin{aligned} (B_{i,n})_{s,s} &= E, \text{ при } s \in \{1, \dots, 2^n\}, \\ (B_{i,n})_{s,l} &= E, \text{ при } s \equiv 2^{i-1} \pmod{2^i} \end{aligned} \quad (2)$$

та усіх $l \in \{s+1, \dots, s+2^{i-1}\}$.

Для інших пар $s, l \in \{1, \dots, 2^n\}$ матриці $(B_{i,n})_{s,l}$ є нульовими.

Відмітимо, що при $i \leq n$ рівність $f_{(n)}(f(\Xi_{i,\infty})) = f_n(\Xi_{i,n})$ є вірною, тому що зображення нескінченновимірних матриць за означенням будувалось узгодженим з зображенням скінченновимірних матриць (зокрема, для головних підматриць порядку 2^{n-1} матриць з $UT_{\infty}(2)$). Таким чином, для отримання повного опису твірних елементів групи $P_{2,n}$ у матричному вигляді $f_n(\Xi_{i,n})$ у групі $UT_{2^{n-1}+1}(2)$ необхідно використати епіморфізм $f_{(n)}$ до матриці з шаблоном $B_{i,n}$, $i \leq n$. Сказане вище та (2) дає головний результат.

Теорема 4. Нехай $\{\Xi_{i,n}; i = 1, \dots, n\}$ система твірних групи $P_{2,n}$ яку вказано у роботі та $f_n: P_{2,n} \rightarrow UT_{2^{n-1}+1}(2)$ наше точне зображення. Тоді матриця $C_{i,n} = f_n(\Xi_{i,n})$ задається наступним чином:

$$\begin{aligned} (C_{i,n})_{s,s} &= 1, \text{ при } s \in \{1, \dots, 2^{n-1}+1\}, \\ (C_{i,n})_{s,l} &= 1, \\ \text{при } s &= k \cdot 2^i + 2^{i-1}, k \in \{0, 1, \dots, 2^{n-i}-1\}, \\ l &\in \{s+1, \dots, s+2^{i-1}\}, \\ (C_{i,n})_{s,l} &= 0 \text{ для інших пар } s, l \in \{1, \dots, 2^{n-1}+1\}. \end{aligned}$$

За аналогічними міркуваннями можна отримати матричний вигляд твірних елементів групи $P_{p,n}$ у групі $UT_{p^{n-1}+1}(p)$.

3 Висновки

Отримані в роботі результати можна використовувати при дослідженні скінчених 2-груп у матричному вигляді.

Список використаних джерел

1. Леонов Ю.Г. Представление финитно-аппроксимируемых 2-групп бесконечномерными унитарными матрицами над полем из двух элементов // Математические студии. - 2005. - 2, № 22 - С. 134-140.
2. Леонов Ю.Г., Некрашевич В. В., Суцанський В.І. Зображення віцевих добутків унітрикутними матрицями // Докл. АН України. - 2005. - № 4. С. 29-33.
3. Калужний Л. А. Об одном обобщении силовских р-подгрупп симметрических групп // Acta Math. Acad. Sci. Hung., - 1951. - № 2, P. 197-221.
4. Калужний Л. А. Избранные главы теории групп. - Киев. Изд-во КГУ, 1979. - 52 с.

Надійшла до редакції 20.11.2006

УДК 519.21

Олександр Ю. Масютка

Про задачу екстраполяції векторної стаціонарної послідовності

Розглядається задача оптимального лінійного оцінювання функціонала

$$A\bar{\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{a}(j) \bar{\xi}(j) \quad \text{від векторної стаціонарної}$$

послідовності $\bar{\xi}(j)$ за спостереженнями послідовності $\bar{\xi}(j) + \bar{\eta}(j)$ при $j < 0$. Виведені формули для обчислення середньоквадратичної похибки та спектральної характеристики оптимальної оцінки функціонала.

Ключові слова: векторна стаціонарна послідовність, оптимальна лінійна оцінка, середньоквадратична похибка, спектральна характеристика.

1. Вступ

Класична теорія інтерполяції, екстраполяції та фільтрації стаціонарних процесів базується на припущенні, що спектральні щільності процесів відомі. На практиці, однак, повна інформація про спектральні щільності у більшості випадків неможлива. Щоб подолати це ускладнення, знаходять параметричні чи непараметричні оцінки спектральних щільностей або підбирають щільності, виходячи з інших міркувань. Потім застосовують класичну теорію оцінювання, вважаючи, що вибрані тим чи іншим способом спектральні щільності є істинними. Такий підхід, як показали К.С. Вастола та Г.В. Пур [5] на конкретних прикладах, може призвести до значного росту величини похибки оцінки. Тому доцільно шукати оцінки, які є оптимальними одночасно для всіх щільностей з деякого класу можливих спектральних щільностей. Такі оцінки називають мінімаксними, оскільки вони мінімізують максимальне значення величини похибки. Огляд результатів мінімаксного методу оцінювання можна знайти у статтях С.А. Кассама та Г.В. Пура [2]. У статті У. Гренандера [1] вперше застосовуються методи теорії ігор до проблеми екстраполяції. Ю. Франк (1985) досліджував проблему екстраполяції для стаціонарних послідовностей за допомогою методів опуклої оптимізації. У статтях М.П. Моклячука (1992-2001) проблеми екстраполяції, інтерполяції та фільтрації досліджуються для стаціонарних послідовностей та процесів.

Oleksandr Yu. Masyutka

On the extrapolation problem for a multidimensional stationary sequence

The problem of optimal linear estimation of the transformation $A\bar{\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{a}(j) \bar{\xi}(j)$ of a multidimensional stationary sequence $\bar{\xi}(j)$ from observations of a sequence $\bar{\xi}(j) + \bar{\eta}(j)$, $j < 0$ is considered. Formulas are proposed for calculation the mean square error and spectral characteristics of the optimal linear estimate.

Key words: multidimensional stationary sequence, optimal linear estimate, mean square error, spectral characteristics.

У даній статті розглядається задача оптимального лінійного оцінювання функціонала

$$A\bar{\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{a}(j) \bar{\xi}(j) \quad \text{від невідомих значень вектор-}$$

ної стаціонарної послідовності $\bar{\xi}(j) = \{\xi_k(j)\}_{k=1}^T$ зі спектральною щільністю $F(\lambda) = \{f_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$ за даними спостережень послідовності $\bar{\xi}(j) + \bar{\eta}(j)$ при $j < 0$, де $\bar{\eta}(j) = \{\eta_k(j)\}_{k=1}^T$ – некорельована з $\bar{\xi}(j)$ векторна стаціонарна послідовність зі спектральною щільністю $G(\lambda) = \{g_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$.

2. Класичний метод лінійної екстраполяції

Нехай векторна послідовність $\bar{a}(j)$, що визначає функціонал $A\bar{\xi}$, задовольняє умовам

$$\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=1}^T |a_k(j)| < \infty, \quad \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) \sum_{k=1}^T |a_k(j)|^2 < \infty, \quad (1)$$

нехай спектральні щільності $F(\lambda) = \{f_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$ та $G(\lambda) = \{g_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$ задовольняють умову мінімальності [4]

$$\int_{-\pi}^{\pi} \text{Tr} \left[(F(\lambda) + G(\lambda))^{-1} \right] d\lambda < \infty. \quad (2)$$

Найкраща лінійна оцінка $\hat{A}\bar{\xi}$ характеризується двома умовами [3]:

$$\hat{A}\bar{\xi} \in H[\xi_k(n) + \eta_k(n), k = \overline{1, T}, n \in Z, n < 0]$$

$$A\bar{\xi} - \hat{A}\bar{\xi} \perp H[\xi_k(n) + \eta_k(n), k = \overline{1, T}, n \in Z, n < 0],$$

де $H[\xi_k(n) + \eta_k(n), k = \overline{1, T}, n \in Z, n < 0]$ – підпростір, породжений випадковими величинами $[\xi_k(n) + \eta_k(n), k = \overline{1, T}, n \in Z, n < 0]$ у гільбертовому просторі H випадкових величин зі скінченим другим моментом та нульовим математичним сподіванням. Ці умови дозволяють знайти спектральну характеристику $h(F, G)$ та середньоквадратичну похибку $\Delta(F, G)$ оптимальної лінійної оцінки функціонала $A\bar{\xi}$ у тому випадку, коли відомі щільності $F(\lambda), G(\lambda)$ та виконуються умови (1) і (2). Тоді:

$$h(F, G) = (A(e^{i\lambda})F(\lambda) - C(e^{i\lambda})) \times \\ \times (F(\lambda) + G(\lambda))^{-1}, \quad (3)$$

$$\Delta(F, G) = \langle \bar{c}, B\bar{c} \rangle + \langle \bar{a}, R\bar{a} \rangle, \quad (4)$$

де $C(e^{i\lambda}) = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{c}(j)e^{ij\lambda}$, $\bar{c} = \{\bar{c}(k)\}_{k=0}^{\infty} = B^{-1}D\bar{a}$,

$\bar{a} = \{\bar{a}(k)\}_{k=0}^{\infty}$, $\langle a, b \rangle$ – позначення скалярного добутку; B, D, R – матриці, що складаються із матриць-блоків розмірності $T \times T$:

$$B(k, j) = \frac{1}{(2\pi)^T} \int_{-\pi}^{\pi} [F(\lambda) + G(\lambda)]^{-1} e^{ij\lambda - k\lambda} d\lambda,$$

$$D(k, j) = \frac{1}{(2\pi)^T} \int_{-\pi}^{\pi} [F(\lambda)(F(\lambda) + G(\lambda))^{-1}] \times \\ \times e^{ij\lambda - k\lambda} d\lambda,$$

$$R(k, j) = \frac{1}{(2\pi)^T} \int_{-\pi}^{\pi} [F(\lambda)(F(\lambda) + G(\lambda))^{-1} \times \\ \times G(\lambda)] e^{ij\lambda - k\lambda} d\lambda, \quad k, j = 0, 1, \dots$$

Теорема 1. Нехай $\bar{\xi}(j) = \{\xi_k(j)\}_{k=1}^T$, $\eta(j) = \{\eta_k(j)\}_{k=1}^T$ некорельовані між собою стаціонарні стохастичні векторні послідовності, які мають спектральні щільності $F(\lambda) = \{f_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$, $G(\lambda) = \{g_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$, що задовольняють умову (2). Спектральна характеристика $h(F, G)$ та величина середньоквадратичної похибки $\Delta(F, G)$

оптимальної оцінки функціонала $A\bar{\xi}$ від невідомих значень послідовності $\bar{\xi}(j)$ за даними спостережень послідовності $\bar{\xi}(j) + \eta(j)$, $j < 0$, обчислюється за формулами (3), (4).

Наслідок 1. Нехай $\bar{\xi}(j) = \{\xi_k(j)\}_{k=1}^T$ – стаціонарна стохастична векторна послідовність, яка має спектральну щільність $F(\lambda) = \{f_{kl}(\lambda)\}_{k,l=1}^T$, що задовольняє умову мінімальності [4]

$$\int_{-\pi}^{\pi} \text{Tr}[F(\lambda)^{-1}] d\lambda < \infty.$$

Спектральна характеристика $h(F)$ та величина середньоквадратичної похибки $\Delta(F)$ оптимальної оцінки функціонала $A\bar{\xi}$ від невідомих значень послідовності $\bar{\xi}(j)$ за даними спостережень $\bar{\xi}(j)$, $j < 0$ обчислюється за формулами:

$$h(F) = A(e^{i\lambda}) - C(e^{i\lambda})F(\lambda)^{-1}, \quad (5)$$

$$\Delta(F) = \langle B^{-1}\bar{a}, \bar{a} \rangle, \quad (6)$$

де $C(e^{i\lambda}) = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{c}(j)e^{ij\lambda}$, $\bar{c} = B^{-1}\bar{a}$, B – матриця, складена із матриць-блоків розмірності $T \times T$:

$$B(k, j) = \frac{1}{(2\pi)^T} \int_{-\pi}^{\pi} [F(\lambda)^{-1}] e^{ij\lambda - k\lambda} d\lambda, \\ k, j = 0, 1, \dots$$

3. Мінімаксний метод лінійної екстраполяції

Формулами (3)-(6) можна користуватись лише тоді, коли відомі матриці спектральних щільностей $F(\lambda)$, $G(\lambda)$ векторних стаціонарних послідовностей. Якщо задається лише множина $D = D_F \times D_G$ можливих щільностей, то застосовують мінімаксний підхід до задач оцінювання функціоналів від векторних стаціонарних послідовностей.

Означення 1. Спектральні щільності $F^0(\lambda)$, $G^0(\lambda)$ називаються найменш сприятливими в класі D для оптимальної лінійної екстраполяції функціонала $A\bar{\xi}$, якщо виконуються співвідношення:

$$\Delta(h(F^0, G^0); F^0, G^0) = \max_{(F, G) \in D} \Delta(h(F, G); F, G).$$

Означення 2. Спектральна характеристика $h^0(\lambda)$ оптимальної лінійної оцінки функціонала $A\bar{\xi}$ називається мінімаксною (робастною), якщо виконуються умови:

$$h^0(\lambda) \in H_D = \bigcap_{(F,G) \in D} L_2^-(F+G),$$

$$\min_{h \in H_D} \sup_{(F,G) \in D} \Delta(h; F, G) = \sup_{(F,G) \in D} \Delta(h^0; F, G).$$

Лема 1. Спектральні щільності $F^0(\lambda), G^0(\lambda)$ найменш сприятливі в $D = D_F \times D_G$ для оптимальної екстраполяції функціонала $A\bar{\xi}$, якщо матричні функції $F^0(\lambda)(F^0(\lambda) + G^0(\lambda))^{-1}G^0(\lambda)$, $(F^0(\lambda) + G^0(\lambda))^{-1}$, $F^0(\lambda)(F^0(\lambda) + G^0(\lambda))^{-1}$ задають B^0, D^0, R^0 , які визначають розв'язок екстремальної задачі:

$$\max_{(F,G) \in D} \langle D a, B^{-1} D a \rangle + \langle R a, a \rangle = \langle D^0 a, (B^0)^{-1} D^0 a \rangle + \langle R^0 a, a \rangle. \quad (7)$$

Мінімаксну спектральну характеристику $h^0 = h(F^0, G^0)$ можна обчислити за формулою (3) за умови, що $h(F^0, G^0) \in H_D$.

Найменш сприятливі спектральні щільності $F^0(\lambda), G^0(\lambda)$ та мінімаксна (робастна) спектральна характеристика $h^0(\lambda) \in H_D$ утворюють сідлову точку функції $\Delta(h; F, G)$. Нерівності сідлової точки:

$$\Delta(h; F^0, G^0) \geq \Delta(h^0; F^0, G^0) \geq \Delta(h^0; F, G), \\ \forall (F, G) \in D, \forall h \in H_D$$

виконуються, коли $h^0 = h(F^0, G^0) \in H_D$, де (F^0, G^0) - розв'язок задачі на умовний екстремум

$$\Delta(h(F^0, G^0); F^0, G^0) = \sup_{(F,G) \in D} \Delta(h(F^0, G^0); F, G)$$

Розглянемо множину спектральних щільностей:

$$D_{0,0} = \left\{ (F(\lambda), G(\lambda)) \mid \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} F(\lambda) d\lambda = P_1, \right. \\ \left. \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} G(\lambda) d\lambda = P_2 \right\}$$

Використовуючи правило множників Лагранжа знайдемо такі співвідношення для визначення найменш сприятливих щільностей $F^0(\lambda), G^0(\lambda)$:

$$A(e^{i\lambda})G^0(\lambda) + C^0(e^{i\lambda}) = \bar{\alpha}(F^0(\lambda) + G^0(\lambda)), \quad (8)$$

$$A(e^{i\lambda})F^0(\lambda) - C^0(e^{i\lambda}) = \bar{\beta}(F^0(\lambda) + G^0(\lambda)), \quad (9)$$

де $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_T)$, $\bar{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_T)$ - невизначені множники Лагранжа.

Теорема 2. Нехай щільності $F^0(\lambda) \in D_F^0, G^0(\lambda) \in D_G^0$ задовольняють умову (2). Спектральні щільності $F^0(\lambda), G^0(\lambda)$ найменш сприятливі в класі $D_{0,0} = D_F^0 \times D_G^0$ для оптимальної екстраполяції функціонала $A\bar{\xi}$, якщо $F^0(\lambda), G^0(\lambda)$ є розв'язком рівнянь (8), (9) і визначають розв'язок екстремальної задачі (7). Функція $h(F^0, G^0)$, що обчислена за формулою (3), є мінімаксною спектральною характеристикою оптимальної оцінки функціонала $A\bar{\xi}$.

3. Висновки

Отримані результати дозволяють знаходити спектральну характеристику та середньоквадратичну похибку оптимальної лінійної оцінки функціонала $A\bar{\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{a}(j)\tilde{\xi}(j)$ від невідомих значень векторної стаціонарної послідовності $\tilde{\xi}(j)$.

Список використаних джерел

1. Grenander U. A prediction problem in game theory // Ark. Mat. – 1957. – Vol. 3. – p.371-379.
2. Кассам С.А., Пур Г.В. Робастные методы обработки сигналов: Обзор // Труды института инженеров по электронике и радиоэлектронике. – 1985. – Т. 73. N 3. – с. 54-110.
3. Колмогоров А.Н. Теория вероятностей и математическая статистика. Сборник статей. – М.: Наука, 1986. – 534 с.
4. Розанов Ю.А. Стационарные случайные процессы. – М.: Наука, 1990. – 272 с.
5. Vastola K.S. and Poor H.V. An analysis of the effects of spectral uncertainty on Wiener filtering // Automatica. – 1983. – Vol. 28. – p.289-293.

Надійшла до редколегії 09.02.2007

УДК 512.544

Т. М. Немчанінова

**Групи з нескінченним центральним
нециклічним метациклічним
комутантом**

Охарактеризовано групи G з центральним нескінченним нециклічним метациклічним комутантом G' .

Ключові слова: комутант, центральна підгрупа, метациклічна підгрупа.

У роботі [5] описано скінченнопороджені групи з комутантом порядку p . У роботах [2, 3] розглядалися групи з комутантом порядку pq і pqr , де p, q, r — не обов'язково різні прості числа. Залишилися нерозглянутими групи з центральним метациклічним комутантом типу (p^2, p) .

У даній роботі розглядаються довільні групи G з центральним нециклічним метациклічним комутантом. Установлено, що група G завжди містить таку нормальну 3-породжену групу A , що $A' = G'$ (теорема 1). Охарактеризовано будову підгрупи A і, в залежності від цього, будову групи G (теорема 2).

Групи з центральним нециклічним метациклічним комутантом у подальшому будемо називати τ -групами.

З леми 2.2 роботи [7] випливає наступне

Твердження 1. Нехай G — група, $H = \langle a, b \rangle$ — її підгрупа, $[a, b] = c$, $[a, c] = 1$, $[b, c] = 1$, тобто $c \in Z(H)$. Тоді

$$[a^i, b^j] = [a, b^{ij}] = [a^{ij}, b] = [a, b]^{ij} = [a^i, b^j] = [a, b^j]^i = [a^j, b^i] = [a, b^i]^j = [a^j, b]^i$$

для всіх $i, j \in \mathbb{Z}$.

Означення 1 ([6]). Група G називається FC -групою, якщо кожний її елемент має скінченне число спряжених. Періодична FC -група називається локально нормальною.

Твердження 2 ([6]). Будь-яка FC -група G містить таку центральну одиничну чи без скруту підгрупу Z , що G/Z — локально нормальна група.

T. M. Nemchaninova

**Groups with infinite central noncyclic
metacyclic commutant**

The groups G with the central infinite metacyclic noncyclic commutant G' are characterized.

Key Words: commutant, central subgroup, metacyclic subgroup.

Лема 1. Будь-яка τ -група G містить таку нормальну підгрупу

$$D = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle,$$

що $D' = G' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle$, де $x = [x_1, x_2]$, $y = [x_3, x_4]$.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Тоді, за теоремою 8.1.2 із [1],

$$G' = \langle z_1 \rangle \times \langle z_2 \rangle \leq Z(G).$$

За теоремою 1 із [4], у групі G існують елементи x_1, x_2 такі, що у фактор-групі $G/\langle z_1 \rangle$ з центральним циклічним комутантом

$$(G/\langle z_1 \rangle)' = \langle \langle z_1 \rangle \cdot z_2 \rangle$$

суміжний клас $\langle z_1 \rangle \cdot z_2 = \langle z_1 \rangle [x_1, x_2]$.

Покладемо $x = [x_1, x_2]$. Тоді очевидно, що $G' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle$. Нехай $D = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle$. Тоді $G' = \langle x, y \rangle \leq D'$. Оскільки для підгрупи D групи G маємо, що $D' \leq G'$, то $D' = G'$. Лемі доведено. $\square$

Лема 2. Нехай G — примарна τ -група. Тоді вона містить підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$ таку, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u \neq 1$, $v \neq 1$, $[a, b] = u$, $[a, c] = v$.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Тоді, за лемою 1, без порушення загальності можна вважати, що $G = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle$ — скінченна група, $G' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle$, $x = [x_1, x_2]$, $y = [x_3, x_4]$, $x \notin \langle y \rangle$, $y \notin \langle x \rangle$.

Покладемо

$$[x_1, x_3] = u_{13} = x^{\alpha_{13}} y^{\beta_{13}},$$

$$[x_2, x_3] = u_{23} = x^{\alpha_{23}} y^{\beta_{23}},$$

$$[x_1, x_4] = u_{14} = x^{\alpha_{14}} y^{\beta_{14}},$$

$$[x_2, x_4] = u_{24} = x^{\alpha_{24}} y^{\beta_{24}}.$$

$\alpha_{ij}, \beta_{ij} \in \mathbb{Z}$, $1 \leq i, j \leq 4$.

Покажемо спочатку, що G містить таку підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G'$. Можливі випадки:

- 1) числа $\alpha_{13}, \beta_{13}, \alpha_{24}, \beta_{24}$ кратні p ;
- 2) хоча б одне із чисел $\alpha_{13}, \beta_{13}, \alpha_{24}, \beta_{24}$ не кратне p .

Випадок 1. Покладемо $a = x_1$, $b = x_2x_3$, $c = x_4$, $A = \langle a, b, c \rangle$. Ясно, що $\langle u_{13}, u_{24} \rangle \leq \Phi(G')$, $A' \leq G'$ і $\langle [a, b], [b, c] \rangle \leq A'$. За твердженням 1 маємо, що

$$\begin{aligned} [a, b] &= [x_1, x_2x_3] = [x_1, x_2] \cdot [x_1, x_3] = x \cdot u_{13}, \\ [b, c] &= [x_2x_3, x_4] = [x_2, x_4] \cdot [x_3, x_4] = u_{24} \cdot y. \end{aligned}$$

Оскільки $G' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle$, $\langle u_{13}, u_{24} \rangle \leq \Phi(G')$, то $\langle [a, b], [b, c] \rangle = G'$, а отже, $A' = G'$. Випадок 1 розглянуто повністю.

Випадок 2. У цьому випадку при $(\alpha_{13}, p) = 1$ покладемо $a = x_1$, $b = x_3$, $c = x_4$; при $(\beta_{13}, p) = 1$ покладемо $a = x_1$, $b = x_2$, $c = x_3$; при $(\alpha_{24}, p) = 1$ покладемо $a = x_2$, $b = x_3$, $c = x_4$; при $(\beta_{24}, p) = 1$ покладемо $a = x_1$, $b = x_2$, $c = x_4$.

Нехай тепер $A = \langle a, b, c \rangle$. Зрозуміло, що $A' = \langle [a, b], [a, c], [b, c] \rangle$.

Тепер, при $(\alpha_{13}, p) = 1$ маємо, що

$$\begin{aligned} A' &= \langle [a, b], [b, c] \rangle = \langle [a, b] \rangle \cdot \langle [b, c] \rangle = \\ &= \langle x^{\alpha_{13}} y^{\beta_{13}} \rangle \cdot \langle y \rangle = G'. \end{aligned}$$

Аналогічно при $(\beta_{13}, p) = 1$, $(\alpha_{24}, p) = 1$, $(\beta_{24}, p) = 1$ також одержимо, що $A' = G'$. Випадок 2 розглянуто повністю.

Отже, ми знайшли підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, для якої $A' = G'$.

За теоремою 8.1.2 з [1] маємо, що $G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$. За означенням τ -групи, $u \neq 1$, $v \neq 1$, і, без порушення загальності, можна вважати, що $|u| \geq |v|$, $\exp A' = |u|$, $[a, b] = u$.

Покладемо $f = [a, c]$, $h = [b, c]$. Тоді $G' = \langle u, f, h \rangle$, а отже, знайдуться цілі числа m, n, r такі, що $v = u^m f^n h^r$ і $f = u^\alpha v^\beta$, $h = u^\gamma v^\delta$. Звідси, $v = u^{m+\alpha n+\gamma r} \cdot v^{\beta n+\delta r}$. Оскільки $\langle u \rangle \cap \langle v \rangle = 1$, то $\beta n + \delta r \equiv 1 \pmod{v}$, $m + \alpha n + \gamma r \equiv 1 \pmod{u}$. З цього випливає, що βn і δr не можуть одночасно ділитися на p .

Нехай β не ділиться на p і $|u^\alpha| \leq |v|$. Тоді $|f| = |v^\beta| = |v|$, $\langle u \rangle \cap \langle f \rangle = 1$. Отже, $G' =$

$\langle u \rangle \times \langle f \rangle$. Без порушення загальності можна вважати, що $v = f$, $G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $[a, b] = u$, $[a, c] = v$.

Нехай тепер δ не ділиться на p і $|u^\gamma| \leq |v|$. Тоді для h , як і для f , одержимо, що $G' = \langle u \rangle \times \langle h \rangle$. Покладемо $a_1 = b$, $b_1 = a$, $c_1 = c$, $u_1 = u^{-1}$, $v = h$, $G' = \langle u_1 \rangle \times \langle v \rangle = A'$, $A = \langle a_1, b_1, c_1 \rangle$, $[a_1, b_1] = u_1$, $[a_1, c_1] = v$. Тепер, замінюючи u_1 на u , c_1 на c , a_1 на a , b_1 на b , одержимо, що $A = \langle a, b, c \rangle$, $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $[a, b] = u$, $[a, c] = v$, і в цьому випадку лему доведено.

Залишаються випадки:

- (i) $|u^\alpha| < |v|$, β не ділиться на p ;
- (ii) $|u^\gamma| > |v|$, δ не ділиться на p .

Випадок (i). У цьому випадку $|f| > |v|$ і $G' = \langle v \rangle \cdot \langle f \rangle = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$.

Нехай $\langle w \rangle = \langle u \rangle \cap \langle f \rangle$. Оскільки $|f| > |v|$, $|G' : \langle u \rangle| = |v|$, $G' = \langle u \rangle \cdot \langle f \rangle$, то $|\langle f \rangle : \langle w \rangle| = |v|$ і $|w| \neq 1$. Зрозуміло, що $w = u^{i_1 p^{\alpha_1}} = f^{j_1 p^{\beta_1}}$, а тому $|\langle f \rangle : \langle w \rangle| = |v| = p^{\beta_1}$, де $i_1, j_1 \in \mathbb{Z}$, $\alpha_1, \beta_1 \in \mathbb{N}$, $p^{\alpha_1} < |u|$, $p^{\beta_1} < |f|$. Оскільки $\exp G' = |u|$, то $|u| \geq |f|$, а тому $\alpha_1 - \beta_1 \geq 0$.

Покладемо $d = u^{i_1 p^{\alpha_1 - \beta_1}} \cdot f^{-j_1}$. Зрозуміло, що $G' = \langle u \rangle \cdot \langle d \rangle$, звідси $|d| \geq |v| = p^{\beta_1}$. Далі

$$\begin{aligned} d^{p^{\beta_1}} &= (u^{i_1 p^{\alpha_1 - \beta_1}} \cdot f^{-j_1})^{p^{\beta_1}} = \\ &= u^{i_1 p^{\alpha_1}} \cdot f^{-j_1 p^{\beta_1}} = w \cdot w^{-1} = 1. \end{aligned}$$

Оскільки $|d| \geq p^{\beta_1}$, $d^{p^{\beta_1}} = 1$, то $|d| = p^{\beta_1}$, $\langle u \rangle \cap \langle d \rangle = 1$, $G' = \langle u \rangle \times \langle d \rangle$.

Нехай $c_1 = u^{i_1 p^{\alpha_1 - \beta_1}} \cdot c^{-j_1}$. За вибором, $(j_1, p) = 1$, а тому $A = \langle a, b, c_1 \rangle$, $[a, b] = u$,

$$\begin{aligned} [a, c_1] &= [a, u^{i_1 p^{\alpha_1 - \beta_1}} \cdot c^{-j_1}] = \\ &= [a, u^{i_1 p^{\alpha_1 - \beta_1}}] \cdot [a, c^{-j_1}] = \\ &= u^{i_1 p^{\alpha_1 - \beta_1}} \cdot f^{-j_1} = d. \end{aligned}$$

Перепозначаючи d через v , c_1 через c , одержимо, що $A = \langle a, b, c \rangle$ — шукана підгрупа групи G , і випадок (i) розглянуто повністю.

Випадок (ii). У цьому випадку $G' = \langle u \rangle \cdot \langle h \rangle$, $|h| > |v|$. Покладемо $u_1 = u^{-1}$, $a_1 = b$, $b_1 = a$, $c_1 = c$, $f_1 = h$. Тоді $A = \langle a_1, b_1, c_1 \rangle$, $[a_1, b_1] = u_1$, $[a_1, c_1] = f_1$, і ми прийшли до умови випадку (i), у якому шукана підгрупа A вже знайдена. Лему доведено. $\square$

Наслідок 1. Нехай G — періодична τ -група. Тоді вона містить таку скінченну нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $[a, b] = u \neq 1$, $[a, c] = v \neq 1$.

Доведення. Нехай G — досліджувана група.

Якщо G — примарна група, то наслідок безпосередньо випливає з леми 2.

Нехай G — непримарна група. Тоді $G = \times_{i \in I} P_i$, $I \subseteq \mathbb{N}$, P_i — силовська p_i -підгрупа групи G , P'_i — центральна метациклічна підгрупа із P_i . Оскільки періодична метациклічна група є скінченною групою, то існує лише скінченне число підгруп P_i , для яких $P'_i \neq 1$.

За означенням τ -групи, G' — нециклічна центральна метациклічна підгрупа з G . Із цього випливає, що існує хоча б одне i , для якого P'_i — нециклічна група, і для будь-якого i P'_i — центральна метациклічна група. Тепер зрозуміло, що $G = H \times D$, де H — прямий добуток тих підгруп P_i , для яких P'_i — циклічна група, і D — прямий добуток тих P_i , для яких P'_i — нециклічна група.

За теоремою 1 із [4], будь-яка підгрупа $P_i \leq H$ містить підгрупу $A_i = \langle a_i, b_i, c_i \rangle$, у якій $A'_i = \langle u_i \rangle = \langle [a_i, b_i] \rangle$, $c_i = 1$, $A'_i = P'_i = \langle u_i \rangle \times \langle v_i \rangle$, $\langle v_i \rangle = 1$.

Нехай $P_i \leq D$. Тоді, за лемою 1, $P_i \geq A_i = \langle a_i, b_i, c_i \rangle$, $A'_i = \langle u_i \rangle \times \langle v_i \rangle = P'_i$, $[a_i, b_i] = u_i$, $[a_i, c_i] = v_i$. Зрозуміло тепер, що

$$G' = H' \times D' = \times_{j \in J} P'_j = \times_{j \in J} (\langle u_j \rangle \times \langle v_j \rangle),$$

$$J \subseteq I, \quad |J| < \infty,$$

$$G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle, \quad \text{де } u = \prod_{j \in J} u_j, \quad v = \prod_{j \in J} v_j.$$

Покладемо $a = \prod_{j \in J} a_j$, $b = \prod_{j \in J} b_j$, $c = \prod_{j \in J} c_j$, $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді, очевидно, $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b]$, $v = [a, c]$. Наслідок доведено. $\square$

Наслідок 2. Довільна τ -група G зі скінченним комутантом G' містить таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b]$, $v = [a, c]$.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Зрозуміло, що вона задовольняє умову леми 1, за твердженням якої, без порушення загальності, можна вважати, що $G = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle$.

Припустимо спочатку, що G — періодична група. Тоді твердження цього наслідку випливає з наслідку 1.

Нехай у подальшому G — неперіодична група. Тоді очевидно, що G — скінченнопороджена FC-група, яка, за твердженням 2, містить таку центральну підгрупу Z без скруту, що G/Z —

локально нормальна група. Тоді очевидно, що G/Z — скінченна τ -група, $G' \simeq \bar{G}'$, де $\bar{G} = G/Z$.

За наслідком 1, можна вважати, що $\bar{G} = \langle \bar{a}, \bar{b}, \bar{c} \rangle$, $\bar{G}' = \langle \bar{u} \rangle \times \langle \bar{v} \rangle$, $|\bar{u}| \leq |\bar{v}| < \infty$, $\pi(\bar{u}) = \pi(\bar{v})$, $\bar{u} = [\bar{a}, \bar{b}]$, $\bar{v} = [\bar{a}, \bar{c}]$, $\bar{u} = Z \cdot u$, $\bar{v} = Z \cdot v$, $\bar{a} = Za$, $\bar{b} = Zb$, $\bar{c} = Zc$, $a, b, c, u, v \in G$.

Оскільки $(G/Z)' = X/Z$, де $X = G' \times Z$, $|G'| < \infty$, Z — група без скруту, $G' \cap Z = 1$, $(G/Z)' = \langle Zu \rangle \times \langle Zv \rangle$, то G' співпадає з періодичною частиною $T(X)$ групи X , і $T(X) = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$.

Зрозуміло, що $Zu = Z[a, b]$, $Zv = Z[a, c]$, де $\langle u \rangle$ — періодична частина групи $Z \times \langle u \rangle$, $\langle v \rangle$ — періодична частина групи $Z \times \langle v \rangle$. Звідси, $\langle u \rangle = \langle [a, b] \rangle$, $\langle v \rangle = \langle [a, c] \rangle$ і, без порушення загальності, маємо, що $u = [a, b]$, $v = [a, c]$.

Покладемо $A = \langle a, b, c \rangle$, тоді $A' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle = G'$, і A — шукана група. Наслідок доведено. $\square$

Лема 3. Нехай G — τ -група з нескінченним комутантом G' , який містить неединичний елемент скінченного порядку. Тоді G містить таку нормальну підгрупу $A = ((\langle u \rangle \cdot \langle b \rangle \cdot \langle v \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $[a, b] = u \neq 1$, $|u| < \infty$, $[a, c] = v$, $|v| = |c| = \infty$.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Тоді, за лемою 1, G містить таку нормальну підгрупу $D = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle$, що $D' = G' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle$, $[x_1, x_2] = x \neq 1$, $[x_3, x_4] = y$, $x \notin \langle y \rangle$, $y \notin \langle x \rangle$.

Оскільки $|G'| = \infty$, то, без порушення загальності, можна вважати, що $|y| = \infty$. За умовою, $D' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $|u| = n > 1$, $|v| = \infty$.

Покладемо $z = v^n$. Ясно, що

$$D'/\langle z \rangle = (\langle u \rangle \times \langle z \rangle / \langle z \rangle) \times (\langle v \rangle / \langle z \rangle),$$

$$|\langle u \rangle \times \langle z \rangle / \langle z \rangle| = |\langle v \rangle / \langle z \rangle| = n.$$

За наслідком 2, в D існують елементи a, b, c , для яких $\langle z \rangle u = \langle z \rangle x$, $\langle z \rangle v = \langle z \rangle y$, де $x = [a, b]$, $y = [a, c]$, а тому $|\langle z \rangle x| = |\langle z \rangle u| = |u| = n$, $|\langle z \rangle v| = |\langle z \rangle y| = n = |\langle z \rangle v|$. Оскільки $D'/\langle z \rangle = (\langle u \rangle \times \langle z \rangle / \langle z \rangle) \times (\langle v \rangle / \langle z \rangle)$, $T(G')\langle u \rangle, \langle z \rangle \times \langle u \rangle = \langle z \rangle \cdot \langle x \rangle$, $\langle v \rangle = \langle z \rangle \cdot \langle y \rangle$, то, без порушення загальності, можна вважати, що $v = y = [a, c]$ і $D' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle = A'$, де $A = \langle a, b, c \rangle$. Оскільки $|y| = |v| = \infty$ і $G' \leq Z(G)$, то, за твердженням 1, для будь-якого $n \in \mathbb{N}$

$$y^n = [a, c]^n = [a^n, c], \quad [a, c^n] \neq 1,$$

а тому $a^n \neq 1$, $c^n \neq 1$, тобто $|a| = |c| = \infty$. Зрозуміло, що $\langle x \rangle \cap \langle y \rangle = \langle x^n \rangle = \langle x \rangle \cap \langle z \rangle$, де $z = y^n$, $x^n = y^{kn}$, $k \in \mathbb{Z}$.

Якщо тепер $x^n = 1$, то $G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle = \langle x \rangle \times \langle v \rangle$. Тому, без порушення загальності, можемо вважати, що $\langle u \rangle = \langle x \rangle$ і $[a, b] = u$. У цьому випадку лему доведено.

Нехай $x^n \neq 1$. Покладемо $u_1 = x \cdot y^{-k}$. Тоді, очевидно,

$$u_1^n = x^n y^{-kn} = y^{kn} y^{-kn} = 1,$$

і

$$G' = \langle x \rangle \cdot \langle y \rangle = \langle u_1 \rangle \cdot \langle y \rangle = \langle u_1 \rangle \times \langle v \rangle.$$

Зрозуміло, що $[a, bc^{-k}] = xy^{-k} = u_1$. Покладемо $b_1 = bc^{-k}$, тоді $A = \langle a_1, b_1, c \rangle$, $A' = \langle u_1 \rangle \times \langle v \rangle$. Перепозначимо тепер u_1 через u , b_1 через b . Тоді $A = \langle a, b, c \rangle$, $[a, b] = u$, $[a, c] = v$, $|v| = \infty$.

Оскільки $A' = G' \leq Z(G)$, то, за твердженням 1, $\forall r \in \mathbb{N}$, маємо, що $[a^r, c] = [a, c^r] = v^r \neq 1$. Звідси, $a^r \notin C_G(\langle c \rangle)$ і $c^r \notin C_G(\langle a \rangle)$, а отже, $|a| = |c| = \infty$.

Покладемо $B = A' \cdot \langle a \rangle$. Оскільки $A' = G' \leq Z(G)$, то $B' = 1$, $B \triangleleft A = B \cdot \langle a \rangle \cdot \langle c \rangle$. З умов $G' \leq Z(G)$, $|u| = n$, $[a, b] = u$ і твердження 1, $1 = u^n = [a^n, b] = [a, b^n]$. Звідси, $C_G(\langle a \rangle) \geq \langle b^n \rangle$, $C_G(\langle b \rangle) \geq \langle a^n \rangle$.

Покажемо, що $B \cap \langle c \rangle = 1$. Нехай це не так. Тоді $B \cap \langle c \rangle = \langle c^s \rangle$, $s > 1$, $s \in \mathbb{N}$, де $c^s = fa^i$, $f \in G'$, $i \in \mathbb{Z}$. Знову, за твердженням 1,

$$[a, c^s] = v^s = [a, fa^i] = [a, f] \cdot [a, a^i] = 1,$$

що неможливо, оскільки $|v^s| = \infty$. Отже, $B \cap \langle c \rangle = 1$, і в A існує нормальна підгрупа $C = B \lambda \langle c \rangle$, $A = C \cdot \langle b \rangle$, і, за попереднім, $B = A' \times \langle a \rangle$. Лему доведено. $\square$

Лема 4. Нехай G — τ -група і G' — група без скруту. Тоді G містить таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $[a, b] = u$, $[a, c] = v$, $|u| = |v| = |a| = |b| = |c| = \infty$, $A = ((A' \times \langle a \rangle) \lambda \langle b \rangle) \lambda \langle c \rangle$.

Доведення. Нехай G — з умов леми. Тоді $G' = \langle x \rangle \times \langle y \rangle$, $|x| = |y| = \infty$. Зрозуміло, що група $G'/\langle x^4 \rangle$ задовольняє умову леми 3, за твердженням якої G містить такі елементи a, b, c , що

$$(G'/\langle x^4 \rangle)' = \langle \langle x^4 \rangle x \rangle \times \langle \langle x^4 \rangle y \rangle$$

і

$$\langle x^4 \rangle x = \langle x^4 \rangle [a, b], \quad \langle x^4 \rangle y = \langle x^4 \rangle [a, c].$$

Покладемо $[a, c] = v$, $[a, b] = u$. Тоді

$$\begin{aligned} G'/\langle x^4 \rangle &= (\langle x \rangle / \langle x^4 \rangle) \times (\langle x^4 \rangle \times \langle y \rangle / \langle x^4 \rangle) = \\ &= \langle \langle x^4 \rangle u \rangle \times \langle \langle x^4 \rangle v \rangle, \end{aligned}$$

де $|\langle x^4 \rangle u| = 4$, $|\langle x^4 \rangle v| = \infty$. Звідси $\langle x^4 \rangle \cap \langle v \rangle = 1$, $G' = \langle x \rangle \times \langle v \rangle$. За умовою $T(G') = 1$, а тому $|u| = \infty$, $\langle u \rangle \cap \langle v \rangle = 1$, $u^4 \in \langle x^4 \rangle$, і, отже, $\langle x^4 \rangle = \langle u^4 \rangle$. Із цього випливає, що $G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$.

Покладемо $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді $G' \geq A' \geq \langle u \rangle \times \langle v \rangle = G'$, тобто $A' = G'$.

Оскільки $G' \leq Z(G)$, то $\forall n \in \mathbb{N}$

$$[a^n, b] = [a, b^n] = u^n \neq 1,$$

$$[a^n, c] = [a, c^n] = v^n \neq 1.$$

Звідси $|a| = |b| = |c| = \infty$,

$$\begin{aligned} G' \cap \langle a \rangle &= G' \cap \langle b \rangle = G' \cap \langle c \rangle = 1 = \\ &= (G' \times \langle a \rangle) \cap \langle b \rangle = \\ &= (G' \times \langle a \rangle) \cap \langle c \rangle = \\ &= (G' \times \langle b \rangle) \cap \langle c \rangle. \end{aligned}$$

Із цього випливає, що в G існує нормальна підгрупа $A_1 = (G' \times \langle a \rangle) \lambda \langle b \rangle$ і $A = A_1 \langle c \rangle$. Припустимо, що $A_1 \cap \langle c \rangle \neq 1$. Тоді $A_1 \cap \langle c \rangle = \langle c^n \rangle$, $n \in \mathbb{N}$. Ясно, що $c^n = f \cdot a^i b^j$, $f \in G'$, $i, j \in \mathbb{Z}$. Тепер, за попереднім,

$$[a, c^n] = v^n = [a, fa^i b^j] = [a, f] [a, a^i] [a, b^j] = u^j.$$

Оскільки $\langle u \rangle \cap \langle v \rangle = 1$, $|u| = \infty$, то $j = 0$, тобто $1 = c^n = fa^i$, що суперечить попередньому — $(G' \times \langle a \rangle) \cap \langle c \rangle = 1$.

Отже, $A = ((A' \times \langle a \rangle) \lambda \langle b \rangle) \lambda \langle c \rangle$, і A — група з твердження леми. Лему доведено. $\square$

Теорема 1. Довільна τ -група G містить таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b] \neq 1$, $v = [a, c] \neq 1$. Кожний елемент із A' є комутатором деяких двох елементів із A , $G = A \cdot C_G(A)$.

Доведення. Нехай G — група з умови теореми.

Покажемо спочатку, що G містить підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$ із твердження теореми.

Нехай спочатку $|G'| < \infty$. Тоді існування підгрупи A випливає з наслідку 2.

Нехай $|G'| = \infty$. Тоді можливі випадки:

- 1) G' містить неодиначний елемент скінченного порядку;
- 2) G' — група без скруту.

Випадок 1. У цьому випадку існування підгрупи A впливає з леми 3.

Випадок 2. У цьому випадку існування підгрупи A впливає з леми 4.

Отже, завжди G містить підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$ з твердження теорема.

Нехай $f \in A'$. Тоді $f = u^i v^j$, де $i, j \in \mathbb{Z}$. Покладемо $d = b^i c^j$. Тепер, оскільки $A' = G' \leq Z(G)$, то, за твердженням 1,

$$\begin{aligned} [a, d] &= [a, b^i c^j] = [a, b^i] \cdot [a, c^j] = \\ &= [a, b]^i \cdot [a, c]^j = u^i v^j = f. \end{aligned}$$

Теорему доведено. $\square$

Лема 5. Нехай G — неперіодична τ -група, що не містить вільних абелевих підгруп рангу 2, $|G'| < \infty$. Тоді G містить таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b] \neq 1$, $v = [a, c] \neq 1$, $A = B \rtimes \langle c \rangle$, $|c| = \infty$, $B = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle a \rangle) \cdot \langle b \rangle$, $|b| < \infty$, G/A — періодична абелева група.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Зрозуміло, що G — FC-група. Тоді, за результатами роботи [6], G містить таку центральну підгрупу Z без скруту, що G/Z — локально нормальна група. За умовою Z — абелева група рангу 1. Оскільки G — нільпотентна група, $|G'| < \infty$, то G має періодичну частину $T(G)$ і знову, за умовою, $G/T(G)$ — абелева група рангу 1.

За теоремою 1, G містить таку нормальну підгрупу $D = \langle x_1, x_2, x_3 \rangle$, що $D' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [x_1, x_2] \neq 1$, $v = [x_1, x_3] \neq 1$, $|u| < \infty$, $|v| < \infty$. Ясно, що D має періодичну частину $T(D) \geq D' = G'$ і $D/T(D)$ — циклічна група. Можливі випадки:

1) $T(D) < D$;

2) $T(D) = D$.

Випадок 1. У цьому випадку D — неперіодична група і $D/T(D)$ — нескінченна циклічна група. Без порушення загальності можна вважати, що $|x_3| = \infty$, $\langle x_3 \rangle \cap T(D) = 1$ і $T(D) = D' \cdot \langle x_1 \rangle \cdot \langle x_2 \rangle$.

Покладемо $x_1 = a$, $x_2 = b$, $x_3 = c$, $T(D) = B$, $D = A$. Тоді $A = B \rtimes C$, де $B = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle a \rangle) \cdot \langle b \rangle$, $A' = G'$.

Зрозуміло, що в G існують нормальні неперіодичні підгрупи $G_1 = T(G) \cdot A = T(G) \rtimes \langle c \rangle$, $G_2 = G_1 \cdot Z$, $|c| = \infty$. Із цього випливає, що

$\langle c \rangle \cap Z = \langle z \rangle \neq 1$. Оскільки Z — абелева група рангу 1, $z \neq 1$, то $Z/\langle z \rangle$ — періодична група. Зрозуміло тепер, що G_2/A — періодична група і G/A — розширення підгрупи G_2/A за допомогою локально нормальної групи. Звідси маємо, що G/A — теж періодична група. Випадок 1 розглянуто повністю.

Випадок 2. У цьому випадку $|D| < \infty$. Покладемо $x_1 = a$, $x_2 = b$, $B = (D' \cdot \langle a \rangle) \cdot \langle b \rangle$. Тоді $|B| < \infty$, $|x_3| < \infty$. Покладемо $c = x_3 z$, де $z \in Z$, $z \neq 1$. Тоді $|c| = \infty$, $B \cap \langle c \rangle = 1$, $[a, b] = u$, $[a, c] = v$, $\langle c \rangle \cap Z = \langle z_1 \rangle \neq 1$. Зрозуміло, що в G існує підгрупа $A = B \rtimes \langle c \rangle = \langle a, b, c \rangle$, $A' = D' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle = G'$, $A \cap Z \neq 1$. Із цього випливає, що $(A \cdot Z)/A$ — періодична група. Оскільки G/Z — періодична група і $(A \cdot Z)/A$ — теж періодична група, то періодичною буде і G/A . Випадок 2 розглянуто повністю. Лему доведено. $\square$

Лема 6. Нехай G — τ -група, що має вільну абелеву підгрупу рангу 2, і $|G'| < \infty$. Тоді G має таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b] \neq 1$, $v = [a, c] \neq 1$, $|u| < \infty$, $|v| < \infty$, $A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle b \rangle) \rtimes \langle a \rangle) \rtimes \langle c \rangle$, $|a| = |c| = \infty$. Якщо при цьому G не містить вільних абелевих підгруп рангу 3, то G/A — періодична абелева група.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Оскільки $|G'| < \infty$ і $G' \leq Z(G)$, то G має періодичну частину $T(G) \geq G'$ і, за умовою, $G/T(G)$ має вільні абелеві підгрупи рангу 2.

Покажемо спочатку, що G містить підгрупу A з твердження леми.

Зрозуміло, що G — FC-група і, за результатами [6], G містить таку центральну підгрупу Z без скруту, що G/Z — локально нормальна група, тобто G/Z — періодична τ -група. Із цього випливає, що для будь-якої вільної абелевої підгрупи X рангу 2 фактор-група $(X \cdot Z)/Z$ — періодична група. Отже, Z містить вільні абелеві підгрупи рангу 2, і перетин Z з будь-якою такою підгрупою є вільною абелевою групою рангу 2.

За теоремою 1, G містить таку нормальну підгрупу $D = \langle x_1, x_2, x_3 \rangle$, що $D' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [x_1, x_2]$, $v = [x_1, x_3]$, $|D'| < \infty$. Зрозуміло, що D має періодичну частину $T(D) \geq D' = G'$. Ясно, що неодиначна фактор-група $D/T(D)$ є вільною абелевою групою, ранг якої не перевищує числа 3.

Нехай $D/T(D)$ — вільна абелева група рангу 3. Тоді $|x_1| = |x_2| = |x_3| = \infty$ і

$$D = ((T(D) \lambda \langle x_1 \rangle) \lambda \langle x_2 \rangle) \lambda \langle x_3 \rangle.$$

Зрозуміло, що $T(D) = D' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$.

Покладемо $x_1 = a$, $x_2 = b$, $x_3 = c$, $D = A$. Тоді $A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle$ і A — шукана підгрупа.

Нехай $D/T(D)$ — вільна абелева група рангу 2. Тоді, без порушення загальності можемо вважати, що $D/T(D) = \langle T(D) \cdot x_1 \rangle \times \langle T(D) \cdot x_3 \rangle$. Звідси $|x_1| = |x_3| = \infty$, $|x_2| < \infty$. Покладемо $x_1 = a$, $x_2 = b$, $x_3 = c$, $D = A$. Тоді $|b| < \infty$, $|a| = |c| = \infty$, $A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle$ і A — шукана підгрупа.

Нехай далі $D/T(D)$ — нескінченна циклічна група. Тоді, без порушення загальності, можемо вважати, що $D/T(D) = \langle T(D) \cdot x_3 \rangle$. Звідси $|x_3| = \infty$, $|x_1| < \infty$, $|x_2| < \infty$,

$$D = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle x_2 \rangle) \cdot \langle x_1 \rangle) \lambda \langle x_3 \rangle.$$

Покладемо $x_3 = c$, $a = x_1 z$, де $z \in Z$, $z \notin \langle c \rangle$, $x_2 = b$, $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді

$$A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle.$$

$|c| = |a| = \infty$, і A — шукана підгрупа.

Нехай нарешті $T(D) = D$. Тоді $|x_1| < \infty$, $|x_2| < \infty$, $|x_3| < \infty$. Покладемо $a = x_1 z$, $z \in Z$, $z \neq 1$, $b = x_2$, $c = x_3 z_1$, $z_1 \in Z$, $z_1 \notin \langle a \rangle$ і $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді $A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle$, $|c| = |a| = \infty$, і A — шукана підгрупа.

Отже, ми знайшли підгрупу A з твердження лема.

Оскільки $|G'| < \infty$ і $G' \leq Z(G)$, то $\exp G' = n \in \mathbb{N}$ і, за твердженням 1, $G^n \leq Z(G)$. Звідси, A містить вільну абелеву підгрупу $X = \langle a^n \rangle \times \langle c^n \rangle$. За попереднім, $Z \cap X = Z_1$ — вільна абелева група рангу 2.

Якщо тепер G не містить вільних абелевих підгруп рангу 3, то Z — абелева група рангу 2, і Z/Z_1 — періодична група. Із цього випливає, що G/A — розширення періодичної підгрупи $(AZ)/A \cong Z/Z_1$ за допомогою періодичної групи, ізоморфної G/Z . Оскільки $G' \leq A$, то G/A — періодична абелева група. Лемі доведено. $\square$

Лема 7. Нехай G — τ -група, що має вільну абелеву підгрупу рангу 3, і $|G'| < \infty$. Тоді G має таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що

$A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b] \neq 1$, $v = [a, c] \neq 1$, $|u| < \infty$, $|v| < \infty$, $A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle$, $|a| = |b| = |c| = \infty$. Якщо при цьому G не містить вільних абелевих підгруп рангу 4, то G/A — періодична абелева група.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Оскільки $|G'| < \infty$ і $G' \leq Z(G)$, то G має періодичну частину $T(G) \geq G'$ і, за умовою, $G/T(G)$ має вільні абелеві підгрупи рангу 3.

Покажемо спочатку, що G містить підгрупу A з твердження лема.

Зрозуміло, що G — FC -група і, за результатами роботи [6], G містить таку центральну підгрупу Z без скруту, що G/Z — локально нормальна група, тобто G/Z — періодична τ -група. Із цього випливає, що для будь-якої вільної абелевої підгрупи X рангу 3 фактор-група $(XZ)/Z$ — періодична група. Отже, Z містить вільні абелеві підгрупи рангу 3, і перетин Z з будь-якою такою підгрупою є вільною абелевою групою рангу 3.

За теоремою 1, G містить таку нормальну підгрупу $D = \langle x_1, x_2, x_3 \rangle$, що $D' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [x_1, x_2]$, $v = [x_1, x_3]$, $|D'| < \infty$. Зрозуміло, що D має періодичну частину $T(D) \geq D' = G'$. Ясно, що неединична фактор-група $D/T(D)$ є вільною абелевою групою, ранг якої не перевищує числа 3.

Нехай $D/T(D)$ — вільна абелева група рангу 3. Тоді $|x_1| = |x_2| = |x_3| = \infty$ і

$$D = ((T(D) \lambda \langle x_1 \rangle) \lambda \langle x_2 \rangle) \lambda \langle x_3 \rangle.$$

Зрозуміло, що $T(D) = D' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$.

Покладемо $x_1 = a$, $x_2 = b$, $x_3 = c$. Тоді $A = (((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle$ і A — шукана підгрупа.

Нехай $D/T(D)$ — вільна абелева група рангу 2. Тоді, без порушення загальності, можна вважати, що $D/T(D) = \langle T(D) \cdot x_1 \rangle \times \langle T(D) \cdot x_3 \rangle$. Звідси $|x_1| = |x_3| = \infty$, $|x_2| < \infty$. Покладемо $a = x_1$, $c = x_3$. Тоді $D = ((D' \times \langle a \rangle) \lambda \langle c \rangle) \cdot \langle x_2 \rangle$. Оскільки $|G'| < \infty$ і $G' \leq Z(G)$, то $\exp G' = n \in \mathbb{N}$ і, за твердженням 1, $G^n \leq Z(G)$. Звідси, D містить вільну абелеву підгрупу $X = \langle a^n \rangle \times \langle c^n \rangle$. За попереднім, $Z \cap X = Z_1$ — вільна абелева група рангу 2.

Оскільки Z — абелева група без скруту, що містить вільні абелеві підгрупи рангу 3, то існує $z \in Z$ такий, що $z \in (Z \setminus Z_1)$ і $\langle z \rangle \cap Z_1 = 1$.

Покладемо $b = x_2 z$ і $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді $|b| = |c| = |a| = \infty$, $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$, і A — шукана підгрупа.

Нехай $D/T(D)$ — нескінченна циклічна група. Тоді, без порушення загальності, можемо вважати, що $D/T(D) = \langle T(D)x_3 \rangle$. Звідси $|x_3| = \infty$, $|x_1| < \infty$, $|x_2| < \infty$. Покладемо $x_3 = c$. Тоді $D = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle x_2 \rangle) \cdot \langle x_1 \rangle \lambda \langle c \rangle$.

Ясно, що $Z \cap \langle c \rangle = \langle z_3 \rangle \neq 1$. Оскільки Z — абелева група без скруту, що містить вільні абелеві підгрупи рангу 3, то Z містить підгрупу $\langle z_1 \rangle \times \langle z_2 \rangle \times \langle z_3 \rangle$, $|z_1| = |z_2| = |z_3| = \infty$.

Покладемо $a = x_1 z_1$, $b = x_2 z_2$, $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді $|a| = |b| = |c| = \infty$, $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$ — шукана підгрупа.

Нехай нарешті $T(D) = D$. Тоді $|x_1| < \infty$, $|x_2| < \infty$, $|x_3| < \infty$. За попереднім, Z містить підгрупу $\langle z_1 \rangle \times \langle z_2 \rangle \times \langle z_3 \rangle$, $|z_1| = |z_2| = |z_3| = \infty$. Покладемо $a = x_1 z_1$, $b = x_2 z_2$, $c = x_3 z_3$, $A = \langle a, b, c \rangle$. Тоді $|a| = |b| = |c| = \infty$, $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$ — шукана підгрупа.

Отже, ми знайшли підгрупу A з твердження леми.

Оскільки $|G'| < \infty$ і $G' \leq Z(G)$, то $\exp G' = n \in \mathbb{N}$ і, за твердженням 1, $G^n \leq Z(G)$. Звідси, A містить вільну абелеву підгрупу $X = \langle a^n \rangle \times \langle b^n \rangle \times \langle c^n \rangle$. За попереднім, $Z \cap X = Z_1$ — вільна абелева група рангу 3.

Якщо тепер G не містить вільних абелевих підгруп рангу 4, то Z — абелева група рангу 3, і Z/Z_1 — періодична група. Із цього випливає, що G/A — розширення періодичної підгрупи $(AZ)/A \cong Z/Z_1$ за допомогою періодичної групи, ізоморфної G/Z . Оскільки $G' \leq A$, то G/A — періодична абелева група. Лемі доведено. $\square$

Теорема 2. Довільна τ -група G містить таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle \leq Z(G)$, $u = [a, b] \neq 1$, $v = [a, c] \neq 1$, будь-який елемент із A' є комутатором елементів із A . При цьому правильне одне з тверджень:

- 1) $|A| < \infty$, $G = D \times B$ — періодична група, $D = \bigtimes_{i=1}^t P_i$, P_i — силовська p_i -підгрупа групи G з центральним нециклічним метациклічним комутантом, B — холловська підгрупа групи G з центральним циклічним комутантом;

2) G — неперіодична група, $A = B \lambda \langle c \rangle$, $|c| = \infty$, $B = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle a \rangle) \cdot \langle b \rangle$, $|b| < \infty$, G не містить вільних абелевих підгруп рангу 2, і G/A — періодична абелева група;

3) $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$, $|a| = |c| = \infty$; якщо при цьому G не містить вільних абелевих підгруп рангу 3, то G/A — періодична абелева група;

4) $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$, $|a| = |b| = |c| = \infty$; якщо при цьому G не містить вільних абелевих підгруп рангу 4, то G/A — періодична абелева група;

5) $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \cdot \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$, $|u| < \infty$, $|v| = |c| = |a| = \infty$;

6) $A = ((\langle u \rangle \times \langle v \rangle) \times \langle b \rangle) \lambda \langle a \rangle \lambda \langle c \rangle$, $|u| = |v| = |a| = |b| = |c| = \infty$.

Доведення. Нехай G — досліджувана група. Тоді, за теоремою 1, G містить таку нормальну підгрупу $A = \langle a, b, c \rangle$, що $A' = G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u = [a, b] \neq 1$, $v = [a, c] \neq 1$, і будь-який елемент із A' є комутатором деяких двох елементів із A . Можливі випадки:

1) $|G'| < \infty$;

2) $|G'| = \infty$.

Випадок 1. Нехай у цьому випадку G — періодична група. Тоді вона задовольняє умову наслідку 1, за яким для A та G правильне твердження 1.

Нехай G — неперіодична група, що не містить вільних абелевих підгруп рангу 2. Тоді G задовольняє умову леми 5, з якої випливає твердження 2.

Нехай далі G містить вільну абелеву підгрупу рангу 2. Тоді вона задовольняє умову леми 6, з якої випливає твердження 3.

Нехай G містить вільну абелеву підгрупу рангу 3. Тоді вона задовольняє умову леми 7, із якої випливає твердження 4. Випадок 1 розглянуто повністю.

Випадок 2. У цьому випадку $G' = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $|v| = \infty$, а тому G — неперіодична група.

Нехай $|u| < \infty$. Тоді G задовольняє умову леми 3, з якої випливає твердження 5.

Нехай $|u| = \infty$. Тоді G задовольняє умову леми 4, з якої випливає твердження 6. Випадок 2 розглянуто повністю. Теорему доведено. $\square$

Висновки

Розглянуто групи G з центральним нециклічним метациклічним комутантом. Установлено існування в G 3-породженої підгрупи A , для якої $A' = G'$. Охарактеризовано будову підгрупи A та групи G в залежності від будови A .

Список використаних джерел

1. Каргаполов М.И., Мерзляков Ю.И. Основы теории групп. — Москва: Наука, 1982. — 288 с.
2. Мазурок О.О. Класифікація груп з комутантом порядку pq // Класи груп з обмеженнями для підгруп: Зб. наук. пр. — Київ: Ін-т математики НАН України, 1997. — С. 65–67.
3. Мазурок О.О. Класифікація груп з деякими обмеженнями та комутантом порядку pqr . — Київ, 1998. — 56 с. — Деп. в ДНТБ України.
4. Немчанінова Т.М. Групи з нескінченним центральним циклічним комутантом // Доповіді НАН України. — 2007. — № 1. — С. 23–29.
5. Сергейчук В.В. Конечнопорожденные группы с коммутантом простого порядка // Укр. мат. журн. — 1978. — 30, № 6. — С. 789–796.
6. Черников С.Н. О строении групп с конечными классами сопряженных элементов // Докл. АН СССР. — 1957. — № 115. — С. 60–63.
7. Gorenstein D. Finite groups. — New York: Harper and Row, 1968. — 527 p.

Надійшла до редколегії 02.04.2007

УДК 519.21

Олександр О. Погоріляк, аспірант

Моделювання подвійно стохастичних процесів Пуассона з певною точністю та надійністю

В даній роботі розглядаються подвійно стохастичні процеси Пуассона або ще як їх називають процеси Кокса керовані випадковою інтенсивністю. А саме, розглянуто випадок коли інтенсивність є логарифмічно гауссовим випадковим полем. Пропонується метод моделювання таких процесів з наперед заданою точністю та надійністю.

Ключові слова: логарифмічно гауссові процеси Кокса, моделювання, точність, надійність.

E-mail: alex_pogoriliak@ukr.net

Вступ

Моделювання процесів Кокса, керованих випадковою інтенсивністю з наперед заданою точністю та надійністю, коли інтенсивність є стаціонарним логарифмічно гауссовим процесом, вивчалось в роботі [2]. Взагалі, існує досить багато методів моделювання випадкових процесів, але в більшості із них не оцінюється точність та надійність. Один з таких методів моделювання процесів Кокса, коли інтенсивність є стаціонарним логарифмічно гауссовим полем, пропонується в статтях [3, 4]. В даній роботі застосовується такий самий, як в [2], метод моделювання з певною точністю та надійністю для випадку, коли інтенсивність є гауссовим, але не обов'язково стаціонарним полем.

Нехай $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$ – стандартний ймовірнісний простір, B – σ -алгебра борелівських множин T , $T \in \mathbb{R}^n$, $\{Y(t), t \in T\}$ – центроване, гауссове, неперервне в середньому квадратичному випадкове поле, $EY(t) = 0$, $B(t, s) = EY(t)Y(s)$.

Означення 1. Якщо умовний розподіл $\{\nu(B), B \in \mathcal{B}\}$ при будь-якій реалізації поля $\{Y(t), t \in T\}$ є пуассонівським процесом з функцією інтенсивності $\mu(B) = \int_B \exp\{Y(t)\} dt$, то $\nu(B)$ називається логарифмічно гауссовим процесом Кокса, або процесом Кокса керованим логарифмічно гауссовим полем $\{Y(t), t \in T\}$.

Оскільки $\{\nu(B), B \in \mathcal{B}\}$ це подвійно стохастичний випадковий процес, то його модель будується в два етапи. Спочатку моделюємо гауссове

Oleksandr O. Pogoriliak, PhD student

Simulation double stochastic random Poisson processes with some accuracy and reliability

In this article we deal with double stochastic Poisson processes which are also called Cox processes directed by random intensity. We study the case when the intensity is the log Gaussian random field. We construct models for such processes with accuracy and reliability which are given beforehand.

Key Words: log Gaussian Cox processes, simulation, accuracy, reliability.

поле $\{Y(t), t \in T\}$, далі розглядаємо деяке розбиття D_T області T і на кожному елементі розбиття D_T будуємо модель пуассонівської випадкової величини з відповідним середнім.

Нехай $T = [0, T] \times \dots \times [0, T]$, $T \in \mathbb{R}_+$, виберемо розбиття D_T наступним чином:

$$B_{i_1, \dots, i_n} = \left\{ [t_1^{i_1}, t_1^{i_1+1}] \times \dots \times [t_n^{i_n}, t_n^{i_n+1}] \mid t_m^{i_m} < t_m^{i_m+1}, \right. \\ \left. t_m^{i_m+1} - t_m^{i_m} = d = T/k, k \in \mathbb{N}, m = \overline{1, n}, t_m = \overline{0, k-1} \right\}.$$

Позначимо $\tilde{Y}(t)$ – модель поля $Y(t)$, $\tilde{\mu}(B_{i_1, \dots, i_n}) = \int_{B_{i_1, \dots, i_n}} \exp\{\tilde{Y}(t)\} dt$, $\tilde{\nu}(B_{i_1, \dots, i_n})$ – модель $\nu(B_{i_1, \dots, i_n})$.

Зрозуміло, що $\tilde{\nu}(B_{i_1, \dots, i_n})$ це число точок моделі, що належать області $B_{i_1, \dots, i_n}$. Оскільки ми не знаємо як ці точки розміщені насправді, то розміщуємо їх в $B_{i_1, \dots, i_n}$ довільно. Якщо ж $\tilde{\nu}(B_{i_1, \dots, i_n}) = 1$, то точку розміщуємо в центрі області.

Для того, щоб модель якомога мало відрізнялася від справжнього процесу, умовні ймовірності $p_{kY}(B_{i_1, \dots, i_n}) = P\{\nu(B_{i_1, \dots, i_n}) = k \mid Y(t), t \in T\}$ та $\tilde{p}_{kY}(B_{i_1, \dots, i_n}) = P\{\tilde{\nu}(B_{i_1, \dots, i_n}) = k \mid \tilde{Y}(t), t \in T\}$ повинні бути якомога близькі, а також ймовірність того, що число точок $\nu(B_{i_1, \dots, i_n})$ (відповідно $\tilde{\nu}(B_{i_1, \dots, i_n})$) буде більше одиниці також повинна

бути мала. Отже, задача моделювання логарифмічно гауссового процесу Кокса розбивається на дві задачі, а саме побудову моделі поля $Y(t)$ та вибору розбиття області T .

Побудова моделі поля $Y(t)$

Зауважимо, що оскільки поле $Y(t)$ неперервне в середньому квадратичному, то його коваріаційна функція $B(t, s)$ неперервна на $T \times T$. Розглянемо однорідне інтегральне рівняння Фредгольма другого роду

$$\phi(t) = \lambda \int_T B(t, s) \phi(s) ds. \quad (1)$$

Як відомо, множина власних значень $\phi_k(t)$ такого рівняння для неперервного та додатно визначеного ядра не більш як зліченна, власні функції $\phi_k(t)$ неперервні, а самі власні значення λ_k невід'ємні (див. [1]). Занумеруємо λ_k , $k = 1, 2, \dots$ в порядку зростання: $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots$. Відповідні їм власні функції будемо вважати ортонормованими, тобто

$$\int_T \phi_k(s) \phi_l(s) ds = \begin{cases} 1, & k = l, \\ 0, & k \neq l. \end{cases}$$

Має місце зображення

$$B(t, s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\phi_k(t) \phi_k(s)}{\lambda_k},$$

причому ряд в правій частині збігається рівномірно по $s \in T$, а також ряд $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-1}$ є збіжним (див.

$$\mathbf{P}\{\nu(B_{t_1, \dots, t_n}) > 1\} = \mathbf{E}\{1 - \exp\{-\mu(B_{t_1, \dots, t_n})\} - \mu(B_{t_1, \dots, t_n}) \exp\{-\mu(B_{t_1, \dots, t_n})\}\}$$

та при $x > 0$ $1 - \exp\{-x\}(1+x) \leq \frac{x^2}{2}$, то для виконання (3) досить, щоб виконувалась нерівність

$$\mathbf{E}[\mu(B_{t_1, \dots, t_n})]^2 < 2\delta.$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\mu(B_{t_1, \dots, t_n})]^2 &= \mathbf{E} \int_{B_{t_1, \dots, t_n}} \exp\{Y(t)\} dt \int_{B_{t_1, \dots, t_n}} \exp\{Y(s)\} ds = \\ &= \iint_{B_{t_1, \dots, t_n} \times B_{t_1, \dots, t_n}} \mathbf{E} \exp\{Y(t) + Y(s)\} dt ds = \iint_{B_{t_1, \dots, t_n} \times B_{t_1, \dots, t_n}} \exp\left\{\frac{\mathbf{E}(Y(t) + Y(s))^2}{2}\right\} dt ds = \end{aligned}$$

[4]). Тоді саме поле $Y(t)$ допускає зображення

$$Y(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\xi_k}{\sqrt{\lambda_k}} \phi_k(t), \quad (2)$$

де $\xi_k = N(0, 1)$, $\mathbf{E} \xi_k \xi_l = \delta_{kl}$, δ_{kl} – символ Кронекера, причому ряд збігається в середньому квадратичному (це випливає з теореми Карунена).

За модель такого поля прийматимемо суму

$$\tilde{Y}(t) = \sum_{k=1}^N \frac{\xi_k}{\sqrt{\lambda_k}} \phi_k(t).$$

Задача вибору розбиття області T

Розбиття області T (тобто d або k) вибираємо так, щоб виконувалась нерівність

$$\mathbf{P}\{\nu(B_{t_1, \dots, t_n}) > 1\} < \delta, \quad (3)$$

де δ певне наперед задане число (наприклад, $\delta = 0.01$).

Теорема 1. Нехай $B(t, s) \leq K$, $\forall s, t \in T$. Для того, щоб виконувалась нерівність (3), досить вибрати $d = T/k$ так, щоб виконувалась нерівність

$$d \leq [2\delta \exp\{-2K\}]^{1/n}.$$

Доведення. Оскільки

Так як для $\xi = N(0, \sigma^2)$ має місце співвідношення $\mathbf{E} \exp\{\lambda \xi\} = \exp\left\{\frac{\lambda^2 \sigma^2}{2}\right\}$, то

$$= \iint_{B_{i_1, \dots, i_n} \times B_{j_1, \dots, j_n}} \exp \left\{ \frac{\mathbf{E}(Y(t))^2}{2} + \mathbf{E}Y(t)Y(s) + \frac{\mathbf{E}(Y(s))^2}{2} \right\} dt ds \leq d^{2n} \exp \{2K\}.$$

виконується нерівність

Остання нерівність й доводить теорему.

$$\mathbf{P} \left\{ \max_{B_{i_1, \dots, i_n} \subset \mathbf{B}} |p_{kY}(B_{i_1, \dots, i_n}) - \tilde{p}_{kY}(B_{i_1, \dots, i_n})| > \alpha \right\} < \gamma.$$

Наближення процесу Кокса з певною точністю та надійністю

Означення 2. Скажемо, що модель логарифмічно гауссового процесу Кокса $\{v(B_{i_1, \dots, i_n}) | B_{i_1, \dots, i_n} \subset \mathbf{B}\}$ наближає його з точністю α , $0 < \alpha < 1$ та надійністю $1 - \gamma$, $0 < \gamma < 1$, якщо

Лема 1. Нехай $Y(t)$ – гауссове, центроване, неперервне в середньому квадратичному випадкове поле, $B(t, s) \leq K$, $|\phi_k(t)| \leq L \quad \forall t, s \in \mathbf{T}$, $k \in \mathbf{N}$, тоді $\forall p > 1$ має місце оцінка

$$\mathbf{P} \left\{ \max_{B_{i_1, \dots, i_n} \subset \mathbf{B}} |\mu(B_{i_1, \dots, i_n}) - \tilde{\mu}(B_{i_1, \dots, i_n})| > \alpha \right\} \leq 2 \alpha^{-p} k^n J_N^p p^{p/2} \exp \left\{ -\frac{p + p^2 v_2 K}{2} \right\},$$

де

а v_1, v_2 такі дійсні числа, що $v_1^{-1} + v_2^{-1} = 1$.

$$J_N = L d^n v_1^{1/2} \left(\sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{1/2}, \quad (4)$$

Доведення.

Не важко переконатись в справедливості наступного співвідношення:

$$\mathbf{P} \left\{ \max_{B_{i_1, \dots, i_n} \subset \mathbf{B}} |\mu(B_{i_1, \dots, i_n}) - \tilde{\mu}(B_{i_1, \dots, i_n})| > \alpha \right\} \leq k^n \alpha^{-p} \left(\int_{B_{i_1, \dots, i_n}} \left(\mathbf{E} |e^{Y(t)} - e^{\tilde{Y}(t)}|^p \right)^{1/p} dt \right)^p. \quad (5)$$

Використовуючи спочатку нерівність $e^x - e^y \leq |x - y| \exp\{\max(x, y)\}$, а потім нерівність Гель-

дера, матимемо

$$\mathbf{E} |\exp\{Y(t)\} - \exp\{\tilde{Y}(t)\}|^p \leq \left(\mathbf{E} |Y(t) - \tilde{Y}(t)|^{p v_1} \right)^{1/v_1} \left(\mathbf{E} \exp\{p v_2 \max(Y(t), \tilde{Y}(t))\} \right)^{1/v_2}. \quad (6)$$

Для моментів нормально розподіленої випадкової величини ξ з параметрами $0, \sigma^2$ має місце рівність

Використовуючи щойно наведений факт,

$$\mathbf{E} |\xi|^p = c_p (\sigma^2)^{p/2},$$

$$\mathbf{E} |Y(t) - \tilde{Y}(t)|^{p v_1} = c_{p v_1} \left(\mathbf{E} |Y(t) - \tilde{Y}(t)|^2 \right)^{p v_1 / 2}$$

причому

Врахувавши, що в представленні (2) поля $Y(t)$ $\mathbf{E} \xi_k \xi_l = \delta_{kl}$, де δ_{kl} – символ Кронекера, матимемо:

$$c_p \leq \sqrt{2} p^{p/2} e^{-p/2}.$$

$$\mathbf{E} |Y(t) - \tilde{Y}(t)|^2 = \mathbf{E} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\xi_k}{\sqrt{\lambda_k}} \phi_k(t) - \sum_{k=1}^N \frac{\xi_k}{\sqrt{\lambda_k}} \phi_k(t) \right|^2 = \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{\phi_k^2(t)}{\lambda_k} \leq L^2 \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k}.$$

Отже,

$$\mathbf{E} |Y(t) - \tilde{Y}(t)|^{p v_1} \leq c_{p v_1} L^{p v_1} \left(\sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{p v_1 / 2}. \quad (7)$$

$$\mathbb{E} \exp\{pv_2 \max(Y(t), \tilde{Y}(t))\} \leq \mathbb{E} \exp\{pv_2 Y(t)\} + \mathbb{E} \exp\{pv_2 \tilde{Y}(t)\} \leq 2 \exp\left\{\frac{(pv_2)^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\phi_k^2(t)}{\lambda_k}\right\} \leq 2 \exp\left\{\frac{(pv_2)^2 K}{2}\right\}. \quad (8)$$

Беручи до уваги (7), (8), із (6) матимемо:

$$\mathbb{E} \left| \exp\{Y(t)\} - \exp\{\tilde{Y}(t)\} \right|^p \leq c_{p, v_1}^{1/p} L^p \left(\sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k} \right)^{p/2} 2^{1/2} \exp\left\{\frac{p^2 v_2 K}{2}\right\}. \quad (9)$$

Скориставшись оцінкою для c_p та (9), твердження леми випливає із (5).

Лема 2. Нехай $Y(t)$ – гауссове, центроване, неперервне в середньому квадратичному випад-

кове поле, $B(t, s) \leq K$, $|\phi_k(t)| \leq L \quad \forall t, s \in T, k \in \mathbb{N}$.
Якщо $J_N < \alpha \exp\{1/2 - v_2 K\}$, тоді

$$\mathbb{P} \left\{ \max_{B_{t_1, \dots, t_n} \in \mathbb{B}} |p_{kY}(B_{t_1, \dots, t_n}) - \tilde{p}_{kY}(B_{t_1, \dots, t_n})| > \alpha \right\} \leq 2k^n \left(\frac{1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha}}{2v_2 K} \right)^{\frac{1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha}}{4v_2 K}} \exp\left\{-\frac{(1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha})^2}{8v_2 K}\right\},$$

де J_N визначається із (4), а v_1, v_2 такі дійсні числа, що $v_1^{-1} + v_2^{-1} = 1$.

Доведення. Має місце наступна нерівність:

$$\mathbb{P} \left\{ \max_{B_{t_1, \dots, t_n} \in \mathbb{B}} |p_{kY}(B_{t_1, \dots, t_n}) - \tilde{p}_{kY}(B_{t_1, \dots, t_n})| > \alpha \right\} \leq \mathbb{P} \left\{ \max_{B_{t_1, \dots, t_n} \in \mathbb{B}} |\mu(B_{t_1, \dots, t_n}) - \tilde{\mu}(B_{t_1, \dots, t_n})| > \alpha \right\}.$$

Знайшовши значення функції реми є наслідком леми 2 та означення 2.

$$2\alpha^{-p} k^n J_N^p p^{p/2} \exp\left\{\frac{-p^2 v_2 K}{2}\right\} \text{ в точці } p_0 = \frac{1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha}}{2v_2 K}$$

близькій до її точки мінімуму, легко бачити, що дана лема є наслідком останньої нерівності та леми 1.

Теорема 2. Нехай $Y(t)$ – гауссове, центроване, неперервне в середньому квадратичному випадкове поле,

$$B(t, s) \leq K, \quad |\phi_k(t)| \leq L \quad \forall t, s \in T, k \in \mathbb{N},$$

тоді модель логарифмічно гауссового процесу Кокса $\{Y(B_{t_1, \dots, t_n}) | B_{t_1, \dots, t_n} \in \mathbb{B}\}$ наближає його з точністю α та надійністю $1 - \gamma$, якщо виконуються умови:

$$J_N < \alpha \exp\{1/2 - v_2 K\},$$

$$2k^n \left(\frac{1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha}}{2v_2 K} \right)^{\frac{1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha}}{4v_2 K}} \exp\left\{-\frac{(1 - 2 \ln \frac{J_N}{\alpha})^2}{8v_2 K}\right\} < \gamma,$$

де J_N визначається з (4), а v_1, v_2 такі дійсні числа, що $v_1^{-1} + v_2^{-1} = 1$.

Доведення. Легко бачити, що твердження те-

Висновки.

В роботі побудовані моделі випадкових процесів Кокса, інтенсивність яких є логарифмічно гауссовим полем. Наведені достатні умови наближення логгауссових процесів Кокса побудованими моделями з певною точністю та надійністю.

Список використаних джерел

1. Владимиров В. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1967. – 436 с.
2. Козаченко Ю.В., Погоріляк О.О. Моделирование логарифмично гауссовых процессов Кокса с заданой надійністю та точністю // ТВіМС. – 2007. – № 76.
3. Brix A., Moller J. Space-time Multi Type Log Gaussian Cox Processes with a view to Modelling Weeds // Scandinavian Journal of Statistics. – 2001. – № 28. – P. 471-488.
4. Moller J., Syversveen A.R., Waagepetersen R.P. Log gaussian Cox Processes // Scandinavian Journal of Statistics. – 1998. – № 25. – P. 451-482.

Надійшла до редакції 26.05.2006

УДК 519.21

Антоніна М. Тегза, к.ф.-м.н, доцент

**Побудова моделі гауссового однорідного
ізотропного випадкового поля з
заданими точністю і надійністю в L_p ,
 $1 \leq p \leq 2$**

З заданою точністю і надійністю побудована модель гауссового ізотропного поля, використовуючи теорію $\text{Sub}_\varphi(\Omega)$.

Ключові слова: субгауссові випадкові величини, моделювання випадкових полів, субгауссові випадкові поля.

Вступ

Всі необхідні відомості з теорії субгауссових випадкових величин містяться в книгах [1],[2]. Основні принципи побудови моделей гауссових випадкових процесів та полів можна знайти в книгах [4], [5]. В цій роботі теорія випадкових величин та процесів з просторів $\text{Sub}_\varphi(\Omega)$, $\varphi(x) = x^2/2$, застосовується при побудові моделі гауссового однорідного ізотропного випадкового поля.

Робота складається з двох розділів. В першому розділі будується модель гауссового однорідного ізотропного випадкового поля, яка не є гауссовим полем, але є близьким до нього. У другому – досліджується точність та надійність моделі у просторі L_p , $1 \leq p \leq 2$.

1 Побудова моделі гауссового однорідного випадкового поля

Означення 1.1[2] Випадкова величина ξ , $E\xi = 0$, називається субгауссовою, якщо існує число $a \in [0, \infty)$ таке, що для всіх $\lambda \in \mathbb{R}$ має місце нерівність $E \exp\{\lambda \xi\} \leq \exp\{a^2 \lambda^2 / 2\}$.

Нехай $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}^m\}$ – однорідне, ізотропне, неперервне в середньому квадратичному випадкове поле. Тоді кореляційна функція цього поля має вигляд:

$$R(\tau) = EX(t+\tau)X(t) = \int_{\mathbb{R}^m} \cos\langle \lambda, \tau \rangle F(d\lambda),$$

де $F(d\lambda)$ – спектральна міра випадкового поля, $\langle \dots \rangle$ – означає скалярний добуток в $\mathbb{R}^m$, $F(B) = \int_B f(u) du$, $f(u)$ – спектральна щільність випадкового поля. Тоді $X(t)$ має зображення

$$X(t) = \int_{\mathbb{R}^m} \cos\langle \lambda, t \rangle d\eta_1(\lambda) + \int_{\mathbb{R}^m} \sin\langle \lambda, t \rangle d\eta_2(\lambda),$$

$\eta_1(\lambda)$ – такі однорідні, ізотропні центровані га-

A.M. Tegza, Cand.Sci (Phys.-Math.), Associate Professor,

**Constructing of model of Gaussian
homogenous isotropic random field with
given accuracy and reliability in L_p ,
 $1 \leq p \leq 2$**

We constructed model of Gaussian isotropic field on basis of $\text{Sub}_\varphi(\Omega)$ theory.

Key Words: subgaussian random values, simulation of random processes, subgaussian fields.

уссові поля, що $E(\eta_1(\lambda_2) - \eta_1(\lambda_1))^2 = F(\lambda_2) \cap F(\lambda_1)$, $\lambda_1 < \lambda_2$, $i=1,2$, P – півпростір простору $\mathbb{R}^m$, тобто P – вимірна множина така, що $P \cap (-P) = \{0\}$, $P \cup (-P) = \mathbb{R}^m$.

Проводимо деяке розбиття Λ спектрального простору $P = \sum_{i=1}^M Q_i$, $Q_i \cap Q_j = \emptyset$, $i \neq j$. Тоді за модель візьмемо

$$X_\Lambda(t) = \sum_{k=1}^M (\eta_{k1} \cos\langle \zeta_k, t \rangle + \eta_{k2} \sin\langle \zeta_k, t \rangle),$$

де η_{k1}, η_{k2} – незалежні гауссові випадкові величини такі, що $E\eta_{k1} = E\eta_{k2} = 0$,

$E\eta_{k1}^2 = E\eta_{k2}^2 = F(m(Q_k)) = b_k^2$, а вектори $\zeta_k \in P$ розподілені на області Q_k з $P\{\zeta_k < \lambda\} = F_k(\lambda) = \int_{Q_k \cap \lambda} F(m(Q_k))^{-1} dF(\lambda)$. Не-

важно перевірити, що випадкове поле $X_M(t)$ є гауссовим центрованим однорідним з кореляційною функцією $R(\tau) = \int_P \cos\langle \lambda, \tau \rangle dF(\lambda)$.

Розглянемо модель $X_M(t)$ і покладемо, що $\eta_{k1} = \int_{Q_k} d\eta_1(\lambda)$, $\eta_{k2} = \int_{Q_k} d\eta_2(\lambda)$. Нехай $\eta_\Lambda(t) = X(t) - X_M(t)$. Тоді

$$\eta_\Lambda(t) = \sum_{k=1}^M \left[\int_{Q_k} (\cos\langle \lambda, t \rangle - \cos\langle \zeta_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) + \int_{Q_k} (\sin\langle \lambda, t \rangle - \sin\langle \zeta_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right].$$

Лема 1.1. Для незалежних випадкових величин $\eta_1(\lambda)$, $\eta_2(\lambda)$ справедливі нерівності:

$$E \left(\int_{Q_k} (\cos\langle \lambda, t \rangle - \cos\langle \zeta_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right)^{2m+1} = 0,$$

$$E \left(\int_{Q_k} (\sin\langle \lambda, t \rangle - \sin\langle \zeta_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right)^{2m+1} = 0,$$

$$E \left(\int_{Q_k} (\cos\langle \lambda, t \rangle - \cos\langle \zeta_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right)^{2m} \leq z_{km},$$

$$E \left(\int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right)^{2m} \leq z_{km},$$

де $z_{km} = 4^m \Delta_{2m} E \left(\int_{Q_k} (\sin(\langle t, (\lambda - \xi_k) \rangle / 2))^2 dF(\lambda) \right)^m$,
 $\Delta_{2m} = (2m)!(2^m m!)^{-1}$.

Доведення. Так як $E\xi = 0$, $E\xi^2 = \sigma^2$,
 $E\xi^{2k} = \Delta_{2k} \sigma^{2k}$, $k \in \mathbb{N}$, $\Delta_{2k} = (2k)!(2^k k!)^{-1}$, то

$$\begin{aligned} E \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right)^{2m} &= \\ &= EE\xi_k \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right)^{2m} \leq \\ &\leq \Delta_{2m} E \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle)^2 dF(\lambda) \right)^m \leq \\ &\leq \Delta_{2m} E \left(\int_{Q_k} \left| 2 \sin \left(2^{-1} (\langle \lambda, t \rangle - \langle \xi_k, t \rangle) \right) \right| \times \right. \\ &\quad \left. \times \sin \left(2^{-1} (\langle \lambda, t \rangle + \langle \xi_k, t \rangle) \right) \right|^2 dF(\lambda) \right)^m \leq \\ &\leq \Delta_{2m} 4^m E \left(\int_{Q_k} \left| \sin \langle \lambda - \xi_k, t \rangle / 2 \right|^2 dF(\lambda) \right)^m = z_{km}. \end{aligned}$$

Аналогічно друга нерівність

$$\begin{aligned} E \left(\int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right)^{2m} &\leq \Delta_{2m} \times \\ E \left(\int_{Q_k} \left| 2 \sin \frac{\langle \lambda - \xi_k, t \rangle}{2} \cdot \cos \frac{\langle \lambda + \xi_k, t \rangle}{2} \right|^2 dF(\lambda) \right)^m &\leq z_{km}. \end{aligned}$$

Теорема 1.1. Випадкове поле $\eta_\lambda(t)$ є субгауссовим.

Доведення. Покажемо, що
 $\chi_{k1} = \int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda)$ та
 $\chi_{k2} = \int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda)$ – субгауссові величини. З попередньої леми випливає, що

$$\begin{aligned} \left(E \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right)^{2m} \right)^{1/(2m)} &\leq \\ 2^m \sqrt{\Delta_{2m} 4^m} \left(\int_{Q_k} \left(\int_{Q_k} \left| \sin \langle \lambda - u, t \rangle / 2 \right|^2 dF(\lambda) \right)^m dF_k(u) \right)^{1/(2m)} & \\ \leq 2^m \sqrt{\Delta_{2m} 4^m} \left(\int_{Q_k} (F(\mu(Q_k)))^m \frac{dF(\lambda)}{F(\mu(Q_k))} \right)^{1/(2m)} & \\ \leq 2^m \sqrt{\Delta_{2m} 4^m} \sqrt{F(\mu(Q_k))} \text{ та аналогічно} & \\ \left(E \left(\int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right)^{2m} \right)^{1/(2m)} &\leq \\ \leq 2^m \sqrt{\Delta_{2m} 4^m} \sqrt{F(\mu(Q_k))}. & \end{aligned}$$

$$\text{Тоді (див. [1]) } \Theta_1(\chi_{rs}) = \sup_{m \geq 1} \left[\Delta_{2m}^{-1} E \chi_{rs}^{2m} \right]^{1/(2m)} =$$

$$\begin{aligned} &= \sup_{m \geq 1} \left[\frac{2^m m!}{(2m)!} 4^m \frac{(2m)!}{2^m m!} (F(\mu(Q_k)))^m \right]^{1/(2m)} = \\ &= 2 \sqrt{F(\mu(Q_k))} < \infty. \end{aligned}$$

Тобто χ_{k1}, χ_{k2} – є субгауссовими центрованими випадковими величинами і для кожного $t \in \mathbb{R}^m$ величина $\eta_\lambda(t)$ є субгауссовою випадковою величиною. Отже, поле $\eta_\lambda(t)$ є субгауссовим. $\square$

Теорема 1.2. Для субгауссового поля $\eta_\lambda(t)$ має місце така нерівність $\tau(\eta_\lambda(t)) \leq$

$$4 \left(\sum_{k=0}^M b_k^2 \sup_{m \geq 1} \left(E \left| \sin \langle \xi_k - \xi_k^*, t \rangle / 2 \right|^{2m} \right)^{1/m} \right)^{1/2} = B_\lambda^{\frac{1}{2}}(t),$$

де $b_k^2 = F(\mu(Q_k))$, ξ_k^* – випадкові вектори, що не залежать від ξ_k і розподіли яких такі ж, що і ξ_k .

Доведення. З леми 1.1. випливає, що

$$\begin{aligned} \tau^2 \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right) &\leq \\ \leq \Theta_1^2 \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right) &\leq \\ \leq \sup_{m \geq 1} b_k^2 \left(E \left(\int_{Q_k} \left| 2 \sin \langle \lambda - \xi_k, t \rangle / 2 \right|^2 dF_k(\lambda) \right)^m \right)^{1/m} &= \\ = \sup_{m \geq 1} 4b_k^2 \left(\int_{Q_k} \left(\int_{Q_k} \left| \sin \langle u - \lambda, t \rangle / 2 \right|^2 dF_k(\lambda) \right)^m dF_k(u) \right)^{1/m} & \\ = I_k. \text{ Аналогічно} & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau^2 \left(\int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right) &\leq \\ \leq \Theta_1^2 \left(\int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right) &\leq \\ \sup_{m \geq 1} 4b_k^2 \left(\int_{Q_k} \left(\int_{Q_k} \left| \sin \langle u - \lambda, t \rangle / 2 \right|^2 dF_k(\lambda) \right)^m dF_k(u) \right)^{1/m} & \\ = I_k. \text{ Тоді} & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau^2 \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) + \right. & \\ \left. + \int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right) &\leq \\ \leq \left(\tau \left(\int_{Q_k} (\cos \langle \lambda, t \rangle - \cos \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_1(\lambda) \right) + \right. & \\ \left. + \tau \left(\int_{Q_k} (\sin \langle \lambda, t \rangle - \sin \langle \xi_k, t \rangle) d\eta_2(\lambda) \right) \right)^2 &\leq 4I_k. \end{aligned}$$

Оскільки доданки сум в (1) для різних k незалежні, то з останньої нерівності і леми 1.2 випливає, що $\tau^2(\eta_\lambda(t)) \leq 4 \sum_{k=0}^M I_k$,

$$\tau^2(\eta_\lambda(t)) \leq 4 \left[\sum_{k=0}^M \sup_{m \geq 1} b_k^{-2/m} \times \right.$$

$$\times \left(\int_Q \left(\int_Q |\sin(\langle u - \lambda, t \rangle / 2)|^2 dF(\lambda) \right)^m dF(u) \right)^{1/2} \leq \\ \leq 4 \left[\sum_{k=0}^M \sup_{m \geq 1} b_k^2 \left(E \left| \sin(\langle \xi_k - \xi_k^*, t \rangle / 2) \right|^{2m} \right)^{1/m} \right]^{1/2}.$$

Теорему доведено. $\square$

2 Точність та надійність моделі гауссового однорідного ізотропного поля в L_p , при $1 \leq p \leq 2$.

Означення 2.1. Випадкове поле $X_\Lambda(t)$ наближає поле $X(t)$ з надійністю $1 - \beta$ та точністю $\delta > 0$ в $L_p(Q)$, якщо розбиття Λ таке, що має місце наступна нерівність:

$$P \left\{ \left(\int_Q |\eta_\Lambda(t)|^p d\mu(t) \right)^{1/p} > \delta \right\} \leq \beta, \quad t \in R^m, \quad Q \in R^m.$$

Теорема 2.1. Модель $X_\Lambda(t)$ наближає гауссове випадкове поле $X(t)$ з надійністю $1 - \beta$, $0 < \beta < 1$ та точністю $\delta > 0$ в $L_1(Q)$, якщо Λ таке, що

$$\int_Q \left[\sum_{k=0}^M b_k^2 \sup_{m \geq 1} \left(E \left| \sin(\langle \xi_k - \xi_k^*, t \rangle / 2) \right|^{2m} \right)^{1/m} \right]^{1/2} d\mu(t) \leq \left(\delta^2 (-2 \ln(\beta/2))^{-1} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Доведення. З теореми 1.2. (та див. [3]) випливає, що для всіх $U \geq 0$

$$E \exp \left\{ U \int_Q |\eta_\Lambda(t)| d\mu(t) \right\} \leq \\ \leq 2 \exp \left\{ 2^{-1} U^2 \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{1/2} d\mu(t) \right)^2 \right\}.$$

Оскільки для $x > 0$ $P\{\theta > x\} \leq 2 \exp\{-x^2/(2b^2)\}$,

то далі матимемо $P\left\{ \int_Q |\eta_\Lambda(t)| d\mu(t) > \delta \right\} \leq 2 \exp\left\{ \delta^2 2^{-1} \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{1/2} d\mu(t) \right)^2 \right\}$. Тоді згідно

означення 2.1 має виконуватись нерівність

$$2 \exp \left\{ 2^{-1} \delta^2 \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{1/2} d\mu(t) \right)^2 \right\} \leq \beta.$$

Визначивши з цієї нерівності $\int_Q (B_\Lambda(t))^{1/2} d\mu(t)$, отримаємо умову (2). $\square$

Теорема 2.2. Модель $X_\Lambda(t)$ наближається до гауссового випадкового поля $X(t)$ з надійністю $1 - \beta$, $0 < \beta < 1$ та точністю $\delta > 0$ в $L_p(Q)$, $1 < p \leq 2$, якщо розбиття Λ таке, що

$$\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \leq \delta^p \quad \text{та} \\ \int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \leq Z(p, \delta). \quad (3)$$

де $Z(p, \delta)$ – корінь рівняння

$$\left(2\delta^p Z^{-1} p^{-1} + 1 - 2p^{-1} \right)^{1/2} \exp \left\{ p^{-1} - \delta^p p^{-1} Z^{-1} \right\} = \beta. \quad (4)$$

Доведення. З теореми 1.2. (та див. [3]) випливає, що для всіх $0 \leq s < 1$

$$E \exp \left\{ s p^{-1} \int_Q |\eta_\Lambda(t)|^p d\mu(t) \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \right)^{-1} \right\} \leq \\ \leq (1-s)^{-0.5} \exp \left\{ (2p)^{-1} (2-p)s \right\}. \quad (5)$$

З нерівності $P\{\eta > x\} \leq \sqrt{2x/\alpha + 1 - 2/\alpha} \times \exp\{(1-x)/\alpha\}$ (див. [3]) та (5) випливає, що для $\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \leq \delta^p$ маємо

$$P \left\{ \left(\int_Q (\eta_\Lambda(t))^p d\mu(t) \right)^{1/p} > \delta \right\} = \\ = P \left\{ \int_Q |\eta_\Lambda(t)|^p d\mu(t) \cdot \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \right)^{-1} > \right. \\ \left. > \delta^p \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \right)^{-1} \right\} \times \\ \times \left(2\delta^p / p \cdot \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \right)^{-1} + 1 - 2p^{-1} \right)^{1/p} \times \\ \times \exp \left\{ p^{-1} - \delta^p p^{-1} \left(\int_Q (B_\Lambda(t))^{p/2} d\mu(t) \right)^{-1} \right\}.$$

Ліва частина (4) зростає при $Z < \delta^p$ відносно Z , тому при виконанні умови (3) виконуватиметься $P\left\{ \left(\int_Q (\eta_\Lambda(t))^p d\mu(t) \right)^{1/p} > \delta \right\} \leq \beta$. $\square$

Список використаних джерел

1. Buldygin V.V., Kozachenko Y.V. Metric characterization of random variables and random processes – AMS, Providence RI – 2000.
2. Козаченко Ю.В., Пащенко А.О. Моделирование случайных процессов. – “Київський університет” – Київ – 1999.
3. Дж. Антоніні Р., Козаченко Ю.В., Тегза А.М. Нерівності для норм субгауссових векторів та точність моделювання випадкових процесів // Теор. ймовірност. та мат. статист. – Вип. 66. – 2002. – с. 58-66.
4. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования – М.: “Наука”, 1982.
5. Пригарин С.М. Некоторые задачи теории численного моделирования случайных процессов и полей – РАН. Сиб. отд. – Новосибирск, 1994.

Надійшла до редколегії 10.05.2006

УДК 512.55

В'ячеслав В. Шви́ров, аспірант

Про число ідеалів кільця верхніх трикутних матриць.

В роботі встановлено зв'язок між кількістю ідеалів, що містяться у підкільці $T_n(D)$ кільця $M_n(D)$ всіх квадратних матриць на тілом D , та числами Каталана. Показано використання чисел Каталана у теорії напівланцюгових кілець.

Ключові слова: числа Каталана, кільце верхніх трикутних матриць, радикал Джекобсона кільця. Напівланцюгове кільце.

E-mail: slavik_asas@mail.ru

1 Числа Каталана

Основним результатом роботи є теорема, яка встановлює зв'язок між числом ідеалів кільця $T_n(D)$ та числами Каталана.

Теорема 1. Нехай $A = T_n(D)$, R_n – радикал Джекобсона кільця A . Число ідеалів, що містяться у R_n^k , $1 \leq k \leq n$ дорівнює C_{n-k+1} , тобто $(n-k+1)$ -му числу Каталана. Відповідність між кількістю ідеалів та числами Каталана можна зобразити наступним чином:

$$\begin{array}{ccccccc} T_n(D) & \supset & R_n & \supset & R_n^2 & \supset & \dots \supset R_n^n \\ \updownarrow & & \updownarrow & & \updownarrow & & \updownarrow \\ C_{n+1} & & C_n & & C_{n-1} & & \dots C_1 \end{array}$$

У 1760 році Ейлером були отримані деякі результати, що встановлювали зв'язок між кількістю способів розбиття многокутника на трикутники діагоналями що не перетинаються, кількістю розташування дужок, та деякими іншими комбінаторними задачами. Вони були опубліковані, але без детальних доведень.

У період 1838-1839 цими задачами займався ряд авторів серед яких був Євген Каталан (1814-1894), яким був написан ряд робіт з цієї тематики.

Термін „Числа Каталана” пов'язан з цитуванням Нетто, який приписував проблеми розташування дужок та розбиттів многокутника Каталану. Гарний історичний огляд цього питання, та численні приклади застосування чисел Каталана у

Vjacheslav V. Shvyrov, PhD student

On the number of ideals of upper triangular matrix ring.

Abstract In this article we describe the connections between the number of ideals, that are contained in subring $T_n(D)$ of the full matrix ring $M_n(D)$ of the order n on the skew field D and Catalan's numbers. We had show using Catalan's numbers in the theory of serial rings.

Key Words: Catalan's numbers, upper triangular ring, Jacobson radical of the ring. Serial ring.

комбінаториці можна знайти у [3].

Числа Каталана утворюють послідовність натуральних чисел, яка з'являється в різних комбінаторних обчислюваних задачах. n -те число

Каталана визначається як $C_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}$ для $n \geq 0$.

Перші числа Каталана для $n=0,1,2,\dots$ це

1, 1, 2, 5, 14, 42, 132, 429, 1430, 4862, 16796, 58786, 208012, 742900, 2674440, 9694845, 35357670, ...

Всі числа Каталана є цілими, оскільки можна перевірити, що $C_n = \binom{2n}{n} - \binom{2n}{n-1}$, для $n \geq 1$.

Наведемо деякі найбільш відомі застосування чисел Каталана. Однією з перших була наступна задача: скількома способами можна розрізати випуклий n -кутник на трикутники діагоналями, що не перетинаються всередині цього n -кутника. Відповідь є така: кількість різних способів, в які многокутник з $n+2$ вершинами можна розрізати на трикутники, з'єднуючи вершини відрізками є n -те число Каталана (див. Рис. 1).

Числа Каталана, або C_n є кількістю слів Діка довжини $2n$. Слово Діка – це послідовність, яка складається з n іксів та n ігреків, причому кожне його початкове підслово має більше ігреків ніж іксів. Наприклад, можемо виписати слова Діка довжиною 6: XXXYYY, XXYYXY, XXYXXY, XYXXXY, XXYYXY.

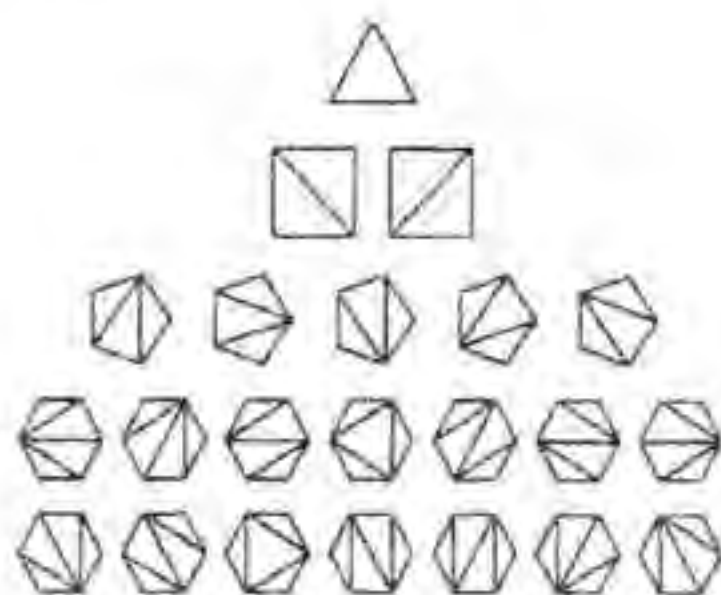


Рис. 1

Відповідно $C_3 = 5$. Уявляючи X як відкриваючу дужку, а Y як закриваючу, кожне слово Діка довжиною $2n$ можемо подавати як n пар коректно записаних дужок, виписаних в вигляді слова: $((()))$, $0(())$, $000()$, $(())0$, (00) .

Слова Діка можуть бути природно представлені як задані шляхи на решітці з $n+1$ на $n+1$ вершинами, з'єднаними вертикальними та горизонтальними відрізками. Шляхи починаються в лівому верхньому куті, закінчуються в правому нижньому куті, рухаються завжди вниз або праворуч і ніколи не перетинають діагональ, що йде з лівого верхнього кута до правого нижнього кута. X означає „рухатись праворуч”, а Y - „рухатись вниз”.

Можна порахувати слова Діка, наступним чином: розглянемо ті слова, які містять n іксів та n ігреків, але не є словами Діка. В такому слові знайдемо перше входження Y , яке порушує умову Діка, і замінемо всі букви Y , які йдуть за цією на X і навпаки. Отримаємо слово з $n+1$ ігреками та $n-1$ іксами, і насправді кожне слово з $n+1$ ігреками та $n-1$ іксами може бути отримане таким чином точно одним способом. Кількість таких слів

$\binom{2n}{n-1}$, що таким чином є те саме, що і кількість слів, що не є словами Діка. Тому кількість слів Діка має бути $\binom{2n}{n} - \binom{2n}{n-1}$, що є n -тим числом Каталана.

Розглянемо наступну – алгебраїчну задачу. Нехай є який-небудь арифметичний вираз, зітремо в ньому все, окрім дужок. Отримаємо деяку систему відкриваючих і закриваючих дужок. Які властивості вона має?

По-перше, відкриваючих дужок рівно стільки, скільки є закриваючих. По-друге, ні в якому відрізку кількість закриваючих дужок не може бути більшою ніж кількість відкриваючих дужок.

Підраховуючи кількість способів ми знову отримаємо послідовність чисел Каталана. Отже можна дати наступне визначення: числа Каталана є кількість способів коректного розташування n

відкриваючих і n , закриваючих дужок.

Числа Каталана також використовуються у теорії кілець. Нехай A базисне нерозкладне артінове кільце, тобто $A = P_1 \oplus \dots \oplus P_n$, де $P_1, \dots, P_n$ – нерозкладні попарно неізоморфні проективні модулі, $P_i = e_i A$, де $e_i e_j = \delta_{ij} e_i$ для $i, j = 1, \dots, n$, $c_i = l(P_i)$ довжина модуля P_i , $i = 1, \dots, n$, радикал Джекобсона у якого є R .

Кільце A називається напівланцюговим, якщо кожен нерозкладний проективний A -модуль (як лівий так і правий) має єдиний композиційний ряд. Якщо довжина нерозкладного проективного лівого A -модуля позначена $c_i = c(P_i)$, то послідовність $c_1, c_2, \dots, c_n$ називається допустимою для A . Допустима послідовність для напівланцюгового кільця задовільняє такі нерівності (див. [4], [5]):

$$\begin{aligned} 2 \leq c_i \leq c_{i-1} + 1 \text{ для } i=2, \dots, n-1, \\ c_1 \leq c_n + 1, c_n = 1 \end{aligned}$$

Теорема 2. Кількість допустимих послідовностей для нерозкладного базисного напівланцюгового кільця з простим проективним модулем і n попарно неізоморфними нерозкладними проективними модулями ($n \geq 1$) є $n-1$ -ше число Каталана.

2 Про число ідеалів кільця верхніх трикутних матриць.

Позначимо через $M_n(D)$ кільце всіх квадратних матриць порядку n над тілом D , $T_n(D)$ – підкільце всіх верхніх трикутних матриць над тілом D , тобто

$$T_n(D) = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ 0 & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}$$

Радикал Джекобсона R_n кільця $T_n(D)$ буде мати вид

$$R_n = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \dots & \dots & \alpha_{1n} \\ 0 & 0 & \alpha_{23} & \alpha_{24} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \dots & \ddots & \dots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \ddots & \alpha_{n-1n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Тоді, звідси, R_n^2 буде

$$R_n^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \alpha_{13} & \dots & \dots & \alpha_{1n} \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{24} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \dots & \ddots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \ddots & \alpha_{n-2n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Наведемо результати, що належать Ейзенбуду та Гріффіту (див. [2]).

Означення. Нехай $\Omega_n = \{(i, j) | 1 \leq i, j \leq n\}$. Підмножину $\Lambda \subset \Omega_n$ будемо називати сходниковою множиною (або s -множиною) рангу n , якщо

1) з того що $(i, j) \in \Lambda$ випливає, що $j \geq i+2$ (гобто, Λ не містить елементів, що знаходяться нижче або на головній діагоналі, тільки ті, що лежать вище головної діагоналі).

2) з того що $(i, j) \in \Lambda$ випливає $(k, l) \in \Lambda$, для кожного $k \leq i, l \geq j$.

Наступна лема описує гомоморфні образи кільця верхніх трикутних матриць $T_n(D)$.

Лема 1. Нехай $A = T_n(D)$. Існує однозначна відповідність між s -множинами рангу n та ідеалами I з A , такими, що A/I є нерозкладне. Ця відповідність задана наступним чином

$$\Lambda \longleftrightarrow \{(a_{ij}) \in A | a_{ij} = 0 \text{ для } (i, j) \notin \Lambda\} \quad (3)$$

Нехай Λ — деяка s -множина, елементи з Λ можна розуміти як елементи $n \times n$ матриці, де (i, j) міститься на перетині i -ї строки, та j -го стовпчика. Визначимо для s -множини Λ матрицю M_Λ як:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, (i, j) \in \Lambda, \\ 0, (i, j) \notin \Lambda. \end{cases}$$

Якщо $a_{ij} = 1$, тоді, за визначенням s -множини маємо, $a_{11} = 1, \dots, a_{i-1,j} = 1, a_{ij+1} = 1, \dots, a_{in} = 1$. Зобразимо квадрат, що складається з $n \times n$ клітинок. Заповнимо його елементами матриці: у (i, j) -клітинці запишемо елемент a_{ij} матриці M_Λ . За визначенням s -множини він буде містити ненульові елементи тільки вище головної діагоналі (див. Рис. 2).

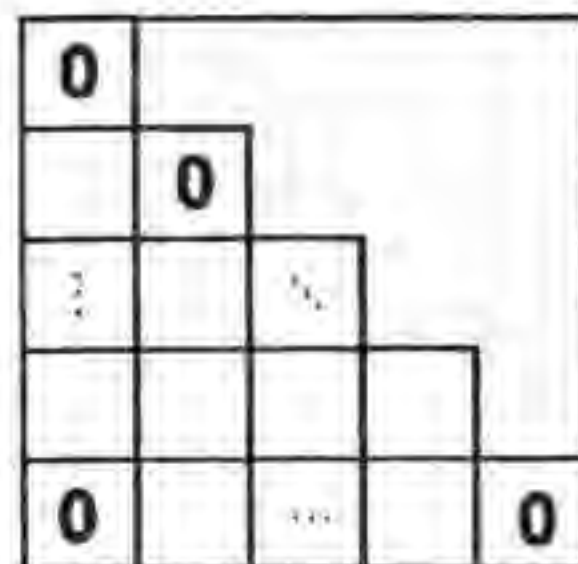


Рис. 2

У цьому квадраті накреслимо шлях з лівого верхнього кута до правого нижнього кута наступним чином: починаючи з лівого верхнього кута, робимо один крок праворуч, якщо у a_{ij} -й клітинці стоїть нуль, і робимо один крок вниз, якщо у a_{ij} -й клітинці стоїть одиниця. Якщо ми дійшли до клітинки a_{in} , або a_{nj} , тоді робимо $n-(i-1)$ кроків вниз (відповідно $n-(j-1)$ кроків праворуч). За побудовою для будь-якої матриці M_Λ (порядку n), довжина цього шляху дорівнює $2n$, і через те що, матриця не має ненулевих елементів нижче головної діагоналі цей шлях не перетинає головну діагональ квадрату зображеного на рисунку (див. Рис. 2).

Лема 2. Нехай $A = T_n(D)$. Існує однозначна відповідність між s -множинами рангу n , та шляхами у квадраті розміром $n \times n$ клітинок, які починаються у лівому верхньому куті, і закінчуються у правому нижньому куті та мають довжину $2n$ кроків і не перетинають головну діагональ квадрату.

Доведення. Випливає з визначення s -множини, та побудови для даної матриці шляху у квадраті.

Лема 3. Нехай даний квадрат, побудований з $n \times n$ клітинок. Число шляхів перейти від верхнього лівого кута до правого нижнього кута, довжиною $2n$, таких, що не перетинають головну діагональ квадрату, дорівнює n -му числу Каталана.

Доведення. Щоб довести твердження ми спочатку підрахуємо загальну кількість шляхів з лівого верхнього кута до правого нижнього кута, довжиною $2n$, у цьому квадраті і потім віднімемо кількість шляхів, що перетинають діагональ квадрату.

Рисунок 3 ілюструє хибні шляхи (для випадку $n=5$), такі шляхи можуть перетинати діагональ багато разів, але у кожному разі, існує точка у якій це трапляється перший раз. На рисунку цьому випадку відповідає точка P . Точка P буде завжди існувати для хибного шляху.

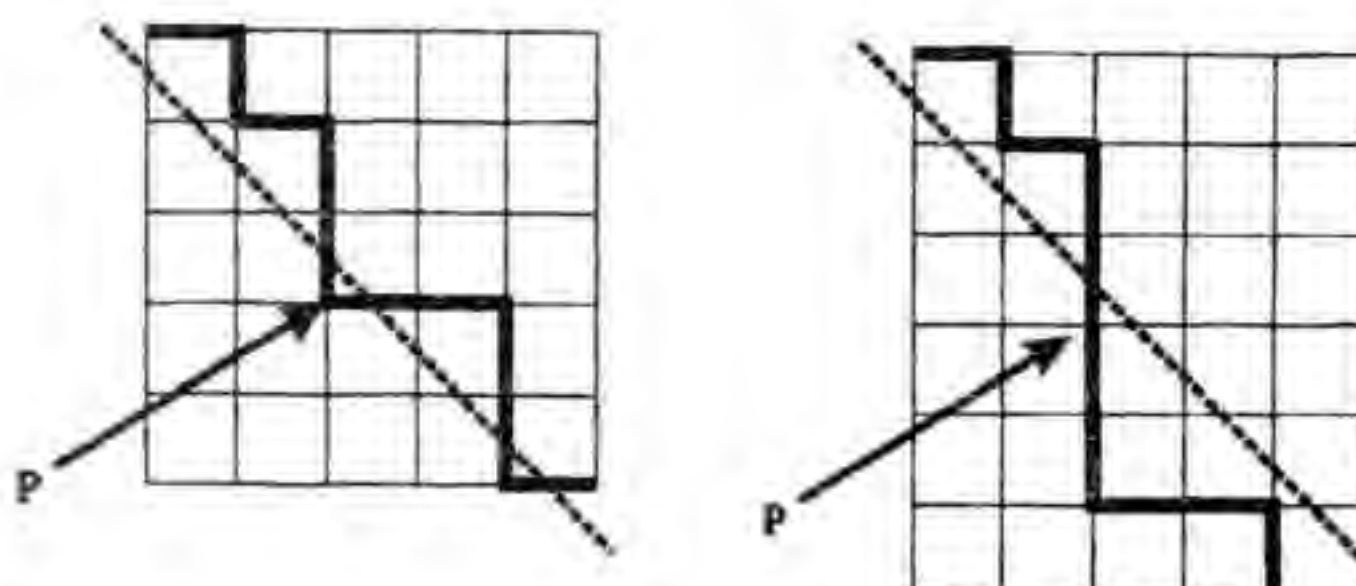


Рис. 3

Для кожного такого шляху будемо відображати шлях починаючи з точки P наступним чином: кожен раз, коли оригінальний шлях йде праворуч, ми йдемо вниз, і коли оригінальний шлях йде вниз, ми будемо йти праворуч. Зрозуміло, що до того моменту, коли шлях досягає точки P він має число кроків вниз на одиницю більше ніж число кроків праворуч. Нехай пройдено k кроків праворуч та $k+1$ кроків вниз. Загальний шлях має n кроків вниз і n праворуч. Отже залишається $n-k$ кроків праворуч і $n-k-1$ кроків кроків вниз. Але, через те що ми змінюємо кроки вниз на кроки праворуч і навпаки, модифікований шлях буде мати $(k)+(n-k-1)=n-1$ кроків праворуч і $(k+1)+(n-k)=n+1$ кроків вниз. Отже кінцівкою кожного модифікованого шляху є одна й та сама точка, $n-1$ кроків праворуч і $n+1$ кроків вниз.

Кожен хибний шлях може бути модифікований цим шляхом, і кожному шляху з початкової точки до точки $n-1$ кроків праворуч і $n+1$ кроків вниз, відповідає в точності один хибний шлях. Отже число хибних шляхів є загальне число шляхів у сітці $(n-1)$ на $(n+1)$.

Існує $\binom{m+k}{m}$ шляхів через сітку розміром $k \times m$. Отже загальне число шляхів через сітку $n \times n$ є $\binom{2n}{n}$ і загальне число хибних шляхів складає $\binom{2n}{n+1}$. Отже C_n , n -те число Каталана, або загальне число шляхів, що не перетинають діагоналі у сітці $n \times n$ буде:

$$C_n = \binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+1} = \binom{2n}{n} - \frac{n}{n+1} \binom{2n}{n} = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}$$

Лема 4. Нехай $A = T_n(D)$, R_n – радикал Джекобсона кільця A . Число ідеалів, що містяться у R_n дорівнює n -му числу Каталана.

Доведення. Зважаючи на відповідність (3) леми 1, та через те, що R_n має вид (1), існує відповідність між ідеалами, що містяться у R_n та s -множинами рангу n . За лемами 2 та 3 маємо, що кількість таких ідеалів дорівнює C_n .

Доведення теореми. Відповідність $R_n \longleftrightarrow C_n$ є встановлена за лемою 4. Нехай $M_{I_n} \in I_n \subset R_n^2$, де I_n – довільний ідеал, M_{I_n} – довільна матриця з цього ідеалу. Через те, що R_n^2 має вид (2), кожній матриці M_{I_n} (4) можна зіставити єдину матрицю $M_{I_{n-1}}$, де $M_{I_{n-1}} \in I_{n-1} \subset T_{n-1}(D)$

Отже кожному ідеалу $I_n \subset R_n^2 \subset T_n(D)$ відповідає ідеал $I_{n-1} \subset T_{n-1}(D)$, причому $I_{n-1} \subset R_{n-1}$, за лемою 4, число ідеалів, що містяться у R_{n-1} дорівнює C_{n-1} , отже кількість ідеалів у R_n^2 дорівнює C_{n-1} .

Користуючись вищедоведеним, покажемо, що кількість ідеалів у R_n^3 дорівнює C_{n-2} . Продовжуючи подібним чином, доведемо всі останні рівності. Нарешті, те, що кількість ідеалів у $T_n(D)$ дорівнює C_{n+1} , отримуємо зіставляючи кожному ідеалу $I_n \subset T_n(D)$, ідеал $I_{n+1} \subset T_{n+1}(D)$, відповідні ідеали I_{n+1} будуть міститися у радикалі R_{n+1} і кількість яких, за лемою 4, дорівнює C_{n+1} .

$$M_{I_n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \alpha_{13} & \dots & \dots & \alpha_{1n} \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{24} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \dots & \ddots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \alpha_{n-2n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow M_{I_{n-1}} = \begin{pmatrix} 0 & \beta_{12} & \beta_{13} & \dots & \dots & \beta_{1n-1} \\ 0 & 0 & \beta_{23} & \beta_{24} & \dots & \beta_{2n-1} \\ \vdots & \dots & \ddots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \beta_{(n-1)-(n-1)} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

де $\beta_{ij} = \alpha_{ij+1}$.

3 Про кількість класів еквівалентних у розумінні Моріти нерозкладних напівланцюгових кілець.

Означення. (див [1]) Напівланцюгове нерозкладне двобічно нетерове кільце A , з сагайдаком $Q(A)$ називається кільцем першого типу, якщо $Q(A)$ є ланцюг.

Означення. Нехай A_1 та A_2 два напівланцюгових кільця з сагайдаком

$$\begin{matrix} 1 & 2 & & n-1 & n \\ \bullet & \longrightarrow & \bullet & \longrightarrow & \bullet \end{matrix}$$

Будемо говорити, що два кільця першого типу A_1 та A_2 належать одному класу тоді й лише тоді, коли їх сагайдаки збігаються, а тіла ендоморфізмів простих проективних модулів ізоморфні.

Твердження. Наступні умови рівносильні для напівланцюгового нерозкладного кільця A :

1. Сагайдак кільця A є ланцюгом.
2. Кільце A має єдиний проективний простий A -модуль P .

Позначимо через $D=E(P)$ – тіло ендоморфізмів простого проективного модуля P .

Зв'язок між кількістю еквівалентних у розумінні Моріти класів напівланцюгових нерозкладних кілець та числами Каталана виникає у зв'язку з однією теоремою Голді (див. [6]).

Теорема (Голді). Нехай A – нерозкладне напівланцюгове кільце з простим проективним модулем P . Тоді A еквівалентно у розумінні Моріти фактор-кільцю $T_n(D)/I$, де $I \subseteq R_n^2$, де R_n – радикал Джекобсона кільця $T_n(D)$.

Наслідок. Число класів еквівалентних у розумінні Моріти нерозкладних напівланцюгових кілець з сагайдаком

$$\begin{matrix} 1 & 2 & & n-1 & n \\ \bullet & \longrightarrow & \bullet & \longrightarrow & \bullet \end{matrix}$$

та ізоморфними тілами ендоморфізмів простих A -модулів, дорівнює C_{n-1} .

Доведення. Нехай A довільне нерозкладне напівланцюгове кільце сагайдак якого є ланцюг, зважаючи на твердження маємо, що кільце має єдиний простий проективний A -модуль P . Роз-

глянемо кільце $T_n(D)$ над тілом ендоморфізмів D модуля P . За лемами 1-4, параграфу 2, маємо, що кількість ідеалів $I \subseteq R_n^2$ дорівнює C_{n-1} , отже кількість нерозкладних фактор-кілець $T_n(D)/I$ дорівнює C_{n-1} . Зважаючи на теорему Голді отримуємо, що кількість нерозкладних напівланцюгових кілець з простим проективним модулем P дорівнює C_{n-1} .

Висновки

У цій роботі знайдено, ще одне використання послідовності чисел Каталана, і встановлено зв'язок між числами Каталана та числом ідеалів у кільці верхніх трикутних матриць $T_n(D)$. У розділі 3 роботи наведено застосування цієї послідовності у теорії напівланцюгових кілець.

Список використаних джерел

1. Gubareni N.M., Kirichenko V.V. Rings and Modules. Czestochowa. // - 2001. - 306 p.
2. Eisenbud D., Griffith P. The structure of serial ring. Pacif. J. Math., 36 (1971), N 1, 109-121.
3. Stanley, R.P. (1999): Enumerative Combinatorics, Vol. 2. Cambridge University Press. (pp. 212-229)
4. Anderson F.W. and Fuller K.R., Rings and Categories of modules, Springer values, New York and Berlin, 2nd ed., 1992.
5. Drozd Y. A., Kirichenko V. V., Konechnomernye algebrы. Publisher Kiev State University, Vishcha Shkola, Kiev 1980.
6. Goldie A. V., Torsion-free modules and rings, J. Algebra v.1 (1964), p. 268-287.

Надійшла до редколегії 27.03.2007

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА

УДК 519.9

Світлана І. Балого, аспірант

Svitlana I. Baloha, PhD student

Асимптотика розв'язків L -діагональних систем

Asymptotic forms of the solutions of L -diagonal systems

В даній статті розглядається асимптотика розв'язків L -діагональної системи диференціальних рівнянь, визначених на m -вимірному торі.

Ключові слова: асимптотика розв'язків, L -діагональна система, m -вимірний тор.

In this article the asymptotic forms of the solutions of L -diagonal systems of differential equations on the m -dimensional torus are under the consideration.

Key words: asymptotic forms, L -diagonal systems, m -dimensional torus.

Розглянемо лінійне розширення динамічної системи на торі T^m , тобто лінійну щодо $x \in R^n$ систему диференціальних рівнянь

$$\dot{\varphi} = a(\varphi), \dot{x} = [\Lambda(\varphi) + Q(\varphi)]x, \quad (1)$$

в якій $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m) \in T^m$,

$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in R^n$, вектор-функції

$a(\varphi) = (a_1(\varphi), a_2(\varphi), \dots, a_m(\varphi))$ і матричні

функції $\Lambda(\varphi)$ і $Q(\varphi)$ – неперервні 2π -

періодичні по кожній змінній φ_ν , $\nu = \overline{1, m}$,

крім того вектор-функція $a(\varphi)$ неперервно

диференційовна по $\varphi \in T^m$, а матрична функція

$\Lambda(\varphi)$ – діагональна:

$$\Lambda(\varphi) = \text{diag}(\lambda_1(\varphi), \lambda_2(\varphi), \dots, \lambda_n(\varphi)).$$

Позначатимемо через $\varphi_j(\varphi)$,

$\varphi_0(\varphi) = \varphi \in T^m$ – розв'язок першого із рівнянь

системи (1), а через Ω_φ – ω -граничну

множину цього розв'язку. Як відомо,

наприклад, із [2] Ω_φ не пуста множина в силу

компактності фазового простору T^m . Через Ω

позначатимемо об'єднання всіх Ω_φ :

$$\Omega = \bigcup_{\varphi \in T^m} \Omega_\varphi.$$

Що до власних значень матриці $\Lambda(\varphi)$,

тобто функцій $\lambda_j(\varphi)$, $(j = \overline{1, n})$.

Припускаємо, що вони асимптотично

розділені. Це означає, що величина

$\text{Re}(\lambda_j(\varphi) - \lambda_\nu(\varphi))$, $j \neq \nu$, не змінює знаку

при $\varphi \in \Omega$? ζ ? $L \blacktriangleright L \blacktriangleright \alpha$

Зауважимо, що в вихідних рівняннях вектор x , матриці $\Lambda(\varphi)$ і $Q(\varphi)$, взагалі кажучи, будемо вважати комплексно значними.

Припускаємо також, що матриця $Q(\varphi)$ абсолютно інтегровна на проміжку $[0, \infty)$ вздовж кожного розв'язку $\varphi_j(\varphi)$, $\varphi \in T^m$, тобто

$$\int_0^\infty \|Q(\varphi_j(\varphi))\| dt < \infty. \quad (2)$$

По аналогії з [1] системи вигляду (1) будемо називати L -діагональними.

Дослідимо поведінку розв'язків при $t \rightarrow \infty$ другого з рівнянь початкової системи за

умови, що поведінка розв'язків $\varphi_j(\varphi)$, $\varphi \in T^m$ першого із цих рівнянь нам відома.

Позначимо через $\mu_j(\varphi)$ – розв'язок рівняння

$$\langle \text{grad} \mu, a(\varphi) \rangle = \lambda_j(\varphi), \quad (j = \overline{1, 2, \dots, n}) \quad (3)$$

і в вихідній системі запровадимо заміну

$$x = e^{\mu_j(\varphi)} y_j. \quad (4)$$

Після цього вихідна система (1) набуває вигляду

$$\dot{\varphi} = a(\varphi), \dot{y}_j = [\Lambda(\varphi) - \lambda_j(\varphi)E]y_j + Q(\varphi)y_j. \quad (5)$$

Позначимо через $Y^j(t, \tau, \varphi)$,

$Y^j(\tau, \tau, \varphi) = E$ матрицант системи рівнянь

$$\dot{\varphi} = a(\varphi), \dot{y} = [\Lambda(\varphi) - \lambda_j(\varphi)E]y. \quad (6)$$

Оскільки $\Lambda(\varphi)$ – діагональна матриця, то зрозуміло, що

$$Y^j(t, \tau, \varphi) = e^{\int_{\tau}^t [\Lambda(\varphi_s(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_s(\varphi))E] ds}$$

Так як власні числа матриці $\Lambda(\varphi)$ асимптотично розділені, то, не обмежуючи загальності, можна вважати, що вони занумеровані в природному порядку зростання за винятком скінченного числа власних значень, які рівні між собою

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \lambda_1(\varphi) &< \operatorname{Re} \lambda_2(\varphi) < \dots < \operatorname{Re} \lambda_l(\varphi) \leq \\ &\leq \operatorname{Re} \lambda_{l+1}(\varphi) \leq \dots \leq \operatorname{Re} \lambda_{l+k}(\varphi) < \\ &< \operatorname{Re} \lambda_{l+k+1}(\varphi) < \dots < \operatorname{Re} \lambda_n(\varphi), \varphi \in \Omega, \end{aligned}$$

а тому $\operatorname{Re}(\lambda_j(\varphi) - \lambda_v(\varphi)) \geq 0$, при $\varphi \in \Omega$, якщо $v < j$ і $\operatorname{Re}(\lambda_j(\varphi) - \lambda_v(\varphi)) \leq 0$, при $\varphi \in \Omega$, якщо $v > j$.

Розглянемо тепер власні значення матриці $\Lambda(\varphi)$ вздовж траєкторій $\varphi_t(\varphi)$. Так як кожна така траєкторія лише скінченний проміжок часу T_φ перебуває поза деяким оточенням $U(\Omega_\varphi)$ своєї ω -граничної множини, то в силу компактності тора T^m можна вказати такий проміжок часу T , що при $t > T$ кожна траєкторія $\varphi_t(\varphi)$, $\varphi \in T^m$ перебуває в деякому фіксованому оточенні множини Ω .

За умови асимптотичної роздільності власних чисел матриці $\Lambda(\varphi)$ можна стверджувати (в силу компактності множини Ω), що ці числа асимптотично розділені і в оточенні цієї множини.

Ці міркування переконують нас в справедливості твердження: існує такий оточення $U(\Omega)$ множини Ω і таке (можливо досить велике) число $T > 0$, що $\varphi_t(\varphi) \in U(\Omega)$ для всіх $t > T$ і $\varphi \in T^m$, причому величина $\operatorname{Re}(\lambda_j(\varphi_t(\varphi)) - \lambda_v(\varphi_t(\varphi)))$, $j \neq v$ не змінює свого знаку при всіх $t > T$ і $\varphi \in T^m$.

Розглянемо тепер систему (5) в $U(\Omega)$ записавши її у вигляді

$$\dot{y}_j = [\Lambda(\varphi_t(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_t(\varphi))E]y_j + Q(\varphi_t(\varphi))y_j, \quad (7)$$

$$t \geq T, \quad \varphi \in T^m.$$

Разом з цією системою розглянемо систему інтегральних рівнянь при $t \geq T$

$$y_j(t, \varphi) = e_j + \int_a^t Y^j(t, \tau, \varphi) Q(\varphi_\tau(\varphi)) y_j(\tau, \varphi) d\tau,$$

де $e_j = \operatorname{col}(0, \dots, 0 | 0, \dots, 0)$, а нижня межа

інтегрування a дорівнює T для перших j рівнянь і $+\infty$ для інших.

Безпосередньо переконуємося, що неперервний розв'язок $y_j(t, \varphi)$ системи інтегральних рівнянь (8), якщо він існує, є розв'язком системи рівнянь (7).

Справді, диференціюючи $y_j(t, \varphi)$ по t , маємо:

$$\begin{aligned} \frac{dy_j(t, \varphi)}{dt} &= Y^j(t, t, \varphi) Q(\varphi_t(\varphi)) y_j(t, \varphi) + \\ &+ \int_a^t \frac{dY^j(t, \tau, \varphi)}{dt} Q(\varphi_\tau(\varphi)) y_j(\tau, \varphi) d\tau = \\ &Q(\varphi_t(\varphi)) y_j(t, \varphi) + [\Lambda(\varphi_t(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_t(\varphi))E] y_j(t, \varphi) - e_j = \\ &= [\Lambda(\varphi_t(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_t(\varphi))E] y_j(t, \varphi) + Q(\varphi_t(\varphi)) y_j(t, \varphi) \end{aligned}$$

бо

$$\begin{aligned} &[\Lambda(\varphi_t(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_t(\varphi))E] e_j = \\ &= \operatorname{diag}(\lambda_1(\varphi_t(\varphi)), \dots, \lambda_{j-1}(\varphi_t(\varphi)), 0, \lambda_{j+1}(\varphi_t(\varphi)), \dots, \lambda_n(\varphi_t(\varphi))) \cdot \\ &\quad \cdot \operatorname{col}(0, \dots, 0 | 0, \dots, 0) = 0. \end{aligned}$$

Отже, $y_j(t, \varphi)$ – розв'язок системи рівнянь (7).

Переконуємося в тому, що такий розв'язок $y_j(t, \varphi)$ існує. Для цього проаналізуємо елементи матрицанта $Y^j(t, \tau, \varphi)$. З вигляду $Y^j(t, \tau, \varphi)$ робимо висновок, що елементи рядків цієї матриці з першого до j -го обмежені при $t \geq T$, бо v -й рядок містить лише один відмінний від нуля елемент на v -тому місці, що дорівнює

$$e^{\int_{\tau}^t [\lambda_v(\varphi_s(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_s(\varphi))] ds}$$

А тому що $\operatorname{Re}(\lambda_v(\varphi) - \lambda_j(\varphi)) \leq 0$, $\varphi \in \Omega$, то

$$\left| \frac{e^{\int_{\tau}^t [\lambda_v(\varphi_s(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_s(\varphi))] ds}}{e^j} \right| \leq 1 \quad \text{при } t \geq T.$$

Елементи v -го рядка матрицанта $Y^j(t, \tau, \varphi)$ з $v = j+1$ до $v = n$ відмінні від нуля лише ті, що стоять на v -му місці і вони дорівнюють відповідно

$$e^{-\int_{\tau}^t [\lambda_v(\varphi_s(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_s(\varphi))] ds}, \quad (v = \overline{j+1, n}).$$

Так як $\operatorname{Re}(\lambda_v(\varphi_s(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_s(\varphi))) \geq 0$, $s > t \geq T$, то

$$\left| \frac{e^{-\int_{\tau}^t [\lambda_v(\varphi_s(\varphi)) - \lambda_j(\varphi_s(\varphi))] ds}}{e^{-t}} \right| \leq 1.$$

Таким чином,

$$\|Y'(t, \tau, \varphi)\| \leq K < \infty$$

як при $T \leq \tau \leq t < \infty$, $\varphi \in T^m$, так і при $T \leq t \leq \tau < \infty$, $\varphi \in T^m$.

Якщо тепер вважати, що число T настільки велике, що при всіх $t \geq T$ виконується нерівність

$$K \int_T^\infty \|Q(\varphi_t(\varphi))\| dt \leq q < 1, \quad (9)$$

то на основі теореми пар.6 гл.5 із [1] робимо висновок про існування при $t \geq T$ єдиного неперервного і обмеженого розв'язку інтегрального рівняння (8), який, згідно методу послідовних наближень, можна представити як суму абсолютно і рівномірно збіжного ряду

$$y_j(t, \varphi) = e_j + \sum_{v=1}^{\infty} (y_j^{(v)}(t, \varphi) - y_j^{(v-1)}(t, \varphi)),$$

де

$$\begin{aligned} y_j^{(v)}(t, \varphi) &= \\ &= e_j + \int_0^t Y'(t, \tau, \varphi) Q(\varphi_\tau(\varphi)) y_j^{(v-1)}(\tau, \varphi) d\tau, \\ &\quad (v = 1, 2, \dots) \end{aligned}$$

і $y_j^{(0)}(t, \varphi) = e_j$.

Із рівняння (8), враховуючи, що $[a_j, t] \subset [T, \infty]$ маємо оцінку

$$\|y_j(t, \varphi)\| \leq \|e_j\| + K \int_T^\infty \|Q(\varphi_\tau(\varphi))\| \|y_j(\tau, \varphi)\| d\tau,$$

з якої, враховуючи (9), дістаємо нерівність

$$\|y_j(t, \varphi)\| \leq \frac{1}{1-q}$$

при $t \geq T$.

Неважко переконатися, що

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y_j(t, \varphi) = e_j,$$

а тому

$$y_j(t, \varphi) = e_j + \eta_j(t, \varphi),$$

де $\|\eta_j(t, \varphi)\| \rightarrow 0$, коли $t \rightarrow \infty$.

Повертаючись до вихідної змінної x , враховуючи заміну змінних (4) робимо висновок, що вихідна система (1) має систему розв'язків

$$\begin{aligned} x_j(t, \varphi) &= e^{\int_T^t \sum_{j=1}^n \lambda_j(\varphi_s(\varphi)) ds} (e_j + \eta_j(t, \varphi)), \quad (j = \overline{1, n}; \\ &\quad t \geq T). \end{aligned} \quad (10)$$

Ця система розв'язків утворює фундаментальну систему, бо визначник

Вронського

$$W(t, \varphi) = \det[x_{jv}(t, \varphi)] =$$

$$= e^{\int_T^t \sum_{j=1}^n \lambda_j(\varphi_s(\varphi)) ds} \cdot \det(\delta_{ij} + \eta_{ij}(t, \varphi)) \neq 0.$$

Так як лінійна система рівнянь

$$\dot{x} = [\Lambda(\varphi_t(\varphi)) + Q(\varphi_t(\varphi))]x$$

для кожної задачі Коші $x_j(T, \varphi) = x_j$ має єдиний розв'язок, визначений на проміжку $(-\infty, \infty)$, то фундаментальну систему розв'язків (10) можна однозначно продовжити як на проміжок $[0, \infty)$, так і на проміжок $(-\infty, \infty)$.

Приклад. Розглянемо систему

$$\dot{\varphi} = a(\varphi), \quad \ddot{x} + p^2(\varphi)x = 0, \quad (11)$$

де $a(\varphi) \in C^1(T^m)$, $p(\varphi)$ – додатна неперервно диференційовна 2π -періодична по φ функція.

Систему можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} &= a(\varphi), \quad \dot{x} = p(\varphi)y, \\ \dot{y} &= -p(\varphi)x - \frac{\dot{p}(\varphi)}{p(\varphi)}y \end{aligned} \quad (12)$$

або ж

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} &= a(\varphi), \\ \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & p(\varphi) \\ -p(\varphi) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\dot{p}(\varphi)}{p(\varphi)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Безпосередні підрахунки показують, що матриця $T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}$ приводить матрицю

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 & p(\varphi) \\ -p(\varphi) & 0 \end{pmatrix} &\text{ до діагонального вигляду} \\ &- \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} -i & -1 \\ -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & p(\varphi) \\ -p(\varphi) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} p(\varphi)i & 0 \\ 0 & -p(\varphi)i \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Тому вихідну систему, зробивши в ній заміну

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix},$$

зводимо до такої

$$\dot{\varphi} = a(\varphi),$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(\varphi)i & 0 \\ 0 & -p(\varphi)i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \frac{\dot{p}(\varphi)}{2p(\varphi)} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}.$$

Якщо $\dot{p}(\varphi,(\varphi))$ абсолютно інтегровна на проміжку $[0, \infty)$ для будь-якої траєкторії $\varphi,(\varphi)$, то для фундаментальної матриці справедлива асимптотична формула

$$Y(t, \varphi) = \begin{pmatrix} e^{i \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds} + \varepsilon_1(t, \varphi) & \varepsilon_2(t, \varphi) \\ \varepsilon_3(t, \varphi) & e^{-i \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds} + \varepsilon_4(t, \varphi) \end{pmatrix}$$

де $\varepsilon_\nu(t, \varphi) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, $(\nu = \overline{1,4})$.

Повертаючись до вихідних змінних x і y для вихідної системи дістанемо фундаментальну матрицю

$$\tilde{X}(t, \varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} Y(t, \varphi) =$$

$$= \begin{pmatrix} e^{i \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds} + \tilde{\varepsilon}_1(t, \varphi) & -i \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \tilde{\varepsilon}_2(t, \varphi) \\ i \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \tilde{\varepsilon}_3(t, \varphi) & -i \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \tilde{\varepsilon}_4(t, \varphi) \end{pmatrix}.$$

де $\tilde{\varepsilon}_\nu(t, \varphi) \rightarrow 0$ при $\nu = \overline{1,2,3,4}$.

Покладаючи

$$\tilde{X}(t, \varphi) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2i} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2i} \end{pmatrix} = X(t, \varphi)$$

дістанемо дійсну фундаментальну матрицю вихідної системи (12)

$$X(t, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \eta_1(t, \varphi) & \sin \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \eta_2(t, \varphi) \\ -\sin \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \eta_3(t, \varphi) & \cos \int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds + \eta_4(t, \varphi) \end{pmatrix}$$

Таким чином, вихідне рівняння (11) при $t \rightarrow \infty$ має асимптотичні розв'язки вигляду

$$x(t, \varphi) = C_1 \cos \left(\int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds \right) + C_2 \sin \left(\int_0^t p(\varphi_s(\varphi)) ds \right) + \eta(t, \varphi),$$

Надійшла до редколегії 11.05.2007

де C_1 і C_2 – довільні сталі, $\eta(t, \varphi)$ і

$$\frac{d\eta(t, \varphi)}{dt} \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Як приклад розглянемо аналог рівняння Мат'є

$$\ddot{\varphi} = \sin \varphi, \quad \ddot{x} + (a - 2h^2 \cos 2\varphi)x = 0.$$

Це рівняння виду (11) в якому $a(\varphi) = \sin \varphi$, де φ – кутова координата на одиничному колі і $p^2(\varphi) = a - 2h^2 \cos 2\varphi$, $a > 2h^2$.

$$\frac{\dot{p}}{2p} = \frac{4h^2 \sin 2\varphi}{4p^2} = \frac{h^2 \sin 2\varphi}{a - 2h^2 \cos 2\varphi},$$

Збіжність $\int_0^\infty \frac{\dot{p}(\varphi_s(\varphi))}{2p(\varphi_s(\varphi))} dt$ еквівалентна збіжності

$$\begin{aligned} \int_{\varphi_0}^\pi \frac{h^2 \sin 2\varphi}{a - 2h^2 \cos 2\varphi} d\varphi &= -\frac{h^2}{2} \int_{\varphi_0}^\pi \frac{d(\cos 2\varphi)}{a - 2h^2 \cos 2\varphi} = \\ &= \frac{1}{4} \ln(a - 2h^2 \cos 2\varphi) \Big|_{\varphi_0}^\pi \end{aligned}$$

тобто інтеграл збіжний і маємо висновок: з плином часу система наближається до режиму гармонічних коливань з амплітудою $\omega(\varphi,(\varphi)) \rightarrow \sqrt{a - 2h^2}$.

Перехідний процес описується асимптотичними формулами

$$\begin{aligned} x(t, \varphi) &= C_1 \cos \left(\int_0^t \sqrt{a - 2h^2 \cos 2\varphi_s(\varphi)} ds \right) + \\ &+ C_2 \sin \left(\int_0^t \sqrt{a - 2h^2 \cos 2\varphi_s(\varphi)} ds \right) + \eta(t, \varphi). \end{aligned}$$

Література

1. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости. – М.: Наука, 1969.
2. Самойленко А.М. Элементы математической теории многочастотных колебаний. Инвариантные торы. – М.: Наука, 1987.

УДК 533.6.013.42

О.В. Гавриленко, асистент

Осесиметрична задача співудару твердого сферичного тіла з поверхнею каверни

В роботі досліджується процес ударної взаємодії твердого сферичного тіла з поверхнею сферичної порожнини. Сформульовано нестационарну змішану крайову задачу з відомою границею, розв'язок якої зводиться до спільного розв'язування нескінченної системи лінійних інтегральних рівнянь Вольтера другого роду і диференціального рівняння руху тіла. У випадку спрощеної постановки розв'язок зводиться до послідовності інтегральних рівнянь Вольєрра. Для обох постановок отримано гідродинамічні та кінематичні характеристики процесу.

Ключові слова: стислива рідина, поверхня каверни, тверде сферичне тіло, гідродинамічна сила, гідродинамічний тиск.

E-mail: v_gavr@ukr.net

Вступ. У наш час експериментально доведена можливість створення підводних транспортних апаратів на основі нового фізичного принципу руху тіл під водою – суперкавітаційного руху [16-18, 22]. За такого руху тіло знаходиться всередині кавітаційної порожнини, що його оточує, – суперкаверни – і рухаючись в ній, може розвивати швидкість, порівняну зі швидкістю поширення звуку у воді.

Однією з проблем суперкавітаційного руху є забезпечення стійкості руху тіла в каверні [14, 16-18]. За такого руху тіло контактує з поверхнею каверни лише своєю головною частиною. Гідродинамічна сила опору зануренню з боку рідини, прикладена до області контакту тіла з поверхнею каверни, створює перекидаючий момент щодо центру мас тіла, викликаючи нестійкість суперкавітаційного руху тіла в рідині. Цією нестійкістю обумовлюється виникнення поперечних ударів тіла по поверхні каверни, що можуть суттєво впливати на загальний характер руху тіла. Вищесказане свідчить про актуальність дослідження процесу удару тіла по поверхні каверни.

В результаті дослідження ударної взаємодії циліндричного тіла з порожниною каверни в режимі суперкавітаційного обтікання – плоска задача – із використанням моделей нестисливої рідини [5] і стисливої рідини [8, 9] було отримано гідродинамічні і кінематичні характеристики процесу.

Аналогічно досліджувався рух сферичного тіла в порожнині сферичної каверни – осесиметрична задача. Однак слід зазначити, що

O.V. Gavrilenko, assistant lecturer

The axis symmetrical problem about impact of a solid spherical body on surface of a cavity

The paper deals with the early stage of a solid spherical body impact on the surface of spherical cavity. The stated mixed non-stationary boundary-value problem with given boundary was formulated, its solution is reduced to joint resolving of infinite system of linear integral Volterra's equations of the second-degree and differential equation of body movement. In case simplified formulation the solution is reduced to infinite sequence of linear integral Volterra's equations. For both formulation the hydrodynamic and kinematic characteristics are obtained.

Key words: compressible fluid, cavity surface, solid spherical body, hydrodynamic force, hydrodynamic pressure

дослідження осесиметричної каверни, які проводилися багатьма вченими, переважно стосувалися її геометрії, зокрема, встановлювалися залежності між довжиною і шириною каверни, числом кавітації та розмірами каверноутворюючого тіла, а також між подовженням тіла і числом кавітації [4, 13].

Результати досліджень гідродинамічних та кінематичних характеристик процесу занурення твердого сферичного тіла в стисливу рідину крізь поверхню сферичної каверни наведено в роботах [10-11]. В публікації [10] наведено постановку осесиметричної задачі і одержано її асимптотичний розв'язок для початкової стадії ударної взаємодії у випадку нескінченно малого зазору, тобто у випадку, коли поперечні розміри тіла і порожнини збігаються. В роботі [11] сформульована загальна постановка задачі для довільного зазору, яка є змішаною нестационарною початково-крайовою задачею з невідомою змінною в часі границею, і одержано розв'язуючі нескінченні системи інтегральних рівнянь Вольєрра 2-го роду. Для малого та нескінченно малого зазору подано асимптотичні розв'язки задачі, для невеликого – чисельний розв'язок вказаних систем. У даній публікації, що базується на результатах публікації [11], задачу співудару тіла з поверхнею каверни для нульового зазору розв'язано в двох постановках, що відрізняються між собою граничними умовами на вільній поверхні порожнини, і одержано її чисельні розв'язки.

Постановка задачі. Розглянемо таку механічну систему: в безмежній рідині знаходиться

сферична каверна радіусу R_c ; всередині порожнини міститься тверде сферичне тіло радіусу R_b , вісь якого паралельна осі порожнини. В даній публікації будемо вважати, що радіус каверни так мало відрізняється від радіусу тіла, що їх можна вважати рівними – $R_c = R_b$. Таким чином, величина зазору між порожниною каверни та тілом $d = R_c - R_b$ дорівнює нулю. Тіло під дією зовнішніх сил здійснює поперечні удари по поверхні каверни. Нехай у початковий момент часу $t = 0$ сфера досягає поверхні порожнини і починає занурюватися крізь неї зі швидкістю $v_0(t)$, причому початкова швидкість занурення $v_0 = v_0(0)$ значно менша порівняно зі швидкістю звуку в рідині. Рідину вважатимемо ідеальною стисливою, а глибини занурення крізь поверхню каверни z^* – малими. Такі припущення дозволяють описувати рух рідини хвильовим рівнянням в акустичному наближенні і знести граничні умови на незбурену поверхню каверни.

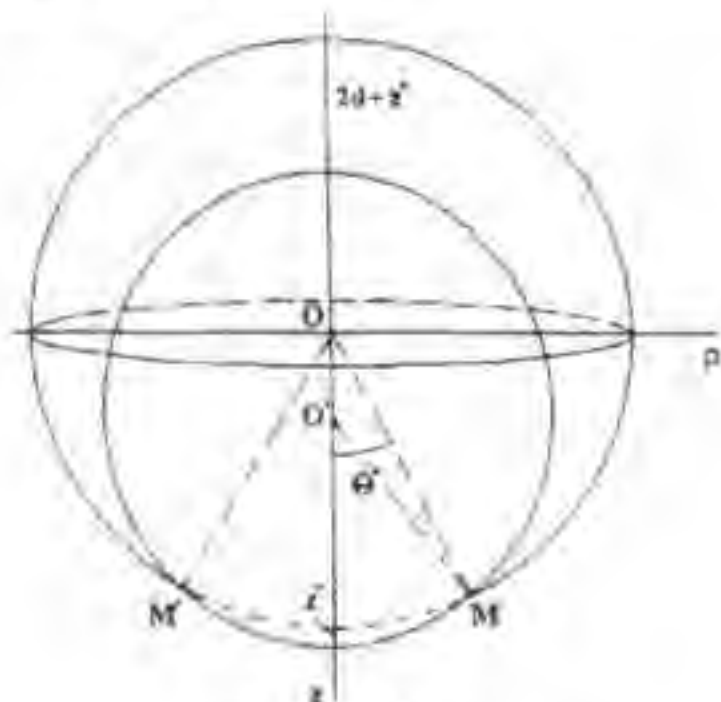


Рис.1

Зв'яжемо поверхню порожнини з нерухомою циліндричною системою координат (рис.1): центр O розмістимо на осі порожнини, вісь $O\rho$ направимо горизонтально; вісь Oz – вертикально вниз. Оскільки гідродинамічна картина процесу занурення сферичного тіла в рідину через поверхню каверни в довільному осьовому перерізі повторюватиметься, то обмежимося розгляданням руху в площині ρOz і, таким чином, розглядатимемо осесиметричну задачу, що значно спрощує її реалізацію.

В площині ρOz введемо також сферичну систему координат: центр перерізу O – полюс сферичної системи, θ – сферичний кут, що відкладається від додатного напрямку осі Oz , r – сферичний радіус.

Введемо безрозмірні змінні:

$$\bar{\rho} = \frac{\rho}{R_b}, \quad \bar{z} = \frac{z}{R_b}, \quad \bar{r} = \frac{r}{R_b}, \quad \bar{t} = \frac{Ct}{R_b},$$

$$\bar{p} = \frac{p}{\gamma C^2}, \quad \bar{V} = \frac{V}{C}, \quad \bar{\mu} = \frac{\mu}{\gamma \pi R_b^3}, \quad \bar{F} = \frac{F}{\gamma C^2 R_b^2},$$

де R_b – характерний лінійний розмір (радіус тіла), γ – густина рідини, p – гідродинамічний тиск, V – швидкість деформування поверхні каверни, F – гідродинамічна сила, C – швидкість звуку в рідині, μ – маса сфери (віднесена до маси рідини, витисненої порожниною). Оскільки надалі використовуватимуться тільки безрозмірні змінні, то риску над ними опустимо.

Рух ідеальної стисливої рідини описується хвильовим потенціалом ϕ , що задовольнятиме хвильовому рівнянню

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} = 0, \quad (1)$$

представленому в сферичних координатах [15].

Гідродинамічний тиск і швидкість деформування поверхні каверни визначаються із співвідношень:

$$p = -\frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad V = \text{grad} \phi. \quad (2)$$

Граничні умови представлятимуться у вигляді:

- на всій області контакту тіла з поверхнею каверни задана умова рівності нормальних складових швидкостей деформування поверхні каверни та занурення тіла.

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial r} \right|_{r=1} = v_0(t) \cos \theta, \quad \theta < \theta^*, \quad (3)$$

де θ^* – границя області контакту;

- на вільній поверхні каверни задано гідродинамічний тиск

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{r=1} = 0, \quad \theta > \theta^* \quad (4)$$

Акустичні збурення, викликані в рідині тілом, що занурюється, на нескінченності згасають

$$\phi \rightarrow 0, \quad r \rightarrow \infty. \quad (5)$$

Оскільки до початку занурення рідина перебувала у незбуреному стані, то матимемо нульові початкові умови для хвильового потенціалу

$$\phi|_{t=0} = \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0. \quad (6)$$

Поперечний рух тіла в порожнині описується диференціальним рівнянням

$$\mu \frac{dv_0(t)}{dt} = -\frac{F(t)}{\pi}, \quad v_0(0) = v_0. \quad (7)$$

де гідродинамічна сила $F(t)$ обчислюється за формулою

$$F(t) = 2\pi \int_0^{\theta^*} p(t, \theta) \cos \theta \sin \theta d\theta. \quad (8)$$

Кут θ^* , що визначає границю області контакту, у випадку нульового зазору між тілом і порожниною каверни дорівнює $\theta^* = \frac{\pi}{2}$.

Глибина занурення тіла в рідину крізь поверхню порожнини визначається за формулою $z^* = \int_0^1 v_n(\tau) d\tau$.

Таким чином, сформульована задача (1), (3) – (8) є нестационарною змішаною крайовою задачею з відомою сталою границею. Назвемо дану постановку “загальною”.

В роботі розглядається також спрощена модель процесу занурення тіла в рідину через поверхню каверни (модель “жорсткий екран”), постановка якої відрізняється від “загальної” постановки граничними умовами на вільній поверхні каверни. Отже, для постановки “жорсткий екран” замість динамічної умови на вільній поверхні каверни (4) використовується умова її недеформованості

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right|_{r=1} = 0, \quad \theta > \theta^*. \quad (9)$$

Зазначимо, що дана задача (1), (3), (9), (5) – (8) є незмішаною.

Як буде показано нижче, постановка “жорсткий екран” полегшує виведення розв’язуючої системи задачі, що дозволяє суттєво спростити її чисельну реалізацію.

Метод розв’язання. Задачі в запропонованих постановках розв’язувалися на основі чисельно-аналітичного підходу [7]. Розв’язуємо спочатку задачу в “загальній” постановці.

Застосовуючи до рівняння (1) перетворення Лапласа за часом t із параметром s [1], отримуємо хвильове рівняння в просторі зображень

$$\frac{\partial^2 \varphi^L}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \varphi^L}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \varphi^L}{\partial \theta^2} - s^2 \varphi^L = 0. \quad (10)$$

Величини в просторі зображень за Лапласом позначатимуться з індексом L .

Використовуючи метод Фур’є розподілу змінних і враховуючи умову затухання на нескінченності (5), одержимо загальний розв’язок рівняння (10) у вигляді

$$\varphi^L = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(s) K_{n+\frac{1}{2}}(sr) P_n(\cos \theta), \quad (11)$$

де A_n – невідомі коефіцієнти, $K_{n+\frac{1}{2}}(sr)$ – функції

Макдональда напівцілого порядку, $P_n(\cos \theta)$ – поліноми Лежандра порядку n [3].

Розкладемо в ряди Фур’є по поліномам Лежандра $P_n(\cos \theta)$ швидкість деформування поверхні каверни $V(t, \theta)$ і гідродинамічний тиск $p(t, \theta)$ на ній:

$$p(t, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(t) P_n(\cos \theta), \quad (12)$$

$$V(t, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n(t) P_n(\cos \theta). \quad (13)$$

Застосовуючи перетворення Лапласа за t до виразів (2) для тиску $p(t, \theta)$ і швидкості $V(t, \theta)$ та до розкладань (12), (13), а також враховуючи розв’язок (11), матимемо співвідношення між коефіцієнтами рядів Фур’є для тиску і швидкості в просторі зображень

$$V_n^L(s) = p_n^L(s) + R_n^L(s) \cdot p_n^L(s), \quad (14)$$

де $R_n^L(s)$ матиме вигляд $R_n^L(s) = -1 - \frac{K_{n+\frac{1}{2}}(s)}{K_{n-\frac{1}{2}}(s)}$.

Тоді за теоремою про згортку оригіналів двох функцій, враховуючи рекурентну формулу для представлення $K_n^L(s)$ виду

$$K_n^L(s) = -\frac{v}{s} K_{n+1}^L(s) - K_{n-1}^L(s) \quad [1], \text{ а також наступні}$$

табличні співвідношення між зображенням і оригіналом [7]:

$$e^s K_n^L(s) \rightarrow \frac{z_1^s + z_2^s}{2\sqrt{(1+1)^2 - 1}} \cdot \frac{e^s K_n(s)}{s} \rightarrow \frac{z_1^s - z_2^s}{2v},$$

$z_1(t) = 1 + 1 + \sqrt{(1+2) \cdot t}$; $z_2(t) = 1 + 1 - \sqrt{(1+2) \cdot t}$, одержуємо співвідношення між коефіцієнтами Фур’є $V_n(t)$ і $p_n(t)$

$$V_n(t) = p_n(t) + \int_0^t p_n(\tau) R_n(t - \tau) d\tau. \quad (15)$$

Функція $R_n(t)$ знаходиться з інтегрального рівняння Вольєрра 1-го роду зі слабкою особливістю:

$$\int_0^t R_n(\tau) G_n(t - \tau) d\tau = g_n(t), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (16)$$

$$G_n(t) = \frac{z_1^{n+\frac{1}{2}}(t) + z_2^{n+\frac{1}{2}}(t)}{2\sqrt{t(1+2)}},$$

$$g_n(t) = \frac{z_1^{n+\frac{1}{2}}(t) + z_2^{n+\frac{1}{2}}(t)}{2\sqrt{t+2}} \sqrt{t}.$$

З урахуванням розкладань (12), (13) і співвідношень (15) отримаємо залежність між швидкістю $V(t, \theta)$ і тиском $p(t, \theta)$ на поверхні порожнини:

$$V(t, \theta) = p(t, \theta) + \sum_{n=0}^{\infty} \left(\int_0^t p_n(\tau) R_n(t-\tau) d\tau \right) P_n(\cos \theta). \quad (17)$$

Задовольняючи за допомогою співвідношення (17) граничні умови (3), (4) отримаємо

$$\sum_{n=0}^{\infty} p_n(t) P_n(\cos \theta) = v_0(t) \cos \theta H(\theta^* - \theta) - \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(\int_0^t p_n(\tau) R_n(t-\tau) d\tau \right) P_n(\cos \theta) \right) H(\theta^* - \theta), \quad (18)$$

де $H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0; \\ 0, & x < 0, \end{cases}$ – функція Хевісайда.

Розкладаючи в ряди Фур'є по $P_n(\cos \theta)$ праву частину виразу (18) і прирівнюючи відповідні коефіцієнти в лівій і правій частині, отримуємо нескінченну систему лінійних інтегральних рівнянь Вольєрра 2-го роду відносно коефіцієнтів $p_n(t)$ ($n = \overline{0, \infty}$):

$$p_n(t) = v_{0n}(t) - \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{nm} \int_0^t p_m(\tau) R_m(t-\tau) d\tau, \quad (19)$$

де коефіцієнти $v_{0n}(t)$ і β_{nm} матимуть вигляд:

$$v_{0n}(t) = \begin{cases} \frac{v_0(t)}{2}, & n = 1; \\ -\frac{v_0(t)(2n+1)}{2(n-1)(n+2)} P_n(0), & n \neq 1, \end{cases} \quad (20)$$

$$\beta_{nm} = \begin{cases} \frac{2n+1}{2} \int_0^1 (P_n(x))^2 dx, & n = m, \\ \mathcal{G}_{nm} (P_m(0) P_n'(0) - P_n(0) P_m'(0)), & n \neq m, \end{cases} \quad (21)$$

$$\text{де } \mathcal{G}_{nm} = \frac{2n+1}{2(n-m)(m+n+1)},$$

$$P_n(0) = \begin{cases} \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n} (n!)^2}, & n = 2k; \\ 0, & n = 2k+1, \end{cases} \quad P_n'(0) = n P_{n-1}(0).$$

Коефіцієнти $V_n(t)$ за відомих коефіцієнтів $p_n(t)$ визначатимуться за формулою (15), а швидкість деформування поверхні каверни $V(t, \theta)$ і гідродинамічний тиск $p(t, \theta)$ – за формулами (12), (13), відповідно.

Використовуючи співвідношення (8) і (12), отримаємо гідродинамічну силу опору зануренню

тіла крізь поверхню порожнини каверни з боку рідини

$$F(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(t) b_n, \quad (22)$$

де коефіцієнти визначатимуться за формулою

$$b_n = \begin{cases} \frac{2\pi}{3}, & n = 1; \\ -\frac{2\pi}{(n-1)(n+2)} P_n(0), & n \neq 1. \end{cases}$$

Тоді диференціальне рівняння (7) набуде наступного вигляду

$$\mu \frac{dv_0(t)}{dt} = -\frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} p_n(t) b_n, \quad v_0(0) = v_0. \quad (23)$$

Отже, розв'язуюча система задачі складається з нескінченної системи інтегральних рівнянь (19) і рівняння руху (23).

У результаті розв'язування задачі в постановці “жорсткий екран” (дивись формулу (9)) за допомогою запропонованого підходу отримано нескінченну послідовність лінійних інтегральних рівнянь Вольєрра 2-го роду відносно коефіцієнтів розкладу $p_n(t)$:

$$p_n(t) = v_{0n}(t) - \int_0^t p_n(\tau) R_n(t-\tau) d\tau, \quad (n = \overline{0, \infty}), \quad (24)$$

де ядро $R_n(t)$ обчислюватиметься з рівняння (16), коефіцієнти $v_{0n}(t)$ визначатимуться із (20).

Послідовність (24) повинна розв'язуватися сукупно з рівнянням руху (23).

Чисельна реалізація задачі. Розв'язування задачі здійснювалося чисельно на скінченному часовому відрізку $[0, T]$, який розбивався на рівні частини довжиною Δt , і в отриманих вузлах інтервалу часу обчислювалися всі шукані величини.

Нескінченна система (послідовність) інтегральних рівнянь (19), (24) і права частина диференціального рівняння (23) піддавалися редукції. Обґрунтування такої редукції зроблено, зокрема, в [6]. Порядок редукції N вибирався з міркувань практичної збіжності розв'язку. В системі (послідовності) (19), (24) всі інтеграли обчислювалися за квадратурними формулами лівих прямокутників та Сімпсона з кінцевою поправкою. У результаті дана система (послідовність) зводилася до системи алгебраїчних рівнянь. Диференціальне рівняння (23) замінювалося різницеvim. Для поліпшення збіжності рядів Фур'є застосовувалися σ -множники Гіббса [12]

$$\sigma_n = \begin{cases} 1, & n=0; \\ \frac{\sin \frac{\pi n}{N}}{\frac{\pi n}{N}}, & n=1, N. \end{cases} \quad (25)$$

Ядро $R_n(t)$ нескінченної системи (послідовності) інтегральних рівнянь Вольєрра 2-го роду (19), (24) задовольняє рівнянню Вольєрра 1-го роду (16), яке обчислювалося за допомогою наступного підходу:

- інтервал інтегрування розбивався на рівні малі відрізки $[t_j; t_{j+1}]$, $j = 0, 2, \dots, M-2$;
- кожен інтеграл замінювався сумою інтегралів по відрізку розбиття $[t_j; t_{j+1}]$;
- значення $R_n(t)$ на кожному інтервалі $[t_j; t_{j+1}]$ вважалися сталими і виносилися за знак інтегралу зі значенням $R_n(t_{j+1})$;
- інтеграли $\int_{t_j}^{t_{j+1}} G_n(t-\tau) d\tau$ обчислювалися аналітично;
- в результаті такої процедури рівняння (16) зводилося до системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно $R_n(t_j)$ із трикутною матрицею, де $k \in \left(0, \frac{M}{2}\right)$.

В обчисленнях на проміжку часу $[0, 4]$ варіювалися наступні параметри: маса тіла $\mu = 0,25; 20; \infty$, початкова швидкість занурення тіла $v_0 = 0,01 - 0,05$.

На рис.2 показана залежність гідродинамічного тиску $p(t)$ у лобовій точці від часу за різних значень маси сферичного тіла $\mu = 0,5; 1; 4; \infty$, для початкової швидкості $v_0 = 0,05$.

Із рис.2 можна помітити, що гідродинамічний тиск у лобовій точці тіла в початковий момент часу, відповідно до гіпотези плоскої хвилі, дорівнює своєму максимальному значенню $p = \rho C v_0$, в розмірних позначеннях. Далі на початковому етапі розглянутого часового інтервалу тиск різко падає, причому тим швидше, чим легше тіло.

На рис.3 показана залежність від часу гідродинамічного тиску в лобовій точці за різних значень початкової швидкості $v_0 = 0,01; 0,03; 0,05$, для маси тіла $\mu = 4$.

Із рис.3 можна помітити, що більшому значенню початкової швидкості відповідає

більше значення гідродинамічного тиску в лобовій точці.

На рис.4 показано залежність гідродинамічної сили $F(t)$ від часу для початкової швидкості $v_0 = 0,05$ за різних значень маси $\mu = 0,5; 1; 4; \infty$.

Із рис.4 можна помітити, що гідродинамічна сила істотно залежить від маси тіла: чим масивніше тіло, тим більша сила.

На рис.5 показано залежність гідродинамічної сили $F(t)$ від часу для маси $\mu = 4$, за різних значень початкової швидкості $v_0 = 0,01; 0,03; 0,05$.

Із рис.5 можна помітити, що більшому значенню швидкості в довільний момент часу відповідає більше значення гідродинамічної сили.

На рис.6 показана залежність швидкості руху тіла $v_n(t)$ від часу для початкової швидкості $v_0 = 0,05$, за різних значень маси тіла $\mu = 0,5; 1; 4; \infty$.

Із рис.6 видно, що в довільний момент часу чим масивніше тіло, тим більше значення швидкості.

На рис.7 наведено розподіл гідродинамічного тиску $p(t)$ по поверхні порожнини в моменти часу $t = 0,4; 1; 1,4; 2$ для наступних значень швидкості $v_0 = 0,05$ і маси $\mu = 4$.

Із рис.7 видно, що

- гідродинамічний тиск на недеформованій поверхні каверни дорівнює нулю, що відповідає граничним умовам моделі задачі;
- з часом відбувається розширення області контакту та відповідний перерозподіл по ній тиску.

Для моделі "жорсткий екран" одержано аналогічні результати, тому доцільно зупинитися на деяких з них.

На рис.8 наведено порівняння результатів для гідродинамічного тиску $p(t)$, одержаних на проміжку часу $[0; 4]$ з використанням різних постановок: модель "жорсткий екран" і "загальна" постановка з природними граничними умовами на вільній поверхні каверни. У розрахунках використовувалися такі значення параметрів: початкова швидкість $v_0 = 0,05$, маса $\mu = 4$. Криві, позначені на малюнку пунктиром і суцільною лінією, відповідають моделі "жорсткий екран" і "загальній" постановці.

На рис.9 наведено порівняння результатів, що були одержані для гідродинамічної сили $F(t)$ для обох постановок: модель "жорсткий екран" і "загальна" постановка. У розрахунках

використовувалися такі значення параметрів: маса $\mu = 4$, початкова швидкість $v_0 = 0,05$. Криві, позначені на малюнку суцільною лінією та пунктиром відповідатимуть “загальній” постановці та моделі “жорсткий екран”.

Із рис.8 – 9 видно, що більш “жорсткі” умови на вільній поверхні порожнини завищують значення гідродинамічних навантажень, але оскільки ця різниця в значеннях характеристик незначна, то для одержання інженерних оцінок розвитку процесу можна рекомендувати дану спрощену методику, що суттєво скоротить затрати комп’ютерного часу.

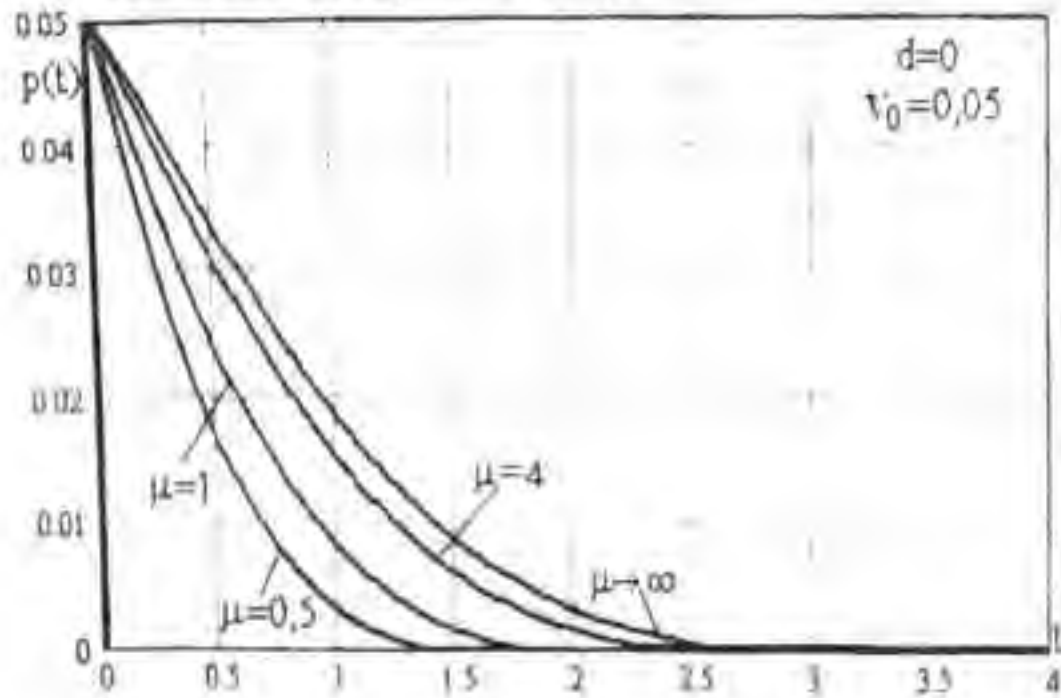


Рис.2

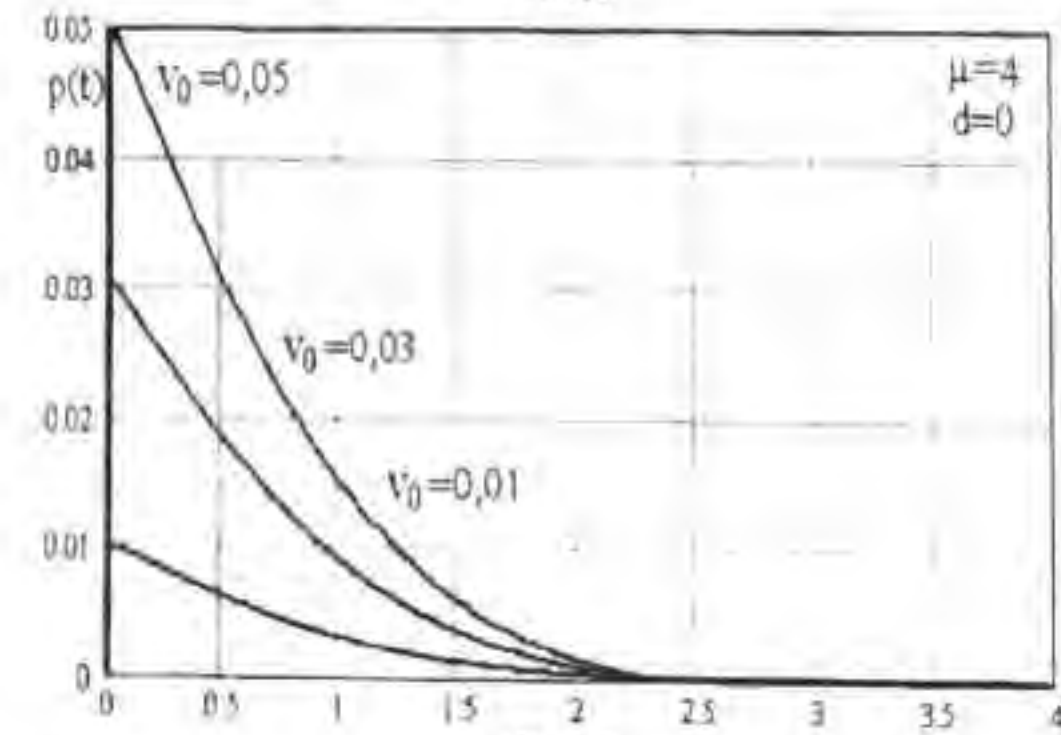


Рис.3

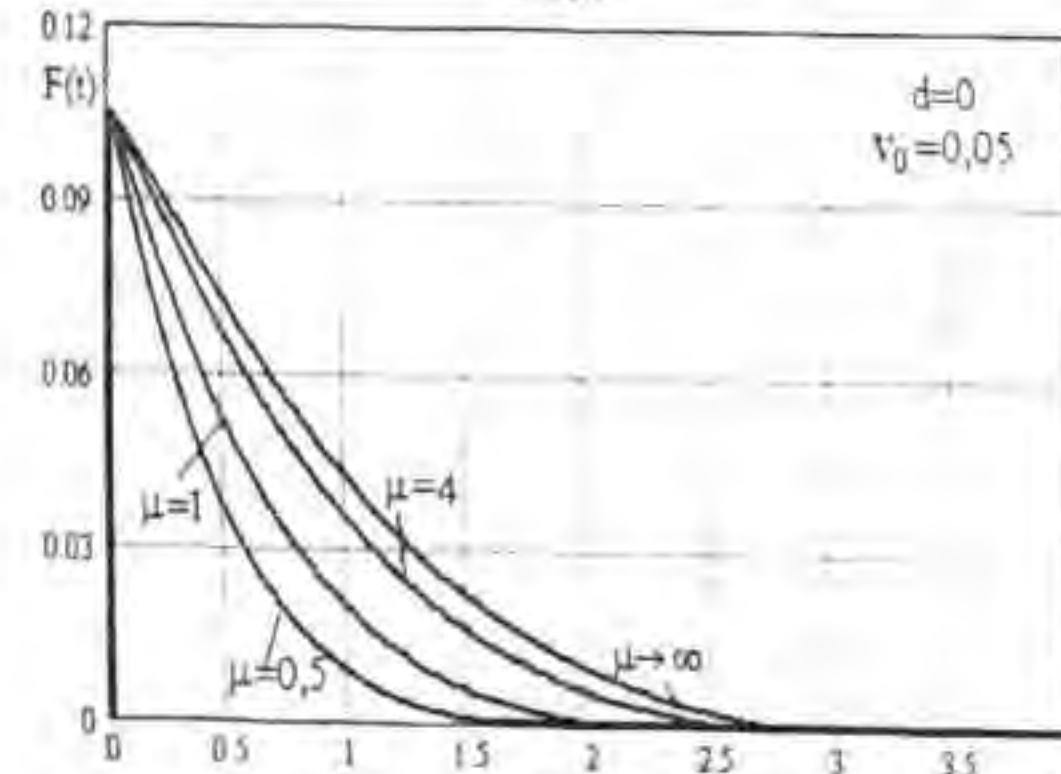


Рис.4

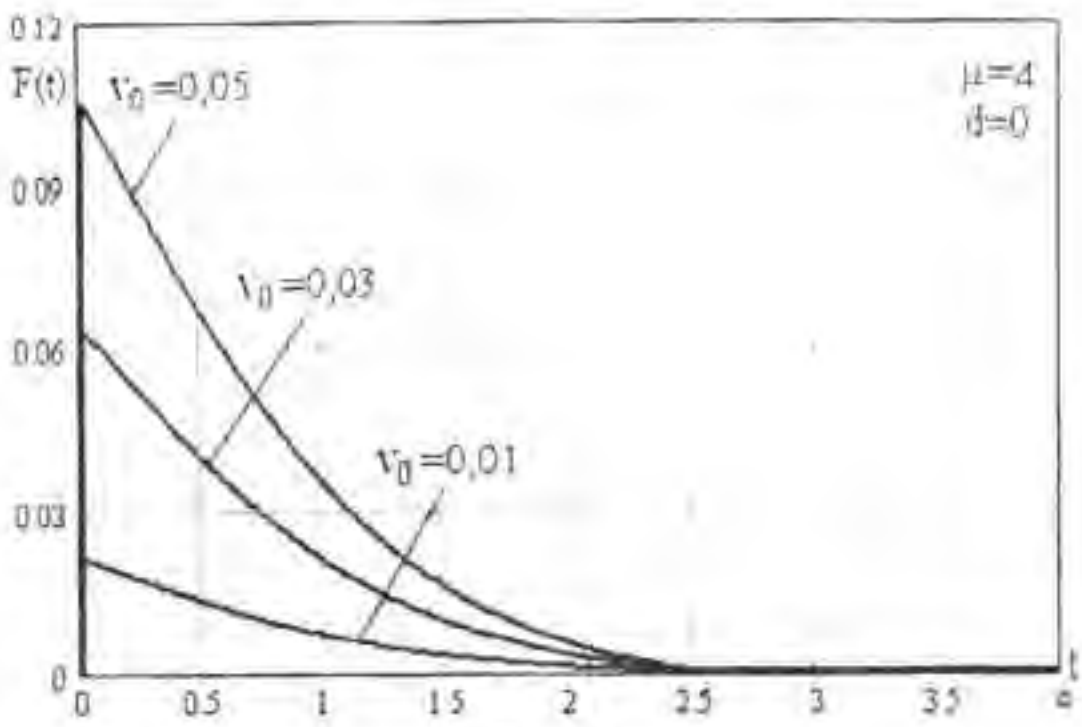


Рис.5

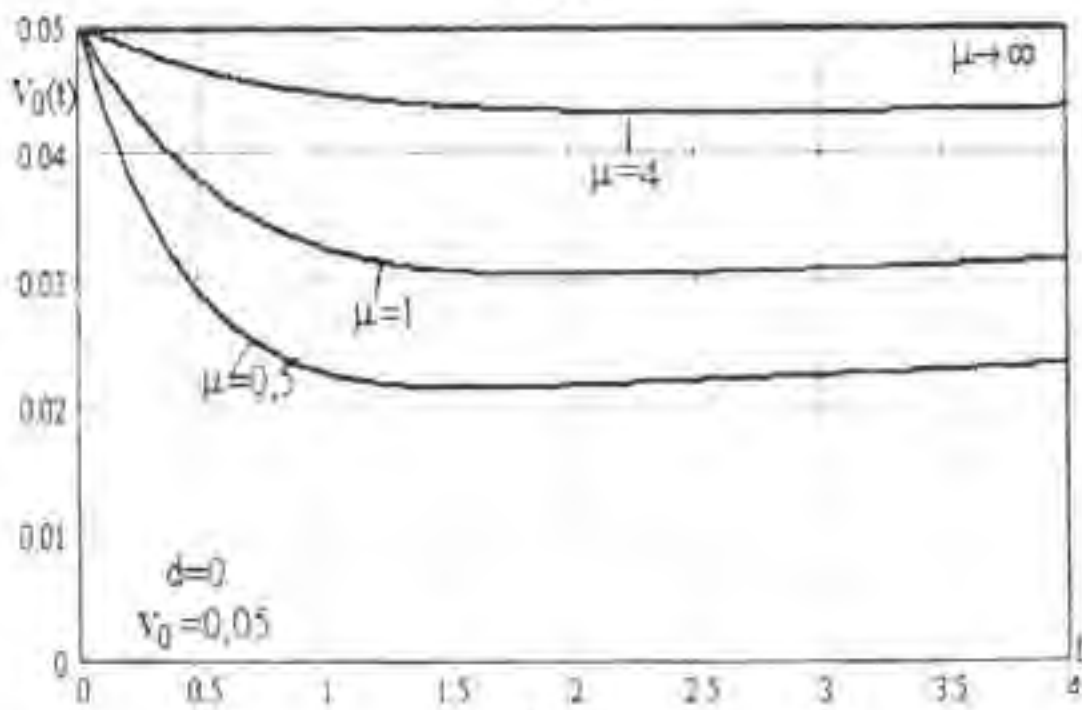


Рис.6

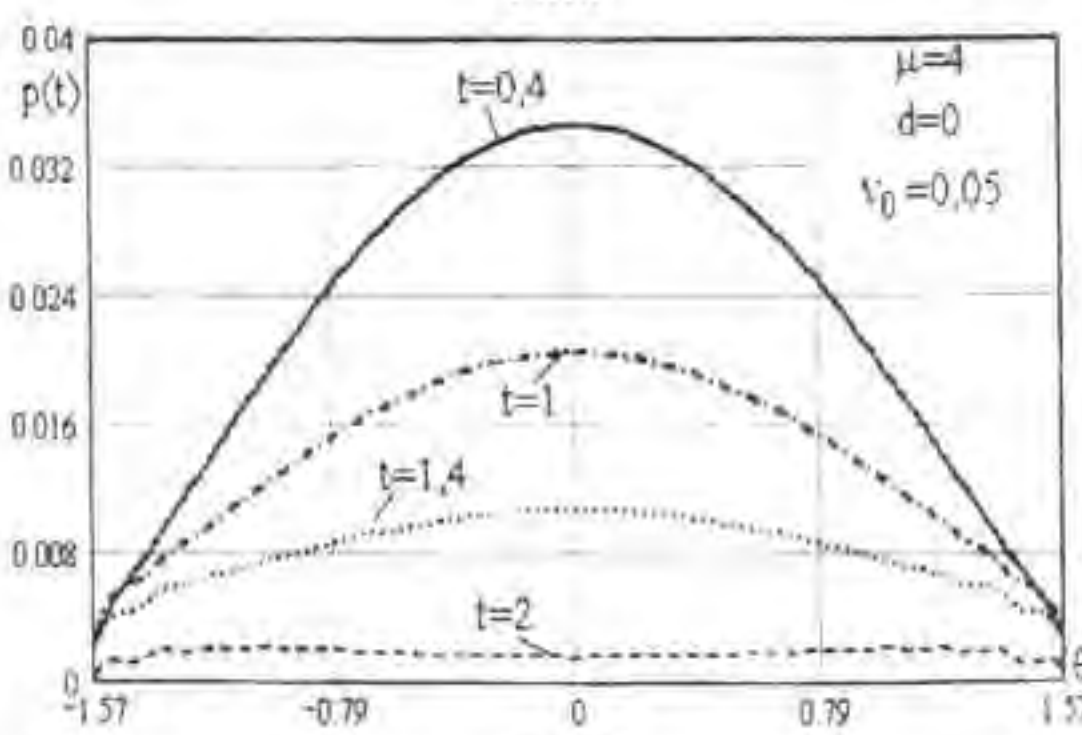


Рис.7

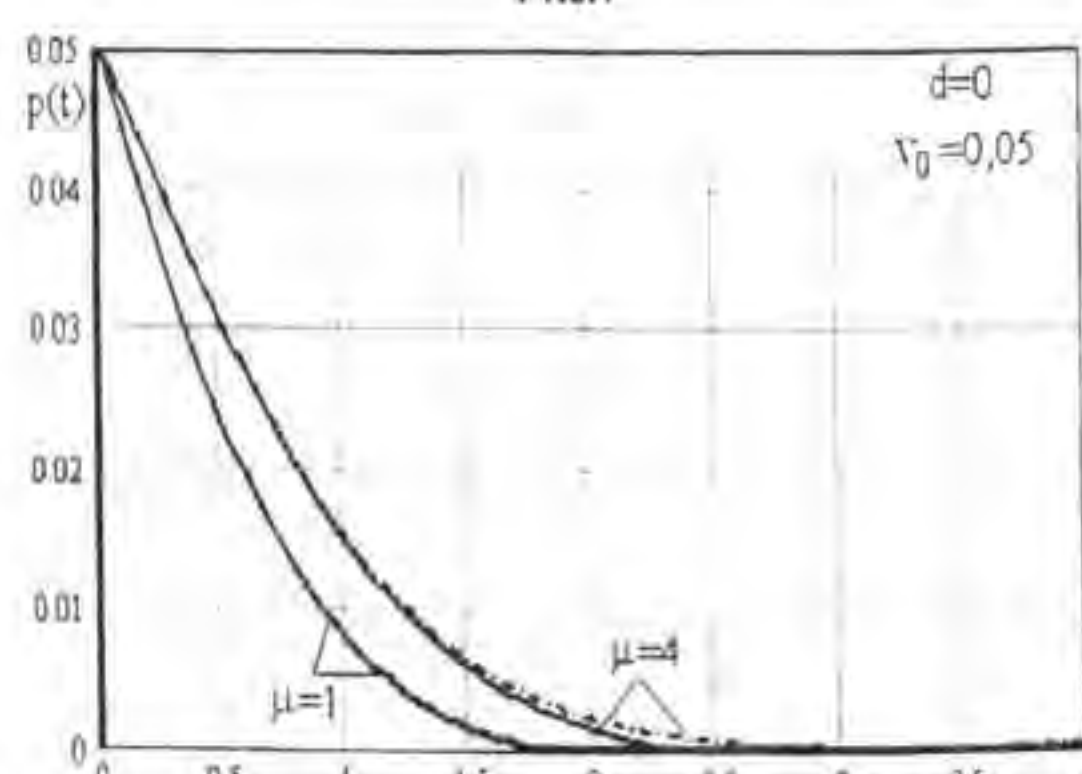


Рис.8

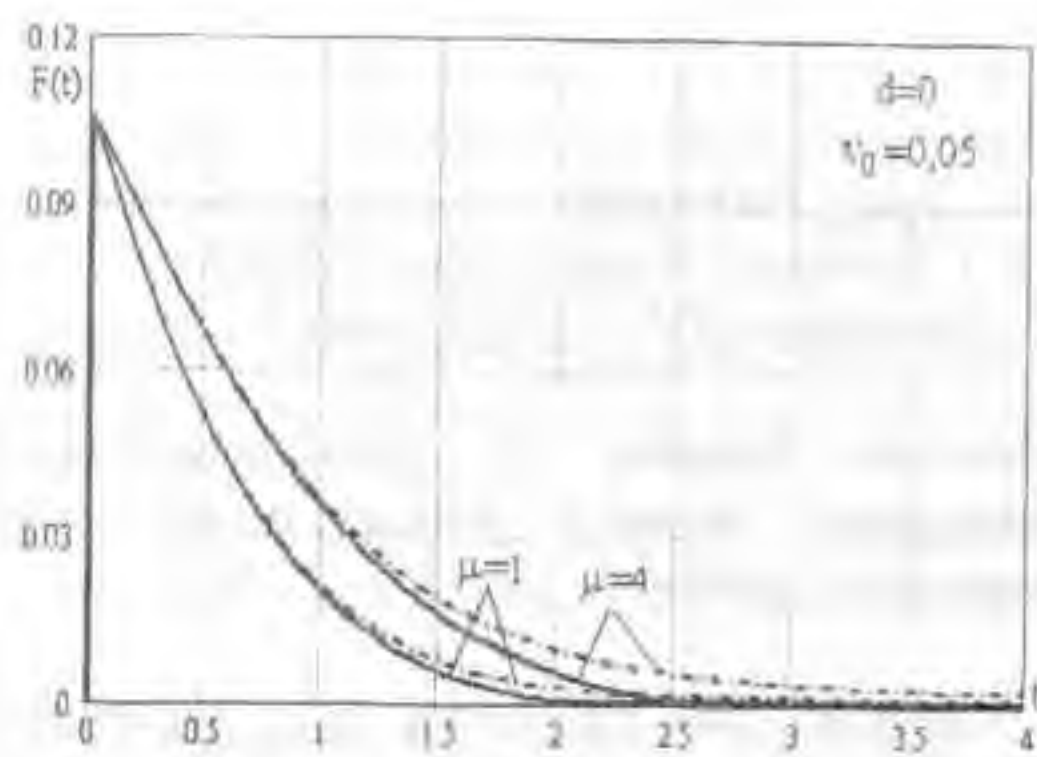


Рис.9

Висновки. У роботі одержано розв'язок осесиметричної задачі занурення твердого сферичного тіла в ідеальну стисливу рідину через поверхню сферичної порожнини за нульового зазору в двох постановках, що відрізняються між собою граничними умовами на вільній поверхні каверни. Обчислено гідродинамічні та кінематичні характеристики досліджуваного процесу. Проведено оцінку ступеня впливу на шукані характеристики різних граничних умов на вільній поверхні каверни.

Список використаних джерел

1. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. – М.: Наука, 1979. – 832 с.
2. Баженов В.Г., Кочетков А.В., Крылов С.В. Анализ нелинейных эффектов при проникании тел в сжимаемую жидкость. – Прикладная механика, 1986, 22, № 2. – С.125-127.
3. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции: Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены. – М.: Наука, 1966. – 296 с.
4. Буйвол В.Н. Тонкие каверны в течениях с возмущениями. – Киев: Наук. думка, 1980. – 294 с.
5. Васин А.Д., Парышев Э.В. Погружение цилиндра в жидкость через цилиндрическую свободную поверхность. – М.: Механика жидкости и газа, 2001. – № 2. – С.3-12.
6. Коробейник Ю.Ф. О сходимости метода редукции при решении счетных систем линейных интегральных уравнений // Уч. зап. Рост. н./Д. ун-та. – 1956. – Т. 43, № 6. – С.21-57.
7. Кубенко В.Д. Нестационарное взаимодействие элементов конструкций со средой. – Киев: Наук. думка, 1979. – 184 с.
8. Кубенко В.Д. Нестационарные поперечные движения тонкого длинного тела при суперкавитационном обтекании // Докл. НАНУ, № 6, 2003. – С. 41-47.
9. Кубенко В.Д. Плоская задача соударения тонкого длинного тела с поверхностью цилиндрической полости в жидкости // Прикладная механика. – 2006, № 6. – С. 32-53.
10. Кубенко В.Д. Нестационарные поперечные движения короткого тупого тела при суперкавитационном обтекании // Докл. НАНУ, № 7, 2003. – С. 46-53.
11. Кубенко В.Д. Нестационарные процессы в слое идеальной жидкости при ударе твердым тупым телом // Прикладная механика, – 2007, № 3.
12. Ланцош К. Практические методы прикладного анализа. – М: Физматгиз, 1961. – 542 с.
13. Логвинович Г.В. Гидродинамика течений со свободными границами. – Киев: Наук. думка, 1969. – 215 с.
14. Логвинович Г.В. Некоторые вопросы глиссирования // Тр. ЦАГИ, 1980. – Вып. 2052. – С.3-12.
15. Морс Ф., Фешбах Г. Методы теоретической физики. В 2-х т. – Т.1. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1958. – 960 с.
16. Савченко Ю.Н., Власенко Ю.Д., Семененко В.Н. Экспериментальные исследования высокоскоростных кавитационных течений // Гидромеханика. – 1998. – Вып. 72. – С.103-111.
17. Савченко Ю.Н., Семененко В.Н., Путилин С.И. Нестационарные процессы при суперкавитационном движении тел // Прикладна гідромеханіка. – 1999, № 1. – С.78-97.
18. Савченко Ю.Н., Семененко В.Н., Серебряков В.В. Экспериментальное исследование развитых кавитационных течений при дозвуковых скоростях обтекания // Докл. НАНУ. – 1993, № 2. – С.64-69.

Надійшла до редколегії 25.04.07

УДК 539.376

Олена В. Доля, аспірант,
Ольга П. Червінко, к.ф.-м.н.,
Ігор К. Сенченков, д.ф.-м.н.

Вібророзігрів шаруватої пружно-в'язко-пружної прямокутної призми при високо-частотному силовому навантаженні

Вивчено коливання і вібророзігрів прямокутної шаруватої метало-полімерної призми, яка збуджується нормальним силовим навантаженням на частині поверхні. Досліджено вплив інерційних ефектів армуючих шарів на швидкість зміни і просторовий розподіл температури вібророзігріву. Встановлено, що введення металевих шарів в полімерну матрицю призводить до зміни зсувного механізму дисипації на об'ємний. Вивчена кінетика потоку енергії через поверхню навантаження.

Ключові слова: в'язкопружний матеріал, вібророзігрів, шарувата призма.

E-mail: term@inmech.kiev.ua

1. Вступ

Дослідження коливань і вібророзігріву в'язкопружних тіл має важливе теоретичне і практичне значення для оцінки втомної міцності полімерних матеріалів [2, 5], а також при розробці технологій обробки полімерів, зокрема ультразвукового зварювання пластмас і композитів на їх основі [3]. Основні результати в цьому напрямі були отримані для однорідних в'язкопружних тіл. В роботах [6, 7] досліджено деякі закономірності термомеханічного стану тіл з концентраторами напружень типу циліндричних включень та надрізів. На сьогодні в техніці та технології широко використовуються шаруваті композити на основі в'язкопружних матеріалів, вироби з яких піддаються інтенсивному циклічному навантаженню. Такі структури вивчались роботі [11] в квазістатичній постановці на прикладі шаруватого диску при ізотермічному циклічному стисканні.

В цій роботі на основі зв'язаної теорії термов'язкопружності [5] досліджено коливання і вібророзігрів прямокутної призми, яка складається з полімерних (поліетилен) і металевих (мідь) шарів. Призма збуджується високочастотним нормальним силовим навантаженням, яке прикладається до частини її поверхні. Для поліетилену враховується

H. V. Dolya, PhD student,
O. P. Chervinko, Cand.Sci. (Phys.-Math.),
I. K. Senchenkov, D.Sci. (Phys.-Math.).

Vibration heating of elastic-viscoelastic rectangular layered prism under high frequency loading

Vibrations and self-heating of a rectangular layered metallic – polymeric prism under normal loading on the part of surface are studied by means of numerical simulation. An influence of inertia effect as well as arming lays on the rate and spatial temperature distribution are investigated. A kinetic of energy flux is considered. A sharp temperature growth in the range of polymer melting is established.

Key Words: viscoelastic material, vibration heating, layered prism.

залежність фізико-механічних властивостей від температури.

2. Постановка задачі

Вводиться прямокутна декартова система координат xOy і розглядається плоский деформований стан та вібророзігрів призми прямокутного перерізу $|x| \leq c$, $0 \leq y \leq h$, яка складається з шарів поліетилену і міді. Половина перерізу призми показана на рис. 1.

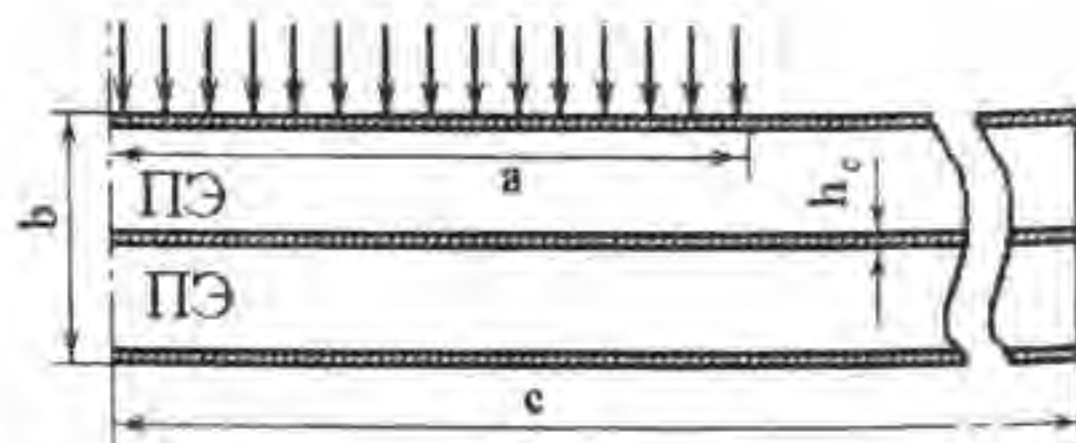


Рис. 1. Половина перерізу призми

Призма оперта на гладку жорстку опору. На частині верхньої грані $y = h$, $|x| \leq a$ діє нормальне осцилююче навантаження з амплітудою σ_a і частотою ω . На поверхні опираюння і контакту підтримується постійна температура θ_c . Залишок поверхні вільний від навантаження і знаходиться в умовах

конвективного теплообміну із оточуючим середовищем температури θ_c . На внутрішніх границях приймаються умови ідеального теплового і механічного контакту.

Постановка задачі термов'язкопружності при гармонічному навантаженні включає рівняння коливань і теплопровідності

$$\tilde{\sigma}_{ij,i} + \rho \omega^2 \tilde{u}_i = 0, \quad c_V \dot{\theta} = (k \theta_{,i})_{,i} + \beta \bar{D}', \quad i, j = x, y;$$

визначаючи рівняння для амплітуд напружень і усередненої швидкості дисипації

$$\tilde{s}_{ij} = 2\tilde{G}\tilde{\varepsilon}_{ij}, \quad \tilde{\sigma}_{kk} = 3\tilde{K}\tilde{\varepsilon}_{kk}, \quad \bar{D}' = \frac{\omega}{2} \text{Im}(\tilde{\sigma}_{ij}\tilde{\varepsilon}_{ij}^*);$$

граничні умови

$$\tilde{u}_y = 0, \quad \tilde{\sigma}_{xy} = 0, \quad \theta = \theta_c \quad |x| \leq c, \quad y = 0,$$

$$\tilde{u}_x = \sigma_{ij}, \quad \tilde{\sigma}_{xy} = 0, \quad \theta = \theta_c \quad |x| \leq a, \quad y = b,$$

$$\tilde{\sigma}_{xx} = 0, \quad \tilde{\sigma}_{xy} = 0, \quad -k\theta_{,y} = \gamma(\theta - \theta_c), \quad y = b,$$

$$\tilde{\sigma}_{xx} = 0, \quad \tilde{\sigma}_{xy} = 0, \quad -k\theta_{,x} = \gamma(\theta - \theta_c) \quad |x| = c,$$

$$0 < y < b,$$

а також початкові умови для температури

$$\theta = \theta_0 \quad \text{при } t = 0.$$

Вище прийняті такі позначення: $\tilde{\sigma}_{ij}$ і $\tilde{\varepsilon}_{ij}$ – тензори комплексних амплітуд напружень і деформацій, $\tilde{\sigma}_{ij} = \sigma'_{ij} + i\sigma''_{ij}$, $\tilde{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon'_{ij} + i\varepsilon''_{ij}$; $\tilde{s}_{ij}$ і $\tilde{e}_{ij}$ – девіатори тензорів $\tilde{\sigma}_{ij}$ і $\tilde{\varepsilon}_{ij}$; $\tilde{u}_i$ – вектор амплітуди переміщень; θ – температура; θ_0 – початкова температура; k і c_V – коефіцієнти теплопровідності і об'ємної теплоємності; ρ – густина; $\tilde{G}$ і $\tilde{K}$ – комплексні модулі зсуву та об'ємного стискування, $\tilde{G} = G' + iG''$, $\tilde{K} = K' + iK''$; ω – кутова частота навантаження; $\bar{D}'$ – середня за період об'ємна швидкість дисипації; $\tilde{\varepsilon}_{ij}^*$ – величина, комплексно спряжена $\tilde{\varepsilon}_{ij}$, $\tilde{\varepsilon}_{ij}^* = \varepsilon'_{ij} - i\varepsilon''_{ij}$; β – доля дисипованої енергії, яка переходить в тепло; $\dot{\theta} = \partial\theta/\partial t$, $\theta_{,x} = \partial\theta/\partial x$; γ – коефіцієнт тепловіддачі.

Нижче буде використано розклад швидкості дисипації на зсувну D'_s та об'ємну D'_v складові

$$\bar{D}' = D'_s + D'_v,$$

$$D'_s = \omega G''(e'_{ij}e'_{ij} + e''_{ij}e''_{ij}), \quad D'_v = \frac{1}{2} \omega K''(\varepsilon'^2_{kk} + \varepsilon''^2_{kk}),$$

Геометрія призми, умови навантаження і теплообміну характеризуються параметрами

$$c = 3 \cdot 10^{-2} \text{ м}, \quad b = 2.2 \cdot 10^{-3} \text{ м}, \quad h_c = 10^{-4} \text{ м},$$

$$a = 10^{-2} \text{ м}, \quad \theta_0 = \theta_c = 20^\circ \text{ C}, \quad f = \omega/2\pi = 20 \text{ кГц},$$

$$\gamma = 10 \text{ Вт/м}^2 \cdot ^\circ \text{ C}, \quad \beta = 0,80.$$

Крайова задача коливань і теплопровідності розв'язується методом скінченних елементів в рамках підходу, розвинутого в роботі [1]. Використовується восьмивузловий ізопараметричний чотирьохкутовий елемент з квадратичною апроксимацією переміщень і температури. Рівняння теплопровідності інтегрується за часом з використанням явної схеми.

3. Властивості матеріалів

В розрахунках використовуються температурні залежності фізико-механічних властивостей поліетилену, які взяті з робіт [4,10]. Розрахунок об'ємних втрат проведено з використанням рівності $K''/K' = \chi G''/G'$, яке встановлено експериментально для ізотермічного випадку в роботі [11] для деяких полімерів, зокрема поліетилену; при цьому $\chi = 0,32$. Для фізико-механічних характеристик міді приймається

$$k_M = 400 \text{ Вт/м} \cdot ^\circ \text{ C}, \quad c_{VM} = 3,47 \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3 \cdot ^\circ \text{ C},$$

$$\rho_M = 8,96 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3, \quad G_M = 4,5 \cdot 10^4 \text{ МПа},$$

$$\nu_M = 0,33.$$

4. Результати розрахунків

Визначення впливу армуючих шарів на температурне поле вібророзігріву проводиться шляхом зіставлення розв'язків трьох задач.

В задачі 1 (модельній) розглядається однорідна призма, яка складається з поліетилену. В задачі 2 призма має два шари міді товщиною h_c , розташовані на верхній і нижній поверхнях $y = 0$, $y = b$. В задачі 3 крім зовнішніх шарів (задача 2) присутній третій шар товщиною h_c , розташований в серединному перерізі призми

$y = b/2$. В усіх трьох задачах загальна товщина призми однакова і дорівнює b . Таким чином, введення мідних шарів зменшує товщину поліетилєнових прошарків. На рис.2 для $\sigma_0 = 15$ МПа показані часові залежності температури. Суцільні криві 1 і 2, розраховані в рамках задач 1 і 2, відповідають максимальній в перерізі $x = 0, 0 < y < b$ температурі. Крива 3 відповідає задачі 3 і показує максимальну температуру в перерізі $x = 0, h_c < y < (b - h_c)/2$ нижнього шару полімеру. Температура в верхньому ПЕ шарі не відрізняється від наведеної більш ніж на 5%. Птриховими лініями показані результати розрахунків в рамках квазістатичної постановки задачі ($\rho = 0$).

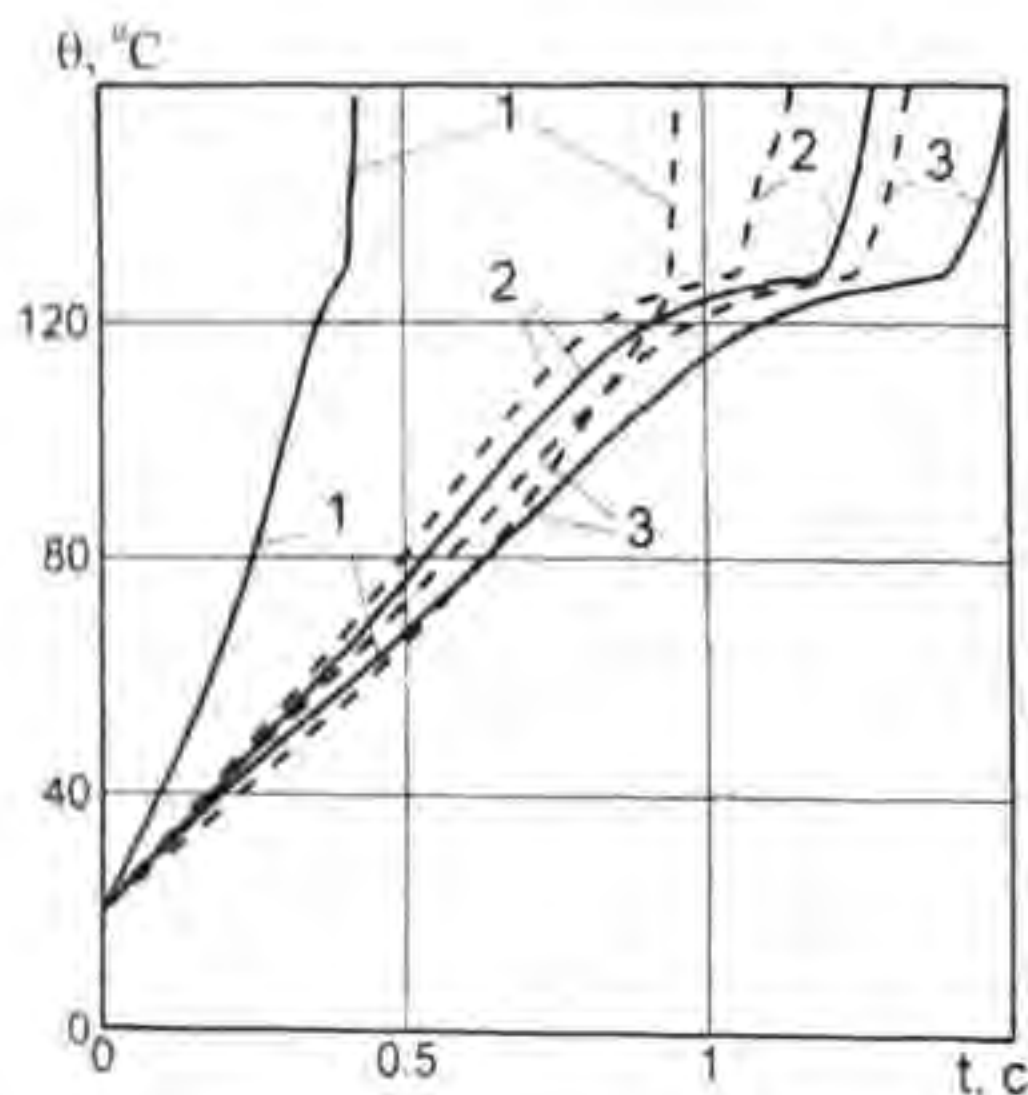


Рис. 2. Часові залежності температури

Вплив динамічності особливо помітний в однорідній призмі. В динамічній постановці розрахунок прогнозує більш швидкий розігрів порівняно з квазістатичною постановкою. Для призми, армованої металевими шарами, ефект динамічності слабший. При його врахуванні швидкість розігріву менша.

На рис. 3а і рис. 3б показано розподіл вздовж осі $0x$ амплітуд переміщень u_x і u_y на площадці навантаження $|x| < a, y = b$ в однорідній призмі (задача 1). Числами вказані значення часу.

Аналогічні результати для п'ятишарової призми (задача 3) наведені на рис. 4а і рис. 4б. Видно, що переміщення u_y змінюється несуттєво. При цьому значення u_y в п'ятишаровій призмі внаслідок об'ємного

характеру опору стисканню майже в два рази менші, ніж в однорідній. При $x > a$ значення u_x практично дорівнюють нулю. В цій області суттєві тільки переміщення u_y . Внаслідок армування його значення в п'ятишаровій призмі на порядок нижчі ніж в однорідній. Слабка змінність по координаті x вказує на зміщення частин призми $|x| > a$ як жорсткого цілого.

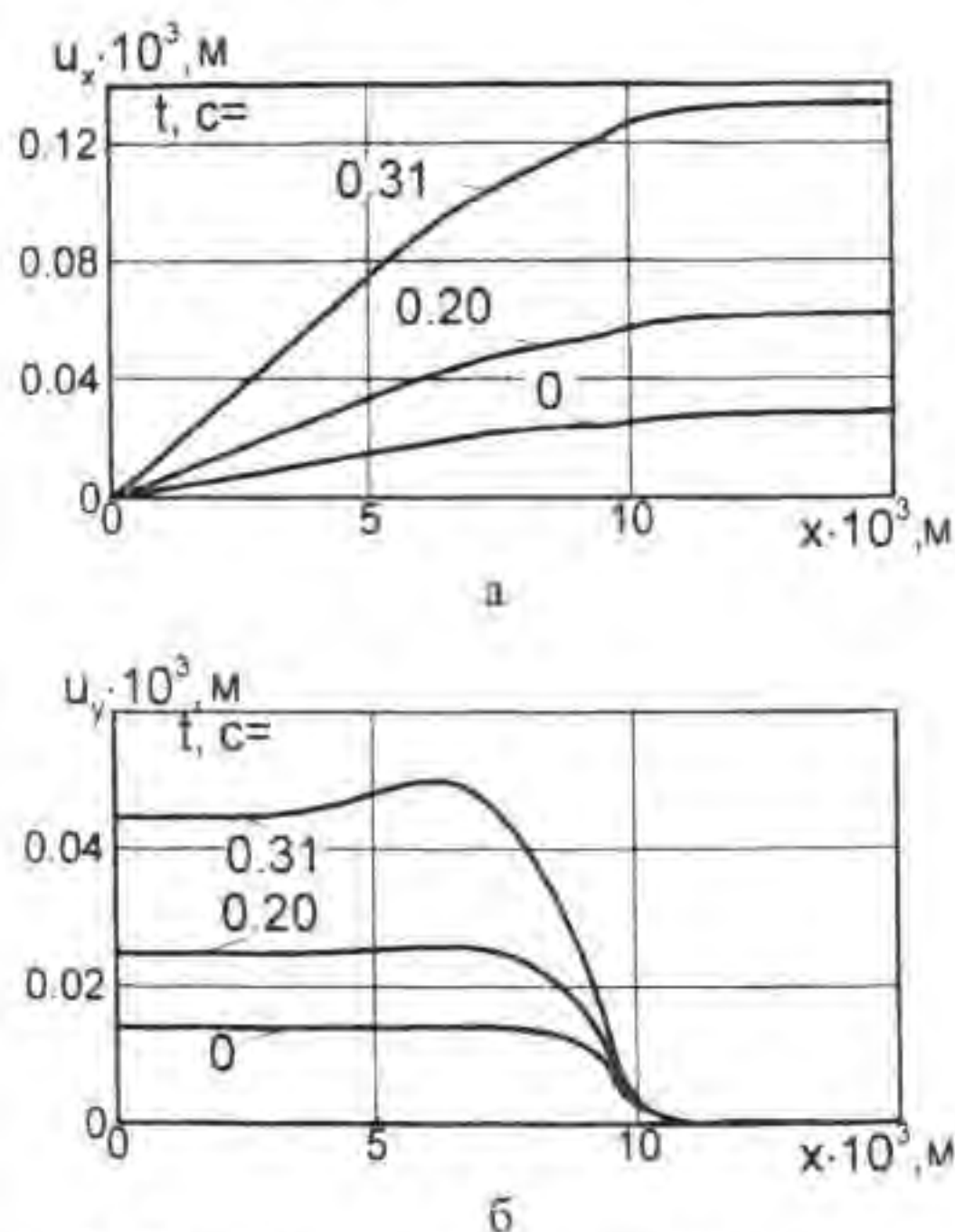


Рис. 3. Розподіл амплітуд переміщень $u_x(x, b)$ і $u_y(x, b)$ в однорідній призмі (задача 1)

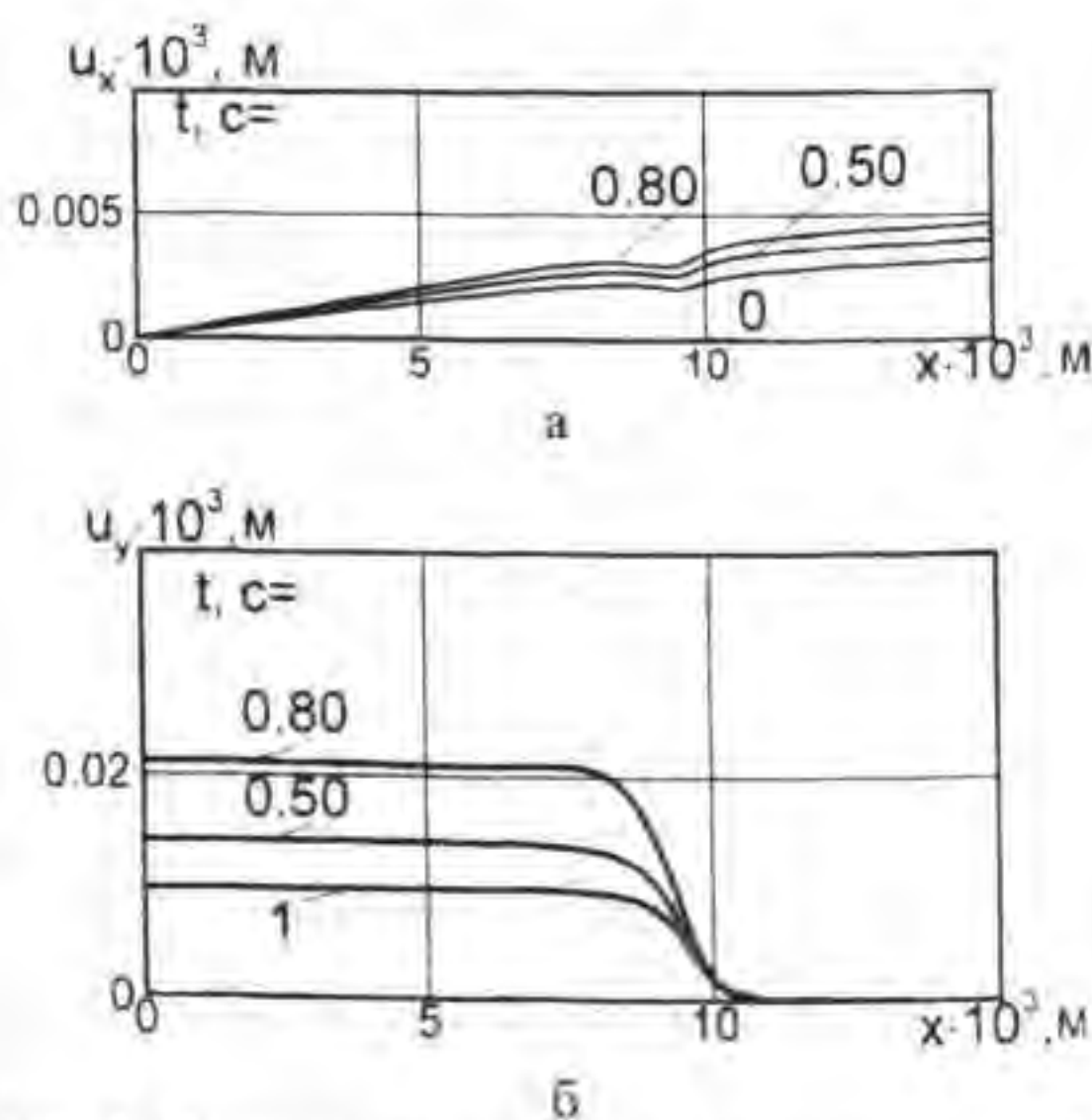


Рис. 4. Розподіл амплітуд переміщень $u_x(x, b)$ і $u_y(x, b)$ в призмі з трьома армуючими шарами (задача 3)

Вплив внутрішнього армуючого шару на розподіл температури можна оцінити шляхом зіставлення ізоліній в момент часу $t = 0,96$ с для задач 2 і 3, наведених на рис. 5а і рис. 5б.

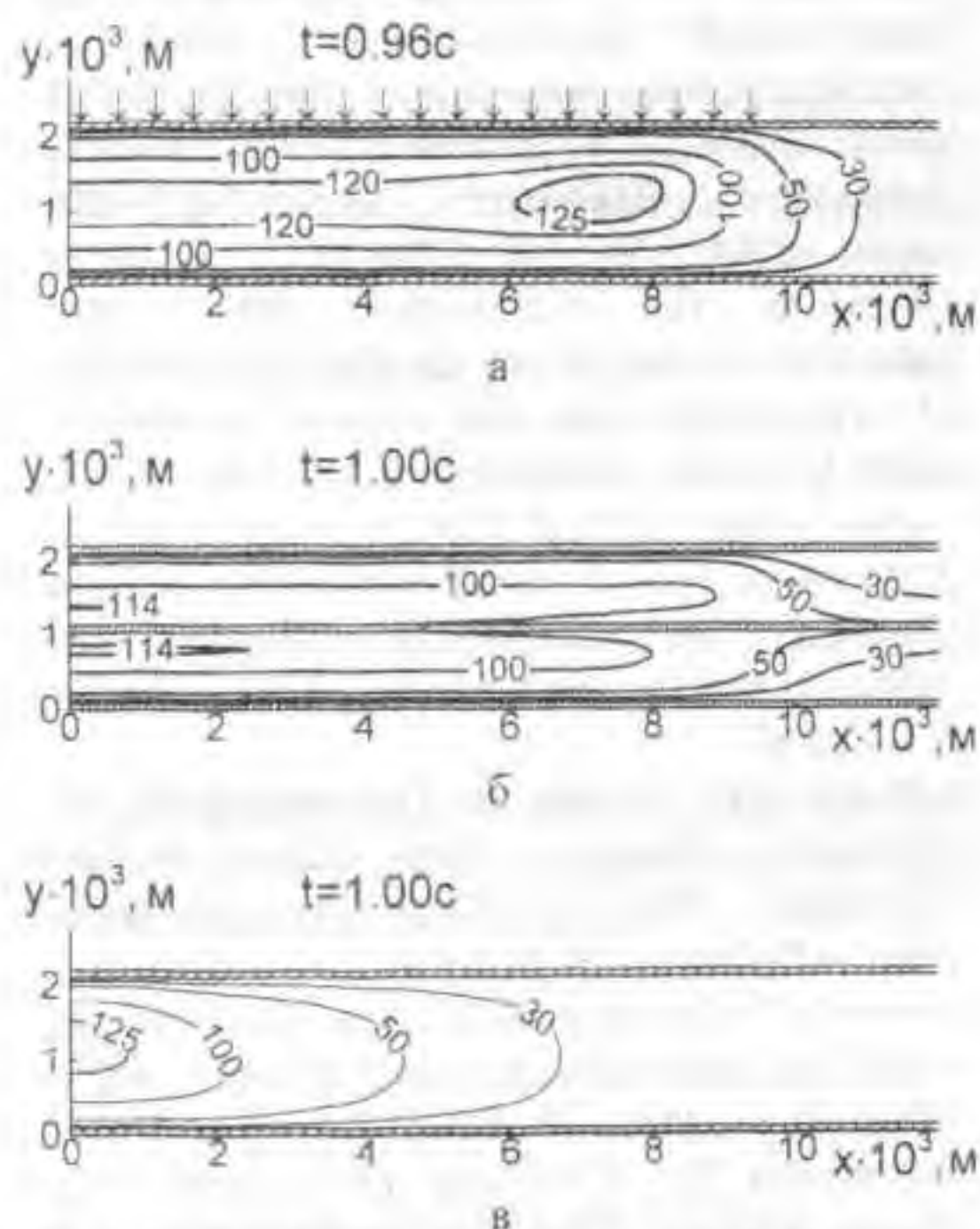


Рис. 5. Розподіл температури (задачі 2 і 3)

Для задачі 2 притаманне формування локалізованої зони розігріву з центром $x \approx b/2$, $y \approx 0,75a$. При наявності серединного шару метала в кожному з ПЕ шарів мають місце близькі розподіли. Максимальні температури досягаються в середині шарів. Затягування ізоліній до центру призми ($x = 0$) пов'язане з поглинанням тепла внутрішнім шаром металу, а вигляд ізоліній в області $x > a$ пояснюється відводом тепла із області навантаження в зовнішню частину призми. Формування локалізованих областей розігріву на рис. 5а, зсунутих до краю області навантаження, або навіть розташованих поза цією зоною ($x > a$), пояснюється ефектом динамічності. Такий висновок витікає з порівняння розподілів на рис. 5а і рис. 5б. На останньому рисунку наведені результати розрахунків для відповідної квазістатичної задачі. Для неї характерний максимальний розігрів в центрі призми.

При силовому навантаженні усереднений за період коливань потік енергії $\bar{P}_y$ через площадку навантаження.

$$\begin{aligned} \bar{P}_y &= \frac{2}{T} \int_0^T \int_0^a P_y dx dt = -\frac{i\omega}{2} \int_0^a (\bar{\sigma}_{yy} \bar{u}_y^* - \bar{\sigma}_{yy}^* \bar{u}_y) dx \\ &= \omega \sigma_0 \int_0^a u_y''(x, b) dx \end{aligned}$$

зростає (рис.6), причому при наближенні до температури плавлення швидкість $\dot{\bar{P}}_y$ різко збільшується.

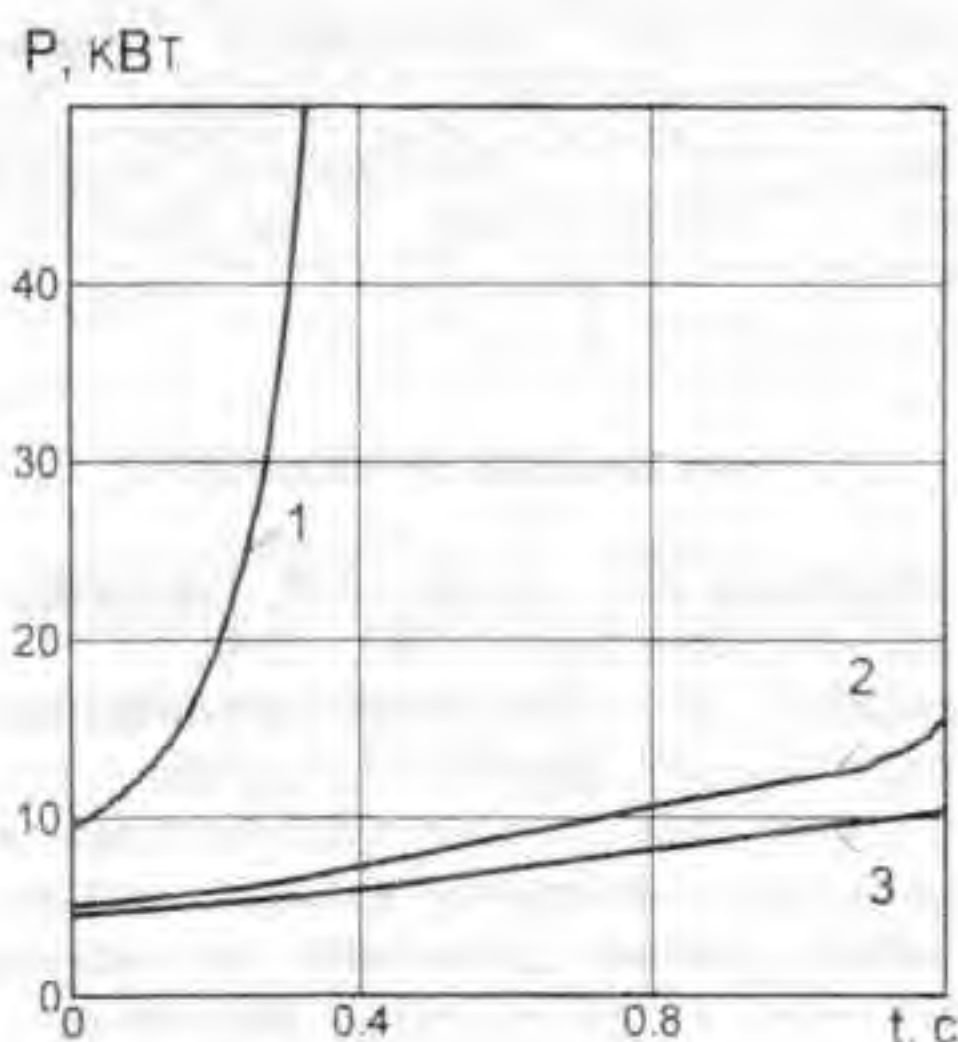


Рис. 6. Часові залежності потоку енергії

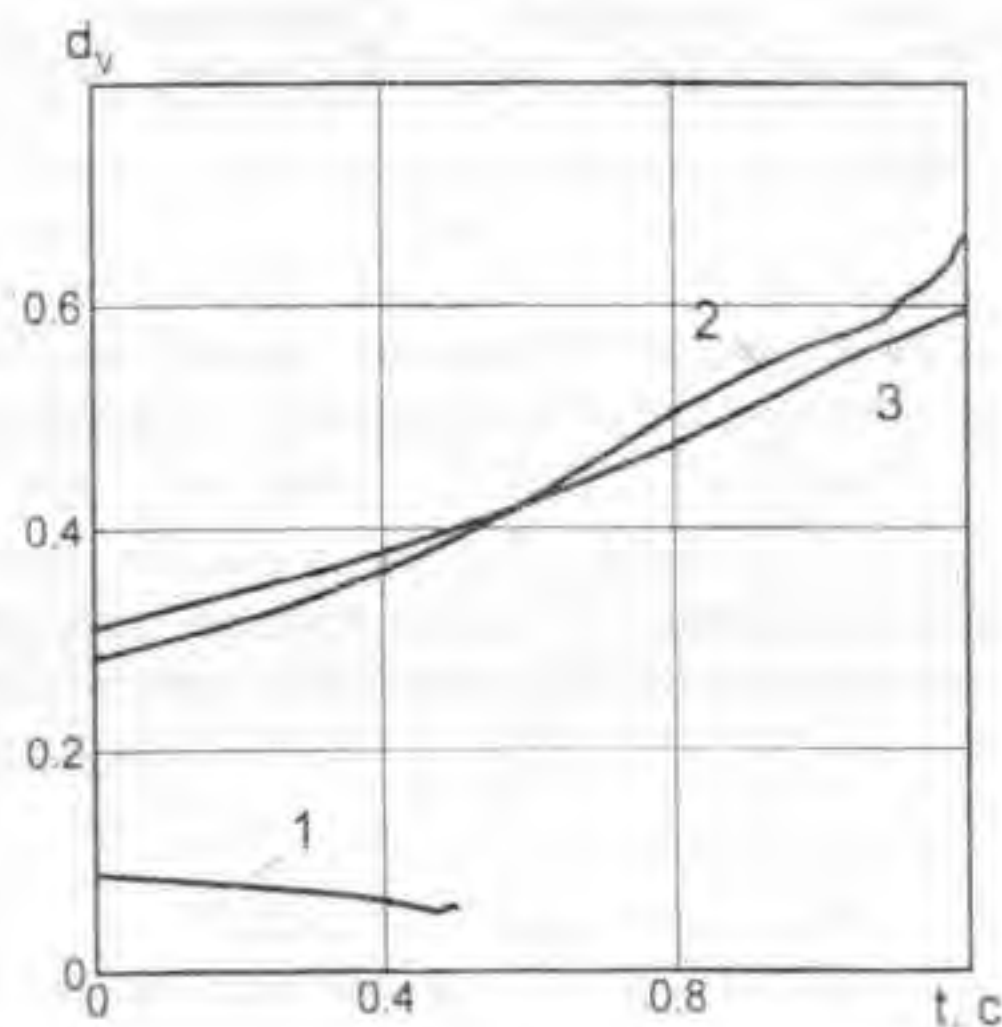


Рис. 7. Часові залежності параметра d_v

Дані, наведені на рис.7, прояснюють механізм дисипації. Тут наведено часову залежність параметру d_v , $d_v = \int_V D_v' dv / \int_V \bar{D}' dv$, який

визначає долю об'ємної швидкості дисипації у загальній. В однорідній призмі (крива 1) переважає доля зсувної дисипації $d_s = 1 - d_v$, яка зростає з розігрівом. Для армованих призм в процесі розігріву відбувається зміна механізму дисипації, при якій при підході до температури плавлення $\theta_{lq} = 125^\circ\text{C}$ об'ємна складова стає переважаючою. Очевидно, в цій області температур швидкість розігріву визначається об'ємним модулем втрат.

Визначення цих характеристик складас складну експериментальну проблему [9], розв'язання якої є визначальною умовою успішного моделювання вібророзігріву тонкошарових в'язкопружних елементів конструкцій та об'єктів технологій.

Список використаних джерел

1. Мотовилов І.А., Козлов В.И. Термоупругость. – К.: Наук. думка, 1987. – 264с.
2. Нарисава И. Прочность полимерных материалов. – М.: Химия, 1987. – 400с.
3. Нестеренко Н.П., Сенченков И.К. Состояние и перспективы совершенствования ультразвуковой сварки полимеров и термопластичных композиционных материалов // Сварочное производство – 2002. – №10. – С. 19-26.
4. Теплофизические и реологические характеристики полимеров. Справочник. / Ю.С.Липатов, ред. – Киев: Наук. думка, 1977. – 244 с.
5. Термомеханика эластомерных элементов конструкций при циклическом нагружении / Потураев В.Н., Дырда В.И., Карнаухов В.Г. и др., / Потураев В.Н., ред. – К.: Наук. думка, 1987. – 288с.
6. Якименко Н.Н. Тепловая неустойчивость вязкоупругой прямоугольной призмы с цилиндрическим включением при сдвиговом циклическом нагружении // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2004. – №2. – С. 171-175.
7. Chervinko O.P. Calculation the critical parameters characterizing the thermal instability of a viscoelastic prism with a stress concentrator under harmonic compression // Int. Appl. Mech. – 2004. – 40, No 8. – P. 916-922.
8. Karnaukhov V.G. Thermal failure of polymeric structural elements under monoharmonic deformation // Int. Appl. Mech. – 2004. – 40, No 6. – P. 3-43.
9. Lifschitz J.M., Kolsky H. The propagation of spherically divergent stress pulses in the viscoelastic solids // J. Mech. Phys. Solids. – 1965. – 13, No 6. – P. 361-376.
10. Penn R.W. Dynamic mechanical properties of crystalline linear polyethylene // J. Polym. Sci. – 1966. – No 4, Pt. 2. – P. 545-557.
11. Senchenkov I.K., Chervinko O.P., Kozlov V.I. Energy analysis of the stress – strain state of a viscoelastic disk with rigidly fixed ends under cyclic compression // Int. Appl. Mech. – 1994. – 30, No 10. – P.791-796.

Надійшла до редакції 10.04.2007

УДК 519.6

Олексій Ф. Калайда, к.ф.-м.н., доцент

Симетричні двосторонні локальні та нелокальні кубічні сплайни

Побудовано двосторонні симетричні локальні та нелокальні кубічні сплайни.

Ключові слова: двосторонні, симетричні, сплайни.

E-mail: akalayda@i.com.ua

Симетричними збуреннями лінійної та нелінійної складових локальних (ермітових) та нелокальних кубічних сплайнів побудовано два варіанти двосторонніх симетричних кубічних локальних та нелокальних сплайнів.

1. Про двосторонні локальні сплайни. Перш за все зауважимо, що локальний (ермітовий) кубічний сплайн [1] ($h_i = x_{i+1} - x_i$)

$$\begin{aligned} S_{3,2,i}(x) = & f_i + (x - x_i) f'_i + \\ & + (x - x_i)^2 A_i + (x - x_i)^3 B_i, \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \\ A_i = & (3(f_{i+1} - f_i) / h_i - 2f'_i - f'_{i+1}) / h_i = \\ = & f''_i / 2 - h_i^2 f'''_i / 24 - h_i^3 f'''_i / 60 + \dots, \\ B_i = & (f'_i + f'_{i+1} - 2(f_{i+1} - f_i) / h_i) / h_i^2 = \\ = & f''_i / 6 + h_i f'''_i / 12 + h_i^2 f'''_i / 40 + \dots \end{aligned} \quad (1)$$

а отже,

$$\begin{aligned} S_{3,2,i}(x) = & f_i + (x - x_i) f'_i (x - x_i) + \\ & + (x - x_i)^2 f''_i / 2! + (x - x_i)^3 f'''_i / 3! + r_i(x), \\ r_i(x) = & h_i (x - x_i)^2 ((2(x - x_i) - h_i) f'''_i / 4! + \\ & + h_i (3(x - x_i) - 2h_i) f'''_i / 5! + \dots), \end{aligned}$$

задовольняє рівності

$$S_{3,2,i}^*(x_i) = f_i - h_i^2 f'''_i / 12 - h_i^3 f'''_i / 30 + O(h_i^4),$$

$$S_{3,2,i-1}^*(x_i) = f_i - h_{i-1}^2 f'''_i / 12 - h_{i-1}^3 f'''_i / 20 + O(h_{i-1}^4),$$

А тому стрибок другої похідної сплайна у точці x_i є величина $O(h^2)$, $h = \max(h_{i-1}, h_i)$, а при $h_{i-1} = h_i = h$ - величина $O(h^3)$, тобто ермітовий сплайн наближено має властивості нелокального сплайна. Якщо, далі, записати кубічний сплайн у вигляді (суми лінійного сплайна та додаткового члена)

$$\begin{aligned} S_{3,2,i}(x) = & f_i + \Delta f_i t + t(1-t)((2t-1)\Delta f_i + \\ & + h_i(f'_i - (f'_i + f'_{i+1})t)), \\ t = & (x - x_i) / h_i, \Delta f_i = f_{i+1} - f_i, \end{aligned}$$

O.F. Kalaida, Cand. (Phys.-Math.), Associate Professor

Symmetric two-sided local and unlocal cube splines

The two-sided symmetric local are built and unlocal cube splines.

Key Words: two-sided, symmetric, splines.

то легко побудувати симетричні двосторонні кубічні ермітові сплайни. Для цього, у першому варіанті, достатньо здійснити збурення лінійної його складової частини. В результаті згадані двосторонні сплайни матимуть вигляд (ε - параметр двосторонності, може бути різним для кожного елементарного відрізка)

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{3,2,i}(x) = & f_i + (1 \mp \varepsilon) \Delta f_i t + \\ & + t(1-t)((2t-1)\Delta f_i + h_i(f'_i - (f'_i + f'_{i+1})t)) \end{aligned} \quad (2)$$

(вилка двосторонності $O(\varepsilon(x - x_i) f''(x))$, лінійна частина цієї рівності є лінійні двосторонні сплайни). Крім того, у другому варіанті, можна побудувати двосторонні сплайни збуренням додаткового члена. В результаті матимемо сплайни

$$\begin{aligned} \tilde{\tilde{S}}_{3,2,i}(x) = & f_i + \Delta f_i t + \\ & + (1 \mp \varepsilon) t(1-t)((2t-1)\Delta f_i + h_i(f'_i + (f'_i + f'_{i+1})t)) \end{aligned} \quad (3)$$

($O(\varepsilon(x - x_i)(x - x_{i+1}) f''(x) / 2)$ - вилка двосторонності). На основі цих двосторонніх сплайнів можна побудувати двосторонні сплайни того ж порядку точності без використання значень похідної у вузлах (кубічні локальні сплайни з простими вузлами). Для цього досить наближено замінити згадані значення похідної, відповідно, формулами чисельного диференціювання з похибкою не нижче $O(h_i^3)$. Так, наприклад, у випадку сталого кроку сітки вузлів при обчисленні значень похідної в (2), (3) чотирьохточковими формулами чисельного диференціювання (похибка $O(h_i^3)$)

$$\begin{aligned} f'_i \approx & (-2f_{i-1} - 3f_i + 6f_{i+1} - f_{i+2}) / 6h_i, f'_{i+1} \approx \\ \approx & (f_{i-1} - 6f_i + 3f_{i+1} + 2f_{i+2}) / 6h_i \end{aligned}$$

дістанемо двосторонні локальні кубічні сплайни з простими вузлами. Якщо ж значення похідної наближено обчислювати за шеститочковими формулами чисельного диференціювання

$$\begin{aligned} f'_i \approx & (3f_{i-2} - 30f_{i-1} - \\ & - 20f_i + 60f_{i+1} - 15f_{i+2} + 2f_{i+3}) / 60h_i, \end{aligned}$$

$$f'_{i+1} \approx (-2f_{i-2} + 15f_{i-1} - 60f_i + 20f_{i+1} + 30f_{i+2} - 3f_{i+3})/60h_i$$

(похибка $O(h_i^5)$), то дістанемо симетричні двосторонні локальні кубічні сплайни з простими вузлами напевне того ж порядку точності, що й ермітові кубічні сплайни. Порівняно з нелокальними сплайнами ці сплайни значно простіші в застосуванні. Результати чисельних експериментів за цими сплайнами (ермітовим та з простими вузлами) наведено в таблицях 1 - 3. В колонках таблиць подано, відповідно, значення незалежної змінної, похибки двосторонніх наближень, їх середнє арифметичне та напіврізниця (напіввилка абсолютної похибки).

Таблиця 1.

(крок $h = 0.01$, функція $x \mapsto \sin(x)$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.0000001$)

0.005	4.999E-10	-5.001E-10	-1.302E-13	-5.00E-10
0.015	4.996E-10	-5.003E-10	-3.906E-13	-5.00E-10
0.025	4.992E-10	-5.005E-10	-6.510E-13	-5.00E-10
0.035	4.988E-10	-5.006E-10	-9.113E-13	-5.00E-10

Таблиця 2

(крок $h = 0.01$, функція $x \mapsto \sin(x)$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.0000001$)

0.005	4.988E-10	-5.012E-10	-1.172E-12	-5.00E-10
0.015	4.964E-10	-5.035E-10	-3.515E-12	-5.00E-10
0.025	4.940E-10	-5.057E-10	-5.859E-12	-5.00E-10
0.035	4.915E-10	-5.079E-10	-8.201E-12	-5.00E-10

Таблиця 3

(крок $h = 0.01$, функція $x \mapsto \sin(x)$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.0000001$)

0.005	4.999E-10	-5.001E-10	-1.302E-13	-5.00E-10
0.015	4.996E-10	-5.003E-10	-3.907E-13	-5.00E-10
0.025	4.992E-10	-5.005E-10	-6.511E-13	-5.00E-10
0.035	4.988E-10	-5.006E-10	-9.114E-13	-5.00E-10

2. Про двосторонні нелокальні сплайни. Кубічний сплайн

$$S_{3,1}(x) = S_{3,1,i}(x), x \in [x_i, x_{i+1}],$$

в записі через величини $m_i = S'_{3,1}(x_i)$ [1], як і у випадку ермітового сплайна, подамо у вигляді суми лінійного сплайна та додаткового члена

$$S_{3,1,i}(x) = f_i + \Delta f_i t + t(1-t)((2t-1)\Delta f_i + h_i(m_i - t(m_i + m_{i+1})))$$

(як бачимо, це дуже подібне ермітовому кубічному сплайнові, вони відрізняються величинами m_i, m_{i+1} , відповідно, та величинами f'_i, f'_{i+1}), а в записі через величини $M_i = S''_{3,1}(x_i)$ він уже має такий вигляд [1]

$$S_{3,1,i}(x) = f_i + t\Delta f_i - h_i^2 t(1-t)((2-t)M_i + (1+t)M_{i+1})/6.$$

Тепер, як і у випадку локальних кубічних сплайнів, збуреннями лінійної складової цих сплайнів або додаткового члена дістаємо симетричні двосторонні нелокальні кубічні сплайни (див. (2), (3)). Результати чисельних експериментів за цими сплайнами з крайовими умовами першого та другого типів [1] наведено в таблицях 4 - 7. В колонках цих таблиць наведено значення тих же змінних, що й в таблицях 1 - 3.

Таблиця 4

(вузлів 5, крок 0.01, функція $x \mapsto e^x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 10^{-5}$)

0.005	5.023E-8	-5.028E-8	-2.608E-11	-5.025E-8
0.015	5.074E-8	-5.078E-8	-2.648E-11	-5.076E-8
0.025	5.124E-8	-5.129E-8	-2.667E-11	-5.127E-8
0.035	5.175E-8	-5.181E-8	-2.706E-11	-5.178E-8

Таблиця 5

(другий варіант, вузлів 5, крок 0.01, функція $x \mapsto e^x$, параметр двосторонності $\bar{\varepsilon} = 10^{-3}$)

0.005	-1.263E-8	1.250E-8	-6.334E-11	1.256E-8
0.015	-1.271E-8	1.267E-8	-1.911E-11	1.269E-8
0.025	-1.284E-8	1.280E-8	-1.884E-11	1.282E-8
0.035	-1.301E-8	1.288E-8	-6.573E-11	1.295E-8

Таблиця 6

(вузлів 5, крок 0.1, функція $x \mapsto \sin x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.01$)

0.05	4.9916E-4	-4.9917E-4	-4.1186E-9	-4.9917E-4
0.15	4.9414E-4	-4.9422E-4	-4.1944E-8	-4.9418E-4
0.25	4.8419E-4	-4.8432E-4	-6.1796E-8	-4.8425E-4
0.35	4.6939E-4	-4.6959E-4	-9.7763E-8	-4.6949E-4

Таблиця 7

(вузлів 5, крок 0.1, функція $x \mapsto \sin x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.01$)

0.05	4.992E-4	-4.992E-4	-9.425E-9	-4.992E-4
0.15	4.941E-4	-4.942E-4	-4.988E-8	-4.942E-4
0.25	4.842E-4	-4.843E-4	-2.474E-8	-4.843E-4
0.35	4.693E-4	-4.697E-4	-2.381E-7	-4.695E-4

За такими ж правилами можна будувати й симетричні двосторонні кубічні сплайни з умовами 3-го та 4-го типів (зауважимо, що чотирьохвузлові сплайни з умовами 4-го типу фактично є сплайни з нульовим дефектом), сплайни з розривною похідною (з умовами 1-го - 4-го типів), а також раціональні симетричні двосторонні узагальнені «кубічні» сплайни [1]. При цьому для кращої стійкості обчислень та меншої втрати вірних знаків результату доцільніше записати цей, останній, сплайн не як в [1], а у вигляді

$$S_R(x) = f_i + \Delta f_i t - t(1-t)(C_i(t+1+p_i)/(1+p_i(1-t)) + D_i(2-t(1+q_i))/(1+q_i t))$$

(p_i, q_i – вільні параметри, добираються інтуїтивно; при нульових їх значеннях – це кубічний сплайн $S_{3,1}(x)$). У таблиці 8 подано результати обчислень за двосторонніми сплайнами виду (2) для функції

$$x \mapsto 1 - (e^{100x} - e^{-100x}) / (e^{100} - e^{-100}), x \in [0, 1],$$

при тих же значеннях вільних параметрів, що й в [1]. В останній колонці таблиці наведено значення параметра двосторонності ε

Таблиця 8

(крок 0.1, вузлів 11)

0.025	4.99845E-5	-5.00155E-5	-1.55432E-8	-5.00000E-5	1.00000E-4
0.125	5.01088E-5	-4.98912E-5	1.08802E-7	-5.00000E-5	1.00000E-4
0.225	4.95803E-5	-5.04200E-5	-4.19666E-7	-5.00000E-5	1.00000E-4
0.325	5.01570E-4	-4.98430E-4	1.56986E-6	-5.00000E-4	1.00000E-3
0.425	4.94140E-4	-5.05860E-4	-5.85979E-6	-5.00000E-4	1.00000E-3
0.525	5.21869E-4	-4.78131E-4	2.18693E-5	-5.00000E-4	1.00000E-3
0.625	9.91838E-3	-1.00816E-2	-8.16174E-5	-1.00000E-2	2.00000E-2
0.725	2.53046E-2	-2.46954E-2	3.04600E-4	-2.50000E-2	5.00000E-2
0.825	9.89666E-2	-1.01044E-1	-1.03562E-3	-1.00002E-1	2.00000E-1
0.925	4.03674E-1	-3.46292E-1	2.86912E-2	-3.74983E-1	5.00000E-1

На завершення відмітимо наступне.

Перше те, що в нелокальних сплайнах похідні в крайових умовах 1-го та 2-го типів [1] можна замінити відповідними формулами чисельного диференціювання. Результати чисельних експериментів з такими сплайнами з сталим кроком (похідні в крайових умовах замінено 5-точковими, відповідно, лівосторонньою та правосторонньою формулами чисельного диференціювання; похибка $O(h^4)$) наведено у таблицях 9 – 12 (для тих же функцій, що й в таблицях 4 – 7).

Таблиця 9

(вузлів 5, крок 0.01, функція $x \mapsto e^x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.00001$)

0.005	5.022E-8	-5.028E-8	-2.935E-11	-5.025E-8
0.015	5.073E-8	-5.078E-8	-2.537E-11	-5.076E-8
0.025	5.124E-8	-5.129E-8	-2.776E-11	-5.127E-8
0.035	5.175E-8	-5.181E-8	-2.377E-11	-5.178E-8

Таблиця 10

(вузлів 5, крок 0.01, функція $x \mapsto e^x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.00001$)

0.005	5.019E-8	-5.031E-8	-6.334E-11	-5.025E-8
-------	----------	-----------	------------	-----------

0.015	5.074E-8	-5.078E-8	-1.911E-11	-5.076E-8
0.025	5.125E-8	-5.128E-8	-1.884E-11	-5.127E-8
0.035	5.172E-8	-5.185E-8	-6.573E-11	-5.178E-8

Таблиця 11

(вузлів 5, крок 0.1, функція $x \mapsto \sin x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.01$)

0.05	4.988E-4	-4.995E-4	-3.205E-7	-4.992E-4
0.15	4.942E-4	-4.941E-4	6.325E-8	-4.942E-4
0.25	4.841E-4	-4.844E-4	-1.662E-7	-4.843E-4
0.35	4.697E-4	-4.693E-4	2.145E-7	-4.695E-4

Таблиця 12

(вузлів 5, крок 0.1, функція $x \mapsto \sin x$, параметр двосторонності $\varepsilon = 0.01$)

0.05	4.988E-4	-4.996E-4	-3.943E-7	-4.992E-4
0.15	4.943E-4	-4.941E-4	7.801E-8	-4.942E-4
0.25	4.841E-4	-4.844E-4	-1.514E-7	-4.843E-4
0.35	4.696E-4	-4.694E-4	1.407E-7	-4.695E-4

Друге те, що при двосторонньому збуренні лінійної частини сплайна вилка абсолютної похибки знакосталала на інтервалах знакосталості першої похідної функції, а при збуренні його додаткового члена – її другої похідної.

Третє те, що оскільки нелокальні сплайни являються колокаційними (з простими вузлами), то поточкові оцінки похибки апроксимації незалежно від гладкості функції мають містити множник $(x - x_i)(x_{i+1} - x)$.

Четверте те, що інтегруванням побудованих тут двосторонніх сплайнів дістанемо відповідні двосторонні квадратурні формули. При збуренні лінійної частини сплайна вони відрізнятимуться від формул [1] лише доданком $h_i(f + f_{i+1})/2 \pm \pm \varepsilon h_i(f_{i+1} - f_i)/2$ (це двосторонні симетричні квадратурні формули трапсцій).

І, нарешті, п'яте: системи рівнянь, супровідні кубічним нелокальним сплайнам при сталому кроці сітки вузлів, є не що інше, як наближення формули Ньютона – Лейбніца (відповідно, для першої та другої похідної під знаком інтеграла) за допомогою квадратурної формули Сімпсона.

Список використаних джерел

1. Зав'язлов Ю. С., Квасов В. И., Мирошніченко В. И. Методы сплайн функций. – Москва: «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1980. – 352 с.

Надійшла до редколегії 16.02.2007

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 АКТИВНЕ ДЕМПФІРУВАННЯ ВИМУШЕНИХ ГАРМОНІЧНИХ КОЛИВАНЬ ПРЯМОКУТНОЇ ПЛАСТИНИ З ШАРНІРНИМ ЗАКРІПЛЕННЯМ ТОРЦІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ОРТОТРОПНИХ АКТУАТОРІВ

На основі моделі Тимошенка досліджено вплив деформацій зсуву на активне демпфірування вимушених гармонічних коливань прямокутної ортотропної пластини з шарнірним закріпленням її торців за допомогою ортотропного актуатора. Одержано просту аналітичну формулу для різниці потенціалів, яку необхідно підвести до актуатора для компенсації нормального гармонічного тиску. Як частковий випадок, розглянута трансверсально-ізотропна пластинка з трансверсально-ізотропним актуатором. Електромеханічна поведінка матеріалів описується з використанням концепції комплексних характеристик.

Ключові слова: композитні пластини, актуатор, активне демпфірування.

Прямокутні тонкостінні композитні пластини знаходять широке застосування в багатьох галузях сучасної науки і техніки. Часто на них діють стаціонарні та нестаціонарні механічні й теплові навантаження, які можуть викликати високий рівень напружень. Для суттєвого зниження амплітуд при вимушених коливаннях і зменшення напружень у зонах концентрації в останні роки почали інтенсивно розвиватися активні методи демпфірування з використанням п'єзоелектричних включень: сенсорів та актуаторів. Останні досягнення з цих питань представлено у роботах [4,5]. При використанні активного демпфірування головним питанням є розрахунок різниці потенціалів, яку необхідно підвести до актуаторів для компенсації механічного нава-

Vasyl G. Karnaukhov, D.Sci (Phys-Math.),
Full Professor
Tetyana V. Karnaukhova, C.Sci (Phys-Math.),
Ass. Professor
Olena V. Pyatetska, engineer

INFLUENCE OF SHEAR DEFORMATIONS ON ACTIVE DAMPING FORCED HARMONIC VIBRATIONS OF RECTANGULAR PLATE WITH THE SIMPLE SUPPORT CONDITIONS BY ORTHOTROPIC ACTUATORS

On base Timoshenko's model an influence of shear deformations is studied on the active damping of harmonic vibrations of rectangular orthotropic plate with the simple support conditions by orthotropic actuator. Simple formulas for potential difference for compensation of normal harmonic pressure are obtained. Transversally isotropic plate with transversally isotropic actuator is considered too. Electromechanical behavior of materials under monoharmonic mechanical and electrical loading is described by the conception of complex characteristics under monoharmonic mechanical and electrical loading.

Key words: composite plates, piezoelectrical actuator, active damping.

нтаження. Ефективність активного демпфірування за допомогою актуаторів залежить від багатьох факторів: їх геометричних розмірів, розміщення у структурі пластини, електромеханічних властивостей тощо.

Дана стаття присвячена дослідженню впливу деформацій зсуву на ефективність активного демпфірування вимушених стаціонарних згинних коливань прямокутної пластини при дії на неї гармонічного за часом нормального тиску за допомогою актуатора. Торці пластини вважаються шарнірно закріпленими. Пасивний матеріал також вважається ортотропним. Одержана проста формула для різниці потенціалів, яку необхідно підвести до актуатора для компенсації механічного навантаження.

Нехай пластина складена з 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 з 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 у роботі [2]. Пасивний шар може бути як металічним, так і діелектричним. Вважається, що п'єзоактивні шари поляризовані по товщині 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

$$\frac{\partial Q_1}{\partial x} + \frac{\partial Q_2}{\partial y} + \rho^* \omega^2 w + p(x, y) = 0, \quad (1)$$

$$Q_1 = \frac{\partial M_1}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial y}, \quad Q_2 = \frac{\partial M_2}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial x}$$

Компоненти тензора згинних деформацій для пластини визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^z &= \kappa_1 z; & \varepsilon_{22}^z &= \kappa_2 z; & \varepsilon_{12}^z &= \kappa_{12} z; \\ \kappa_{12} &= \tau_1 + \tau_2; & \varepsilon_{13}^z &= \phi_1 + \theta_1; & \varepsilon_{23}^z &= \phi_2 + \theta_2; \\ \kappa_1 &= \frac{\partial \phi_1}{\partial x}, & \kappa_2 &= \frac{\partial \phi_2}{\partial y}, & \theta_1 &= \frac{\partial w}{\partial x}, & \theta_2 &= \frac{\partial w}{\partial y}, \\ \tau_1 &= \frac{\partial \phi_1}{\partial y}, & \tau_2 &= \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \end{aligned} \quad (2)$$

Визначальні рівняння для моментів і перерізуючих сил для ортотропного пасивного матеріалу з ортотропними актуаторами мають вигляд:

$$M_{(1,2)} = D_{(1,2)} \kappa_1 + D_{(2,2)} \kappa_2 + M_{(1,2)}^0, \quad H = D_{66} \kappa_{12},$$

$$Q_1 = Q_{11}(\varphi_1 + \frac{\partial w}{\partial x}), \quad Q_2 = Q_{22}(\varphi_2 + \frac{\partial w}{\partial y}), \quad (3)$$

де

$$M_{(1,2)}^0 = -\frac{w_{(1,12)}}{v_{10}} V_1 + \frac{w_{(2,22)}}{v_{20}} V_2, \quad V_i = \frac{1}{2} \gamma_{31,32} V_0, \quad (4)$$

а $\pm \frac{V_0}{2}$, $-\frac{V_0}{2}$ - різниці потенціалів, прикладені відповідно до верхнього та нижнього актуаторів.

В (3) жорстісні характеристики визначаються за формулами, наведеними в [2]. Потрібно мати на увазі, що відповідно до концепції комплексних характеристик при моногармонічному навантаженні коефіцієнти наведених вище визначальних рівнянь комплексні і у загальному випадку залежать від частоти і температури [4,5]. 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 φ_1, φ_2, w

$$\begin{aligned} Q_{11} \frac{\partial}{\partial x} (\varphi_1 + \frac{\partial w}{\partial x}) + Q_{22} \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_2 + \frac{\partial w}{\partial y}) + \\ + \rho^* \omega^2 w + p(x, y) = 0, \\ Q_{11} (\varphi_1 + \frac{\partial w}{\partial x}) = \frac{\partial}{\partial x} (D_{11} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + D_{12} \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} + M_1^0) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} [D_{66} (\frac{\partial \varphi_1}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_2}{\partial x})], \\ Q_{22} (\varphi_2 + \frac{\partial w}{\partial y}) = \frac{\partial}{\partial y} (D_{12} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + D_{22} \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} + M_2^0) + \\ + \frac{\partial}{\partial x} [D_{66} (\frac{\partial \varphi_1}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_2}{\partial x})]. \end{aligned} \quad (5)$$

Для шарнірного закріплення механічне та електричне навантаження і розв'язок задачі представимо у вигляді:

$$\begin{aligned} w &= \sum_m \sum_n w_{mn} \sin k_m x \sin p_n y, \\ \varphi_1 &= \sum_m \sum_n \varphi_{mn}^1 \cos k_m x \sin p_n y, \\ \varphi_2 &= \sum_m \sum_n \varphi_{mn}^2 \sin k_m x \cos p_n y, \\ p &= \sum_m \sum_n p_{mn} \sin k_m x \sin p_n y, \\ M_{1,2}^0 &= \sum_m \sum_n M_{mn}^{1,2} \sin k_m x \sin p_n y. \end{aligned} \quad (6)$$

Використовуючи два останні рівняння руху (5), одержимо

$$\begin{aligned}\varphi_{mn}^1 &= \frac{\Delta_{11}}{\Delta} w_{mn} + \frac{\Delta_{12}}{\Delta} Q_{22} M_{mn}^1, \\ \varphi_{mn}^2 &= \frac{\Delta_{21}}{\Delta} w_{mn} + \frac{\Delta_{22}}{\Delta} Q_{11} M_{mn}^1,\end{aligned}\quad (7)$$

$$\begin{aligned}\Delta &= \left(\frac{D_{11}}{Q_{11}} k_m^2 + \frac{D_{66}}{Q_{11}} p_n^2 + 1 \right) \left(\frac{D_{22}}{Q_{22}} p_n^2 + \frac{D_{66}}{Q_{22}} k_m^2 + 1 \right) - \\ &\quad - \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{11}} \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{22}} k_m^2 p_n^2, \\ \Delta_{11} &= - \left(\frac{D_{22}}{Q_{22}} k_m p_n^2 + \frac{D_{66}}{Q_{22}} k_m^3 + k_m \right) + \\ &\quad + \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{11}} k_m^2 p_n^2, \\ \Delta_{21} &= - \left(\frac{D_{11}}{Q_{11}} k_m^2 p_n + \frac{D_{66}}{Q_{11}} p_n^3 + p_n \right) + \\ &\quad + \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{22}} k_m^2 p_n^2, \\ \Delta_{12} &= \left(\frac{D_{22}}{Q_{22}} k_m p_n^2 + \frac{D_{66}}{Q_{22}} k_m^3 + k_m \right) - \\ &\quad - \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{22}} k_m p_n^2 \frac{M_{mn}^2}{M_{mn}^1}, \\ \Delta_{22} &= \frac{M_{mn}^2}{M_{mn}^1} \left(\frac{D_{11}}{Q_{11}} k_m^2 p_n + \frac{D_{66}}{Q_{11}} p_n^3 + p_n \right) - \\ &\quad - \frac{D_{12} + D_{66}}{Q_{11}} k_m^2 p_n^2.\end{aligned}\quad (8)$$

Використовуючи (7), з першого рівняння (5) матимемо

$$\begin{aligned}& [I_1^* \omega^2 - Q_{11} k_m^2 - Q_{22} p_n^2 - Q_{11} k_m \frac{\Delta_{11}}{\Delta} - Q_{22} p_n \frac{\Delta_{21}}{\Delta}] \times \\ & \times w_{mn} + p_{mn} - M_{mn}^1 \left(k_m \frac{\Delta_{12}}{\Delta} + p_n \frac{\Delta_{22}}{\Delta} \right) = 0\end{aligned}\quad (9)$$

З цієї формули видно, що для компенсації механічного навантаження до актуатора потрібно прикласти різницю потенціалів, яка визначається співвідношенням:

$$M_{mn}^1 = \frac{p_{mn}}{\Pi_{mn}}, \quad (10)$$

Тут

$$\Pi_{mn} = \left(k_m \frac{\Delta_{12}}{\Delta} + p_n \frac{\Delta_{22}}{\Delta} \right). \quad (11)$$

При цьому амплітуда вимушених коливань пластини дорівнюватиме нулеві. Власна частота пластини визначається з рівняння:

$$I_1^* \omega^2 - Q_{11} k_m^2 - Q_{22} p_n^2 - Q_{11} k_m \frac{\Delta_{11}}{\Delta} - Q_{22} p_n \frac{\Delta_{21}}{\Delta} = 0. \quad (12)$$

Для трансверсально-ізотропного матеріалу у формулах (10)-(12) слід покласти

$$\begin{aligned}D_{11} &= D_{22} = D, \quad D_{12} = \nu D, \\ D_{66} &= \frac{1-\nu}{2} D, \quad Q_{11} = Q_{22} = Q'.\end{aligned}\quad (13)$$

Якщо знехтувати деформаціями зсуву, різниця потенціалів визначається формулою

$$M_{mn}^1 = \frac{p_{mn}}{k_m^2 + p_n^2}. \quad (14)$$

Як бачимо, різниця потенціалів, яку необхідно підвести до, наприклад, трансверсально-ізотропного актуатора для компенсації механічного навантаження, залежить від відношення модулів E'/E та відношення довжини пластини до її товщини і може суттєво вплинути на цю величину. Аналогічний результат матимемо і для випадку, коли пасивний шар – діелектричний, а внутрішні електроди відсутні. Потрібно лише врахувати нові вирази для жорсткісних характеристик пластини.

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 актуаторами при моногармонічному навантаженні// Вісник Київського університету. Серія фізико-математичні науки. – 2006. – №4. – 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 Structronic Systems.- Kluwer Academic Pub.: Dordrecht/Boston/ London. – 2001. – 384p.
5. Rao S.S. and Sunar M. Piezoelectricity and its use in disturbance sensing and control of structure: A survey// Applied mechanics reviews.-1994. – V.47, N 44. – P. 113-123.

Надійшла до редколегії 12.01.2007 р.

УДК 532.595

Константинов* О.В., аспірант

Нелінійна динаміка системи резервуар – рідина в умовах слабкої гравітації

В роботі розглядається задача сумісного руху ідеальної капілярної рідини та циліндричного резервуару в умовах слабкої гравітації. Резервуар рухається поступально під дією початкового збудження вільної поверхні рідини або прямокутного імпульсу сили, що прикладений до його стінок. В роботі побудована та виконана чисельна реалізація дискретної моделі системи резервуар-рідина. Проведено якісний та кількісний аналіз результатів чисельного моделювання та їх порівняння з наявними теоретичними та експериментальними результатами.

Ключові слова: капілярність, нелінійні коливання, вільна поверхня.

*E-mail: akonstantinov@kvazar-micro.com

§1. Побудова дискретної моделі динамічної системи

Розглянемо динамічну систему, яка складається з двох взаємодіючих компонент: циліндричного резервуару та рідини, яка частково його заповнює. Припускається, що резервуар є абсолютно твердим тілом, який може бути нерухомим або рухатись поступально під впливом активних зовнішніх сил. Рідина, яка частково заповнює резервуар, є ідеальною, нестисливою, однорідною, а її початковий рух є безвихровим. Додатково припускається, що на вільній поверхні рідини діють сили поверхневого натягу, а вся система цілком знаходиться в полі слабкої гравітації (в чисельних прикладах інтенсивність поля

A.V. Konstantinov, post-graduate student

Nonlinear dynamics of system tank – liquid in conditions of weak gravitation

Nonlinear oscillations of ideal incompressible capillary liquid with a free surface in cylinder container are considered. The basic properties of the solution of the system of the nonlinear ordinary differential equations and some features of their numerical realization are analyzed. Results of numerical experiments for a mobile tank are presented and discussed.

Key Words: capillarity, nonlinear oscillations, free surface.

гравітаційних сил приймалася $g = 0,001 \frac{M}{c^2}$).

Наявність слабкої гравітації та сил поверхневого натягу призводить до того, що форма рівноваги вільної поверхні рідини перестає бути плоскою та набуває форму тіла обертання. Викривлення вільної поверхні рідини у незбудженому стані вносить у систему нову геометричну нелінійність. В роботі якісно та кількісно оцінюється вплив цієї геометричної нелінійності на нелінійну динаміку системи "резервуар – рідина".

Використовуючи результати робіт [1, 2, 3], запишемо вираз функції Лагранжа для дослідження динаміки системи "резервуар – рідина" у вигляді

$$L = \frac{1}{2} \rho \int_{\tau} (\vec{\nabla}_1 \varphi + \vec{\xi})^2 d\tau + \frac{1}{2} M_p (\dot{\xi})^2 - (M_p + M_s) g \xi - \frac{1}{2} \rho g \int_{\xi} (\xi^2 - H^2) dS - \sigma \int_S \sqrt{1 + (\vec{\nabla}_2 \xi)^2} dS - \sigma \cos \Theta_1 \int_{\xi_0} \xi dl + \vec{F} \cdot \vec{\xi}, \quad (1)$$

де ρ – густина рідини; τ – об'єм рідини; $\vec{\nabla}_1 = \vec{i}_1 \frac{\partial}{\partial r} + \vec{i}_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{i}_3 \frac{\partial}{\partial z}$, $\vec{\nabla}_2 = \vec{i}_1 \frac{\partial}{\partial r} + \vec{i}_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$; r, θ, z – циліндричні координати, в яких вісь Oz спрямована протилежно вектору прискорення вільного падіння $\vec{g}$, а система координат

нерухомо пов'язана з резервуаром; $g = |\vec{g}|$; φ – потенціал швильностей рідини; ξ – збурення вільної поверхні рідини по відношенню до незбудженої вільної поверхні некапілярної рідини; S – поперечний переріз циліндричного резервуара; σ – поверхневий натяг на вільній

поверхні рідини, Θ_i – контактний кут, L_0 – контур, який обмежує S ; M_p – маса резервуара; M_w – маса рідини; $\vec{\varepsilon} = \varepsilon_i \vec{i} + \varepsilon_j \vec{j} + \varepsilon_k \vec{k}$ – вектор переміщення резервуара; $\vec{F}$ – головний вектор зовнішніх сил, які діють на резервуар. Для повного врахування впливу капілярних сил функція Лагранжа (1) містить як потенційну енергію капілярних сил на вільній поверхні рідини, так і на контурі контакту газ – рідина – резервуар.

Для розв'язання задачі необхідно, перш за все, ввести мінімальну кількість незалежних змінних, які описують рух резервуара з рідиною, тобто фактично побудувати розклади шуканих змінних, які задовольняють всім кінематичним граничним умовам. Оскільки безвихровий рух ідеальної нестисливої однорідної рідини повністю визначається рухом її границь, то збурення вільної поверхні рідини ξ та радіус-вектор резервуару $\vec{\varepsilon}(t)$ повністю характеризують динаміку системи, а тому потенціал швидкостей φ слід вважати залежною змінною.

Відповідно до методики роботи [2], розклади шуканих змінних записуємо у вигляді

$$\xi = \xi_0 + \sum_i a_i(t) \psi_i(r, \theta), \quad \varphi = \sum_j b_j(t) \phi_j(r, \theta, z),$$

де ξ_0 – геометрична нелінійність, яка введена в даній задачі і задається у явному вигляді як

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2} \rho \sum_{i,j} \dot{a}_i \dot{a}_j \beta_{ij}^q + \frac{1}{2} \rho \sum_{i,j,k} \dot{a}_i \dot{a}_j a_k \gamma_{ijk}^q + \frac{1}{2} \rho \sum_{i,j,k,l} \dot{a}_i \dot{a}_j a_k a_l \delta_{ijkl}^q + \\ & + \rho \vec{\varepsilon} \cdot \left\{ \sum_i \dot{a}_i \vec{B}_i^1 + \sum_{i,j} \dot{a}_i a_j \vec{B}_{ij}^2 + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i a_j a_k \vec{B}_{ijk}^3 + \sum_{i,j,k,l} \dot{a}_i a_j a_k a_l \vec{B}_{ijkl}^4 \right\} + \\ & + \frac{1}{2} (M_w + M_p) (\dot{\vec{\varepsilon}})^2 - (M_w + M_p) g \varepsilon_z - \frac{1}{2} \rho g \sum_i (a_i \alpha_i^3 + a_i^2 N_i) - \\ & - \sigma \sum_i a_i \alpha_i^k - \sigma \sum_{i,j} a_i a_j \beta_{ij}^k - \sigma \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k \gamma_{ijk}^k - \\ & - \sigma \sum_{i,j,k,l} a_i a_j a_k a_l \delta_{ijkl}^k - \sigma \cos \theta_i \sum_i a_i \lambda_i + \vec{F} \cdot \vec{\varepsilon} \end{aligned} \quad (2)$$

Функція Лагранжа у вигляді (1) гетерогенна (неоднорідна) по своїй природі, оскільки описує сумісний рух системи з нескінченним числом ступенів вільності – рідини, та твердого тіла з скінченим числом ступенів вільності – резервуара. Перехід від співвідношення (1) до співвідношення (7) можна розглядати як перехід

форма рівноваги капілярної рідини, $\dot{a}_i(t)$ – амплітуди форм коливань збуреної вільної поверхні рідини ξ . Системи функцій ψ_i та ϕ_i де

$$\psi_i = \psi_i \frac{\cosh \kappa_i(z+H)}{\kappa_i \sinh \kappa_i H},$$

є рішенням лінійної задачі.

Важливо відмітити, що функції $\psi_i(r, \theta)$ не являються власними формами коливань для цієї задачі, оскільки цьому заважає початкове викривлення вільної поверхні рідини під дією капілярних сил. Тому дана система функцій обрана просто як система координатних функцій, по яких розкладаються в ряди функції потенціалу та вільної поверхні рідини. Цей вибір обумовлений тим, що:

- 1) функції $\psi_i \frac{\cosh \kappa_i(z+H)}{\kappa_i \sinh \kappa_i H}$ є гармонічними у всій області τ ;
- 2) вони задовольняють умовам неперетікання на стінках резервуара;
- 3) система функцій $\psi_i(r, \theta)$ повна на незбуреній поверхні $z = 0$.

Використовуючи методику роботи [2] отримуємо функцію Лагранжа вільної механічної системи

від гетерогенної (розподіленої) структури реальної системи до деякої гомогенної (дискретної) моделі.

З функції Лагранжа у вигляді (2) одержимо систему нелінійних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку, які описують динаміку системи резервуар – рідина

$$\begin{aligned} \sum_i \ddot{a}_i \left\{ \beta_{ri}^q + \sum_j a_j \gamma_{rj}^q + \sum_{i,j} a_i a_j \delta_{rjk}^q \right\} + \ddot{\tilde{\varepsilon}} \cdot \left\{ \bar{B}_r^1 + \sum_i a_i \bar{B}_{ri}^2 + \sum_{i,j} a_i a_j \bar{B}_{rj}^3 + \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k \bar{B}_{rjk}^4 \right\} = \\ = \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_i a_j (\gamma_{yr}^q - 2\gamma_{ry}^q) + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i \dot{a}_j a_k (\delta_{ykr}^q - 2\delta_{ryk}^q) - \frac{1}{2} g \alpha_r^s - g N_r a_r + \\ + \ddot{\tilde{\varepsilon}} \cdot \left\{ \bar{B}_r^1 + \sum_i a_i (\bar{B}_{ri}^2 - \bar{B}_{ri}^2) + \sum_{i,j} \dot{a}_i a_j 2(\bar{B}_{yr}^3 - \bar{B}_{ry}^3) + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i a_j a_k 3(\bar{B}_{ykr}^4 - \bar{B}_{ryk}^4) \right\} - \\ - \frac{\sigma}{\rho} \sum_i a_i 2\beta_{ir}^k - \frac{\sigma}{\rho} \sum_{i,j} a_i a_j (\gamma_{yr}^k + 2\gamma_{ry}^k) - \frac{\sigma}{\rho} \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k 2(\delta_{ykr}^k + \delta_{ryk}^k) - \frac{\sigma}{\rho} \cos \theta_1 \lambda_r \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{(M_{\omega} + M_p)} \left\{ \sum_i \ddot{a}_i \left[\bar{B}_i^1 + \sum_j a_j \bar{B}_{ij}^2 + \sum_{j,k} a_j a_k \bar{B}_{ijk}^3 \right] \right\} + \ddot{\tilde{\varepsilon}} = \\ = \frac{\bar{F}}{(M_{\omega} + M_p)} - g \bar{k} - \frac{\rho}{(M_{\omega} + M_p)} \left\{ \sum_{i,j} \dot{a}_i \dot{a}_j \bar{B}_{ij}^2 + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i \dot{a}_j a_k 2\bar{B}_{ijk}^3 \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

Рівняння (3) описують динаміку амплітуд коливань вільної поверхні рідини, а рівняння (4) – динаміку резервуара, який рухається поступально. Тепер сумісний рух резервуара з рідиною повністю характеризується незалежними узагальненими координатами a_i та $\tilde{\varepsilon}$.

Зображення системи рівнянь (3) – (4) у матричному вигляді дозволяє проілюструвати її структуру (мал. 1), де підматриця A_{ij} описує власні коливання рідини, підматриця B_{ij} – вплив коливань рідини на рух резервуара, підматриця C_{ij} – вплив руху резервуара на коливання рідини, а одинична матриця 3×3 у правому нижньому куті описує поступальний рух резервуара. Слід відмітити, що якісний та кількісний характер нелінійних коливань у системі в значній мірі визначається структурою

матриці $A_{ij} = \beta_{ri}^q + \sum_j a_j \gamma_{rj}^q + \sum_{i,j} a_i a_j \delta_{rjk}^q$. При наявності початкового викривлення вільної поверхні рідини навіть в лінійному випадку матриця A_{ij} перестає бути діагональною, оскільки втрачається ортогональність координатних функцій, що використовуються замість форм коливань. У нелінійному випадку кількість ненульових недіагональних елементів збільшується, що призводить до поглиблення взаємодії між власними формами коливань та посиленню нелінійних ефектів у розвитку несталих коливань в системі.

Для декомпозиції вільної поверхні рідини $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_0 + \sum_i a_i(t) \psi_i(r, \theta)$ був обраний набір координатних функцій (всього 12)

A_{ij}	B_{ij}	$\bullet$	$\ddot{a}_1$	q_1
			$\ddot{a}_2$	q_2
			$\vdots$	$\vdots$
			$\ddot{a}_3$	q_3
			$\ddot{\tilde{\varepsilon}}$	$\tilde{\varepsilon}_1$
C_{ij}	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\ddot{\tilde{\varepsilon}}$	$\tilde{\varepsilon}_1$	
		$\ddot{\tilde{\varepsilon}}$	$\tilde{\varepsilon}_1$	
		$\ddot{\tilde{\varepsilon}}$	$\tilde{\varepsilon}_1$	

$$\begin{aligned} \psi_1(r, \theta) &= J_0 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \sin(\theta) & \psi_2(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \sin(3\theta) \\ \psi_3(r, \theta) &= J_0 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \cos(\theta) & \psi_4(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \cos(3\theta) \\ \psi_5(r, \theta) &= J_0 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) & \psi_6(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \sin(\theta) \\ \psi_7(r, \theta) &= J_2 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \sin(2\theta) & \psi_8(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \cos(\theta) \\ \psi_9(r, \theta) &= J_2 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \cos(2\theta) & \psi_{10}(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \sin(\theta) \\ \psi_{11}(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) & \psi_{12}(r, \theta) &= J_1 \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \cos(\theta) \end{aligned}$$

Рис. 1 Матрична структура рівнянь динаміки системи

Алгоритм, розроблений О.С. Лімарченко [2], який було використано для створення дискретної моделі динамічної системи та її

подальшої чисельної реалізації, дозволяє обирати для розкладання вільної поверхні рідини довільну кількість координатних функцій. Кількість та тип координатних функцій було обрано таким чином, щоб, по-перше, мати можливість порівняння отриманих результатів з результатами раніше опублікованих робіт [2, 3], а по-друге, побачити нові нелінійні ефекти та явища, які з'являються у системі при наявності початкового викривлення вільної поверхні рідини у не збудженому стані.

Для проведення чисельних експериментів був розроблений пакет прикладних програм на мові програмування FORTRAN, який дозволяє на кожному кроці за часом визначити:

- амплітуди збудження всіх власних форм коливань;
- картини хвиль на вільній поверхні рідини;
- параметри поступального руху циліндричного резервуару;
- поле тиску у рідині;
- головний вектор сил тиску рідини на стінки резервуара (силовий відгук рідини).

§2. Результати обчислювальних експериментів

Розглянемо круговий циліндричний резервуар з вертикальною поздовжньою віссю Oz , який здійснює поступальні рухи в площині xOy . Резервуар радіусу $R = 0.3$ м та маси M_p , частково заповнений рідиною з масою M_w до глибини $H=R$. При цьому в обчислювальних експериментах приймалося $M_p = 0.2M_w$, фізичні постійні σ і ρ приймалися для води, а для прискорення гравітаційних сил було прийняте значення $g = 0.001$ м/с².

Система рівнянь (3-4) лінійна відносно других похідних, що дає можливість при практичній реалізації на кожному кроці чисельного інтегрування спочатку перетворити систему за допомогою ЕОМ до нормальної форми Коші, а потім чисельно інтегрувати за часом за допомогою стандартного методу Рунге-Кутта. При цьому на етапі перетворення до нормальної форми Коші порядок похідних знижувався шляхом введення узагальнених швидкостей $\dot{a}_i$ як рівноправних незалежних змінних (разом з a_i).

При дослідженні динаміки системи резервуар – рідина втримувалося в розгляді $n_1 = 12$ форм коливань вільної поверхні рідини по лінійній теорії, $n_2 = 6$ форм – по квадратичній теорії та $n_3 = 3$ по кубічній теорії. Форми коливань, як видно з їх переліку, розміщуються в порядку

зростання відповідних їм власних частот за винятком ψ_6 – другої вісесиметричної форми.

Крок чисельного інтегрування вибирався $\Delta t = 0.05$ с. При аналізі результатів та побудові графіків амплітуди приводилися до безрозмірного вигляду відносно характерного розміру системи – радіуса R резервуара, час – відносно періоду коливань першої антисиметричної форми при відсутності капілярних сил, силовий відгук рідини – відносно маси системи $M_w + M_p$.

У початковий момент часу в резервуарі задається кінематичне збудження вільної поверхні рідини по першій антисиметричній

формі $\psi_1(0) = 0.2R \cdot \left(\frac{\kappa_1^{(1)}}{R} r \right) \sin\theta$. На рис. 2 наведені

графіки зміни амплітуди форми

ψ_6 – першої антисиметричної форми, другий корінь, при цьому крива 1 відповідає випадку відсутності капілярних сил, а крива 2 – їх наявності. Як видно із графіків, наявність сил поверхневого натягу на вільній поверхні рідини сприяє більш прискореному виведенню коливань рідини в сталий режим.

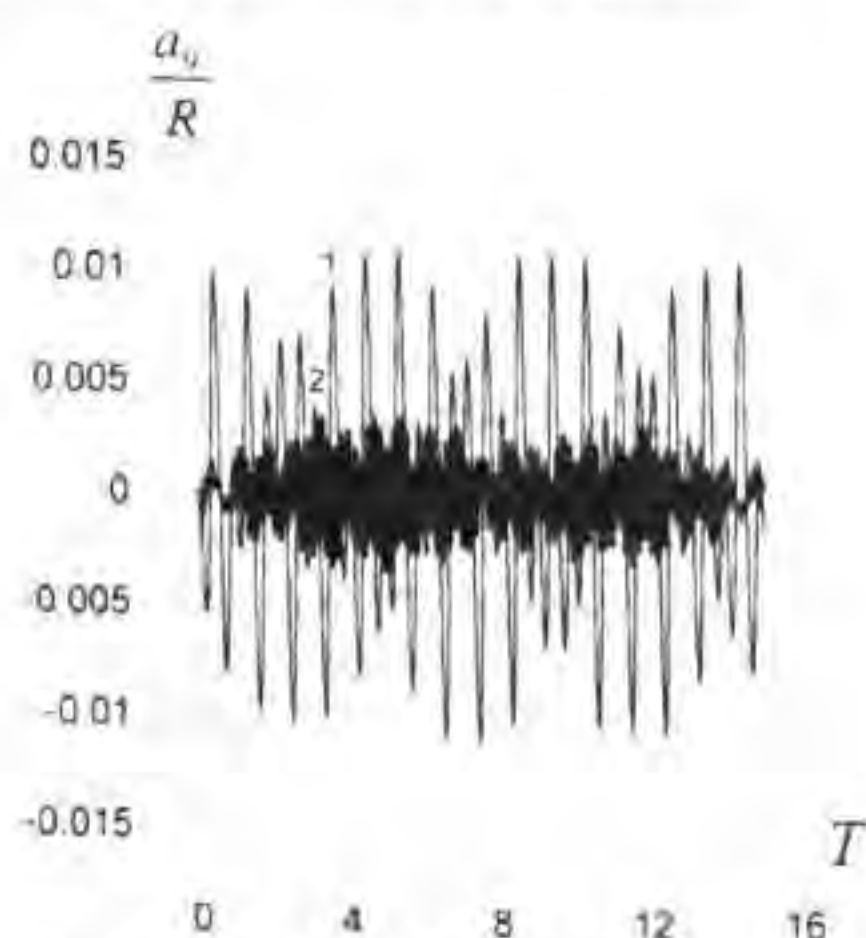


Рис. 2 Зміна амплітуди коливань a_6 у часі

Для вісесиметричних форм коливань вихід у сталий режим при наявності капілярних сил супроводжується появою амплітудної модуляції з досить складною залежністю, що наведено на рис. 3.

Тепер розглянемо резервуар, в якому збудження вільної поверхні рідини викликається силою у вигляді імпульсу, що діє по осі Oy і $F = 1.6(M_w + M_p)g$ з тривалістю $\tau = 0.5$ с. На рис. 4 наведені графіки зміни амплітуди першої антисиметричної форми ψ_1 , при цьому криві 1

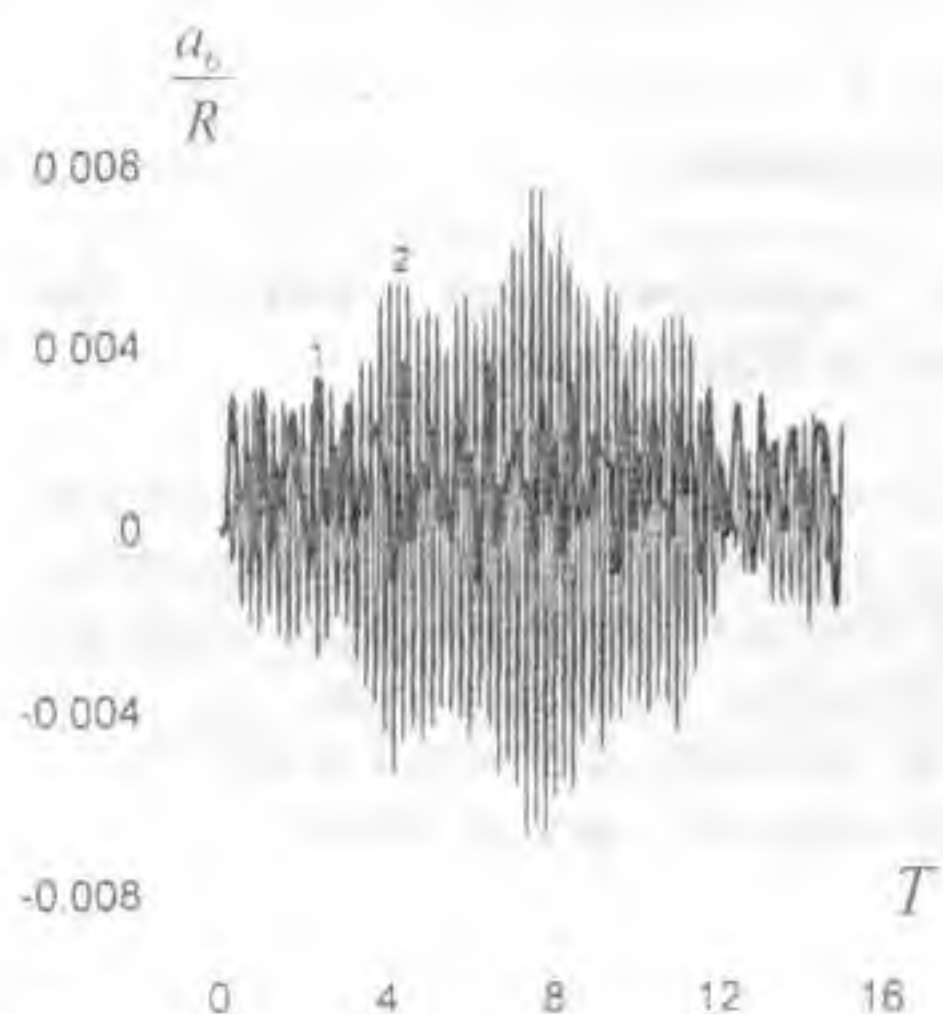


Рис. 3 Зміна амплітуди коливань a_6 у часі

та 2 відповідають умовам, аналогічним рис. 2. Як видно з рис. 4, наявність сил поверхневого натягу підвищує частоту форм коливань, при цьому, якщо для форм $\psi_1(\psi_2)$ частота збільшується приблизно на 13%, то для вищих форм коливань $\psi_{11}(\psi_{12})$ підвищення частоти сягає 165%. Розподіл частот у системі при наявності капілярних сил змінюється нелінійно, що призводить до якісної та кількісної зміни картини коливань. Крім того, як видно з рис. 4, капілярні сили на вільній поверхні рідини зменшують амплітуди коливань форм $\psi_1(\psi_2)$. Ефект зменшення амплітуди коливань при наявності капілярних сил характерний для всіх форм коливань, що підтверджує отриманий в роботах [3] результат, а саме: капілярні сили діють на вільній поверхні рідини подібно розтягнутій мембрані, тобто зменшують крутизну хвиль та згладжують їх профілі.

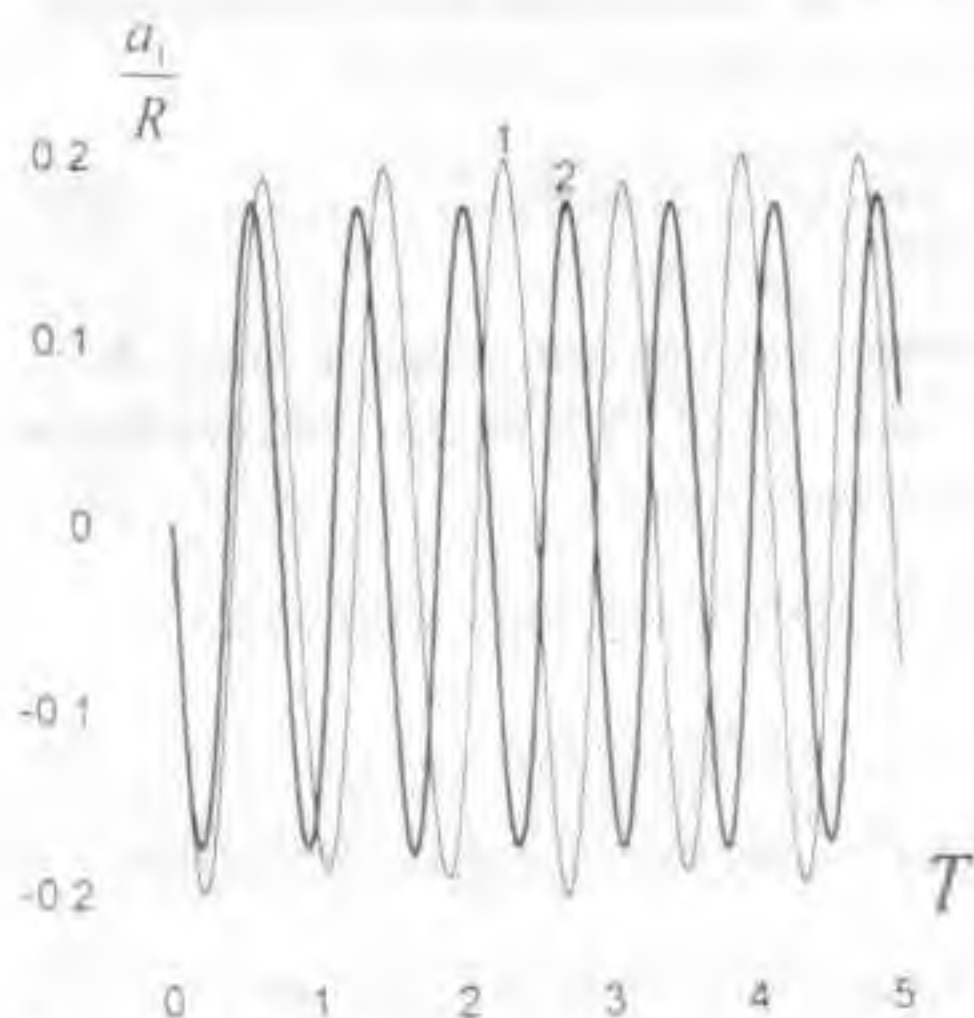


Рис. 4 Зміна амплітуди коливань a_1 у часі

Крім зміни форм коливань в часі була досліджена залежність компонент головного вектору $\bar{R}$ сил тиску рідини на стінки резервуару від часу. Як показують результати чисельних експериментів, наявність капілярних сил призводить до більш глибокої взаємодії між формами коливань, особливо з вищими власними частотами, з однієї сторони, та між рідиною та резервуаром, з другої, що призводить до втрати «регулярності» та появи піків та зломів. Таким чином, з результатів проведеної серії чисельних експериментів випливає:

- розроблено коректну та ефективну нелінійну математичну модель для дослідження перехідних режимів нелінійної динаміки системи резервуар-рідина в умовах слабкої гравітації;
- встановлено, що наявність геометричної нелінійності – початкового викривлення вільної поверхні рідини у не збудженому стані – призводить до появи додаткової лінійної та нелінійної взаємодії між формами коливань;
- крім того, наявність капілярних сил, сприяє більш скорішому виходу коливань рідини на усталений режим, що підтверджує результати експериментальних досліджень [4];
- отримані результати якісно узгоджуються з результатами [4], а в граничному випадку – при відсутності капілярних сил – співпадають з результатами [2].

Список використаних джерел

1. Лимарченко О.С. Вариационная формулировка о движении резервуара с жидкостью. - Докл. АН УССР, Сер. А, 1978, №10. – с. 904-908.
2. Лимарченко О.С., Ясинский В.В. Нелинейная динамика конструкций с жидкостью. – Киев: НТТУ «КПИ», 1997. – 338 с.
3. Лимарченко О.С. Влияние капиллярности на динамику системы резервуар - жидкость // Прикл. Механика. – 1981. – т.27. – №6. – С. 124-128.
4. Ганиев Р.Ф., Лакиза В.Д., Цапенко А.С. О динамическом поведении свободной поверхности жидкости в условиях, близких к невесомости, при вибрационных воздействиях // Прикл. Механика. – 1977. – т.13. – №5. – С. 102-107.

Надійшла до редколегії 27.06.07

УДК 517.9

Андрій П. Крєневич, асистент.

Про стохастичні рівняння не розв'язані відносно "похідної" в гільбертовому просторі

В даній роботі використовуючи метод послідовних наближень Пікара отримано результати щодо існування і єдиності сильних розв'язків стохастичних диференціальних рівнянь не розв'язаних відносно "похідної" в гільбертовому просторі.

Ключові слова: стохастичні диференціальні рівняння, існування і єдиність, сильні розв'язки.

*E-mail: krenevich@univ.kiev.ua

1 Вступ

Розглядається простір $(H, (\cdot, \cdot), \|\cdot\|)$ – сепарабельний гільбертовий простір з скалярним добутком $(\cdot, \cdot)$ та нормою $\|\cdot\|$. В ньому, на ймовірнісному просторі (Ω, F, P) , розглядається стохастичне диференціальне рівняння

$$d[X(t) + g(t, X(t))] = [A(t)X(t) + f(t, X(t))]dt + \sigma(t, X(t))dW(t), \quad (1)$$

$$X(0) = x_0, \quad (2)$$

$t \in [0, T]$, $x \in H$, $A(t): [0, T] \times H \rightarrow H$ – лінійний, неперервний по t оператор, такий, що для кожного $t \in [0, T]$, $A(t)$ – обмежений оператор; $f(t, x), \sigma(t, x), g(t, x): [0, T] \times H \rightarrow H$ – неперервні по t оператор-функції; $W(t)$ – скалярний вінерівський процес, визначений для $t \geq 0$, на ймовірнісному просторі (Ω, F, P) ; $\{F_t, t \in [0, T]\}$ – потік σ -алгебр узгоджений з процесом $W(t)$.

Існує низка робіт присвячених існуванню і єдиності сильних та слабких розв'язків стохастичних звичайних диференціальних рівнянь як в скінченновимірних так і гільбертових просторах, та розроблені методи їх побудови (див. [1]–[3]).

Також багатьма авторами досліджувалася проблема існування, єдиності та асимптотичної поведінки розв'язків стохастичних рівнянь нейтрального типу в просторах скінченної розмірності (див. [4]–[7]).

Питання існування і єдиності розв'язків стохастичних рівнянь не розв'язаних відносно

A.P.Krenevych, assistant.

Stochastic equations not solved for "derivative" in Hilbert space

By Picard method we have obtained a sufficient conditions of existence and uniqueness of strong solutions of stochastic differential equations not solved for "derivative" in Hilbert space.

Key Words: stochastic differential equations, existence and uniqueness, strong solutions.

похідної в гільбертових просторах залишаються відкритими. Подоланню цих проблем і присвячена дана робота.

2 Існування і єдиність

У гільбертовому просторі H поруч з рівнянням (1) розглянемо звичайне диференціальне рівняння вигляду

$$dX(t) = A(t)X(t)dt, \quad (3)$$

з тим же оператором $A(t)$, що і у рівнянні (1). Очевидно, що існує додатна стала K_A , така що

$$\sup_{t \in [0, T]} \|A(t)\| \leq K_A. \quad (4)$$

Нехай $U(t, s)$ – еволюційний оператор рівняння (3). З [8], очевидним чином отримуємо, що існує додатна стала K_U , така, що

$$\sup_{0 \leq s \leq t \leq T} \|U(t, s)\| \leq K_U. \quad (5)$$

Припустимо, що існують додатні сталі K, L , такі, що для $t \in [0, T], x, y \in H$ виконуються наступні співвідношення.

$$\begin{aligned} \|f(t, x)\| + \|\sigma(t, x)\| + \|g(t, x)\| &\leq \\ &\leq K(1 + \|x\|), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \|f(t, x) - f(t, y)\| + \|\sigma(t, x) - \sigma(t, y)\| + \\ + \|g(t, x) - g(t, y)\| &\leq L\|x - y\|. \end{aligned} \quad (7)$$

Розглянемо банаховий простір B_T – простір H -значних, F_t -вимірних, з ймовірністю 1 неперервних по t випадкових процесів $\xi(t, \omega): [0, T] \times \Omega \rightarrow H$, з нормою

$$\|\xi\|_{B_T} = \left\{ E \sup_{t \in [0, T]} \|\xi(t)\|^2 \right\}^{1/2} < \infty, \quad (8)$$

Для подальшого дослідження нам буде необхідна наступна лема.

Лема 1 Розв'язок інтегрального рівняння

$$\begin{aligned} X(t) = & U(t, 0)(x_0 + g(0, x_0)) - g(t, X(t)) - \\ & - \int_0^t U(t, s)A(s)g(s, X(s))ds + \\ & + \int_0^t U(t, s)f(s, X(s))ds + \int_0^t U(t, s)\sigma(s, X(s))dW(s) \end{aligned} \quad (9)$$

є сильним розв'язком рівняння (1) з початковою умовою (2).

Доведення. Для доведення досить переписати рівність (9) у вигляді

$$\begin{aligned} X(t) + g(t, X(t)) = & U(t, 0)(x_0 + g(0, x_0)) - \\ & - \int_0^t U(t, s)A(s)g(s, X(s))ds + \int_0^t U(t, s)f(s, X(s))ds + \\ & + \int_0^t U(t, s)\sigma(s, X(s))dW(s) \end{aligned}$$

і обчислити стохастичний диференціал від обох частин останньої рівності.

Для довільних $f, \sigma \in B_T$ розглянемо наступне стохастичне рівняння

$$\begin{aligned} d[X(t) + g(t, X(t))] = \\ = [A(t)X(t) + f(t)]dt + \sigma(t)dW(t), \end{aligned} \quad (10)$$

$$X(0) = x_0,$$

і визначимо оператор $\Psi: B_T \rightarrow B_T$, що діє за правилом

$$\begin{aligned} (\Psi X)(t) = & U(t, 0)(x_0 + g(0, x_0)) - g(t, X(t)) - \\ & - \int_0^t U(t, s)A(s)g(s, X(s))ds + \\ & + \int_0^t U(t, s)f(s)ds + \int_0^t U(t, s)\sigma(s)dW(s). \end{aligned} \quad (11)$$

Для доведення існування і єдиності розв'язку рівняння (1) нам необхідні будуть деякі допоміжні результати.

Теорема 1 Нехай виконуються умови (4), (5), (6), (7), причому сталі K, L, K_A, K_U пов'язані співвідношенням

$$K_U^2 + L^2 K_U^2 + L^2 + T^3 K_A K_U^2 L^2 < \frac{1}{4}. \quad (12)$$

Тоді рівняння (10) має єдиний розв'язок на відрізку $[0, T]$.

Доведення. Для доведення теореми використаємо вище означений оператор Ψ . Легко показати його середньоквадратичну неперервність, оцінивши для $X \in B_T, t \in [0, T]$ і досить малого h вираз

$$E \|(\Psi X)(t+h) - (\Psi X)(t)\|^2.$$

Покажемо, що $\Psi(B_T) \subset B_T$. Дійсно легко бачити, що для $X \in B_T, t \in [0, T]$

$$E \sup_{t \in [0, T]} \|(\Psi X)(t)\|^2 < \infty.$$

F_t -вимірність елемента $(\Psi X)(t)$ очевидним чином випливає з його представлення. Таким чином ми отримали, що $\Psi: B_T \rightarrow B_T$.

Доведемо, що відображення Ψ має єдину нерухому точку, для цього покажемо, що Ψ є відображенням стиску. Виберемо довільні $X, Y \in B_T$, тоді проводячи очевидні оцінки, отримаємо

$$\begin{aligned} E \sup_{t \in [0, T]} \|(\Psi X)(t) - (\Psi Y)(t)\|^2 \leq \\ \leq \beta E \sup_{t \in [0, T]} \|X(t) - Y(t)\|^2, \end{aligned}$$

$$\text{де } \beta = 4(K_U^2 + L^2 K_U^2 + L^2 + T^3 K_A^2 K_U^2 L^2).$$

З умови теореми випливає, що $\beta < 1$, а значить оператор Ψ є оператором стиску і має єдину нерухому точку, котра є розв'язком рівняння (10). Теорему доведено.

Визначимо оператор $\Phi: B_T^2 \rightarrow B_T$ наступним чином

$$\Phi(f, \sigma) = X,$$

$$\begin{aligned} X(t) = & U(t, 0)(x_0 + g(0, x_0)) - g(t, X(t)) - \\ & - \int_0^t U(t, s)A(s)g(s, X(s))ds + \end{aligned} \quad (13)$$

$$+ \int_0^t J(t,s) f(s) ds + \int_0^t U(t,s) \sigma(s) dW(s),$$

де $X(t)$ – розв'язок рівняння (10).

Лема 2 Нехай виконуються умови (4),(5),(6),(7), причому $L < 1/2, K < 1/\sqrt{10}$. Тоді існують додатні сталі $M_\Phi, \overline{M}_\Phi, D_\Phi$, такі, що для довільних $f_1, \sigma_1, f_2, \sigma_2 \in B_T$ виконуються нерівності

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|\Phi(f_1, \sigma_1)(s)\|^2 \leq D_\Phi + \overline{M}_\Phi \int_0^t (E \|f_1(\tau)\|^2 + E \|\sigma_1(\tau)\|^2) d\tau. \quad (14)$$

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|\Phi(f_1, \sigma_1)(s) - \Phi(f_2, \sigma_2)(s)\|^2 \leq M_\Phi \int_0^t (E \|f_1(\tau) - f_2(\tau)\|^2 + E \|\sigma_1(\tau) - \sigma_2(\tau)\|^2) d\tau. \quad (15)$$

Доведення даних нерівностей базується на оцінці лівих частин виразів (14) та (15) з використанням означення оператора Φ та узагальненої леми Гронуолла-Беллмана.

Використаємо метод послідовних наближень Пікара. Побудуємо послідовність $X_n \in B_T$ за наступними рекурентними співвідношеннями

$$X_n(t) = U(t,0)(x_0 + g(0, x_0)) - g(t, X_n(t)) - \int_0^t U(t,s) A(s) g(s, X_n(s)) ds + \int_0^t U(t,s) f(s, X_{n-1}(s)) ds + \int_0^t U(t,s) \sigma(s, X_{n-1}(s)) dW(s), n \geq 1, t \in [0, T]. \quad (16)$$

$X_0(t)$ визначимо як розв'язок рівняння (13) з $f \equiv \sigma \equiv 0$.

Очевидно, що

$X_n = \Phi(f(\cdot, X_{n-1}(\cdot)), \sigma(\cdot, X_{n-1}(\cdot)))$, де Φ – оператор визначений в (13).

Побудуємо оператор $\Pi: B_T \rightarrow B_T$, що діє за правилом

$$(\Pi X)(t) = [\Phi(f(\cdot, X(\cdot)), \sigma(\cdot, X(\cdot)))](t).$$

Лема 3 Нехай виконуються умови леми 2. Тоді існують додатні сталі $D_\Pi, M_\Pi, \overline{M}_\Pi$, такі, що для довільних $X, Y \in B_T$ виконуються оцінки

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|(\Pi X)(s)\|^2 \leq D_\Pi + \overline{M}_\Pi \int_0^t E \sup_{r \in [0,s]} \|X(r)\|^2 ds, \quad (17)$$

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|(\Pi X)(s) - (\Pi Y)(s)\|^2 \leq M_\Pi \int_0^t E \sup_{r \in [0,s]} \|X(r) - Y(r)\|^2 ds. \quad (18)$$

Доведення даної леми легко отримати з леми 2.

Теорема 2 Нехай виконуються умови теореми 1 та леми 2. Тоді рівняння (1) має єдиний сильний розв'язок на відрізку $[0, T]$.

Доведення. Існування.

З побудови послідовності X_n можемо легко отримати, що існує додатна стала C , незалежна від t така, що $E \sup_{s \in [0,t]} \|X_1(s) - X_0(s)\|^2 \leq C^2$. З

вигляду оператора Π , за лемою 3 можемо записати

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|X_{n+1}(s) - X_n(s)\|^2 \leq M_\Pi \int_0^t E \sup_{r \in [0,s]} \|X_n(r) - X_{n-1}(r)\|^2 ds. \quad (19)$$

звідки, інтегруючи останню нерівність маємо, що

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|X_{n+1}(s) - X_n(s)\|^2 \leq C^2 \frac{(M_\Pi T)^n}{n!},$$

з чого слідує фундаментальність послідовності X_n в B_T . Позначимо $X := \lim_{n \rightarrow \infty} X_n$. Переходячи в (16) до границі, отримаємо (9).

Для доведення єдиності припустимо, що X, Y – два розв'язки рівняння (1). За лемою 3

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|X(s) - Y(s)\|^2 \leq M_\Pi \int_0^t E \sup_{r \in [0,s]} \|X(r) - Y(r)\|^2 ds.$$

Останнє виконується тільки тоді, коли

$$E \sup_{s \in [0,t]} \|X(s) - Y(s)\|^2 = 0.$$

Теорему доведено.

Проілюструємо отримані результати на наступному прикладі

Приклад В гільбертовому просторі $H = L_2[0, \pi]$ розглянемо стохастичне рівняння нейтрального типу

$$\begin{aligned} d[x(t, \xi) + b(t, x(t, \xi))] = & \quad (20) \\ = & \left[\int_0^\pi K(\theta, \xi) x(t, \theta) d\theta + p(t, x(t, \xi)) \right] dt + \\ & + q(t, x(t, \xi)) dW(t), \quad t \in [0, T], \\ & x(0, \xi) = x_0(\xi) \in L_2[0, \pi]. \end{aligned}$$

Тут $b(t, x), p(t, x), q(t, x): [0, T] \times R \rightarrow R$ – неперервні функції, для яких виконуються умови (6), (7). $K(\theta, \xi) \in C([0, \pi] \times [0, \pi], R)$. $W(t)$ – вінерівський процес.

Для того, щоб записати рівняння (20) у вигляді (1) введемо функції $g, f, \sigma: [0, T] \times H \rightarrow H$ і оператор $A: H \rightarrow H$ що діють за правилом

$$\begin{aligned} g(t, x)(\xi) &:= b(t, x(\xi)), \\ f(t, x)(\xi) &:= p(t, x(\xi)), \\ \sigma(t, x)(\xi) &:= q(t, x(\xi)), \\ (Ax)(\xi) &:= \int_0^\pi K(\theta, \xi) x(\theta) d\theta. \end{aligned}$$

Таким чином рівняння (20) набуде вигляду (1), (2).

Застосуємо теорему 2 для дослідження існування і єдиності розв'язку отриманого рівняння. Очевидно, що

$$K_A = \int_0^\pi \int_0^\pi K^2(\theta, \xi) d\theta d\xi.$$

З [8] отримуємо, що для $0 \leq s \leq t \leq T$ виконується нерівність

$$\|U(t, s)\| \leq \exp \left\{ \int_s^t \|A(\tau)\| d\tau \right\} = e^{K_A T} =: K_T.$$

Подальше дослідження базується на перевірці виконання нерівностей $L < 1/2, K < 1/\sqrt{10}$ та (12), виконання яких, в даному випадку, гарантує існування і єдиність розв'язку рівняння (20) на інтервалі $[0, T]$.

Список використаних джерел

1. Barbu D., Bocsan G. Approximations to mild solutions of stochastic semilinear equations with non-lipschitz coefficients//Czechoslovak Mathematical Journal, 52 (127) (2002), 87-95 (English)
2. Taniguchi, Takeshi; Liu, Kai; Truman, Aubrey Existence, uniqueness, and asymptotic behavior of mild solutions to stochastic functional differential equations in Hilbert spaces. (English)// J. Differ. Equations 181, No.1, 72-91 (2002).
3. Станжицький О.М. Обмежені і періодичні розв'язки лінійних та слабко нелінійних стохастичних систем Іто//ТБіМС, в.68 (2003), 155-163.
4. Kolmanovskii, V.; Koroleva, N.; Maizenberg, T.; Mao, X.; Matasov, A. Neutral stochastic differential delay equations with Markovian switching. (English) //Stochastic Anal. Appl. 21, No.4, 819-847 (2003).
5. Mao, Xuerong Asymptotic properties of neutral stochastic differential delay equations. (English)// Stochastics Stochastics Rep. 68, No.3-4, 273-295 (2000).
6. Rodkina, A.E. On existence and uniqueness of solution of stochastic differential equations with heredity. (English) //Stochastics 12, 187-200 (1984).
7. Liu, Kai; Xia, Xuwen On the exponential stability in mean square of neutral stochastic functional differential equations. (English) //Syst. Control Lett. 37, No.4, 207-215 (1999).
8. Далецкий Ю.Л., Крейн М.Г. Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве. – М.:Наука, 1970 –534 с.
9. Дороговцев А.Я. Периодические и стационарные режимы бесконечномерных детерминированных и стохастических динамических систем. –К.:Вища школа, 1992 –319 с.
10. Царьков Е.Ф. Случайные возмущения функционально дифференциальных уравнений. –Рига:Зинатне, 1989. –421с.

Надійшла до редколегії 12.04.2007

УДК 514.77

Віктор С. Лісняк, к.ф.-м.н., доцент

Неголономна геометрія в її головних висновках

Наведено узагальнене означення неголономного многовиду як поля геометричних об'єктів спеціального походження. Складено системи визначальних диференціальних рівнянь ряду неголономних многовидів і вказано їхні найважливіші інваріанти. З'ясовано головні властивості неголономних многовидів.

Ключові слова: комплекс, конгруенція, неголономний многовид.

E-mail: v-lisnyak@univ.kiev.ua

Перспективність математичного моделювання досить широких класів неголономних фізико-механічних систем загострює інтерес до вихідних понять самої неголономної геометрії [1,2,9]. У цьому аспекті особливого значення набувають уніфікація та узагальнення понять (різних) неголономних многовидів і з'ясування їхніх універсальних властивостей [5,7,15].

Неголономні аналоги класичних многовидів є алгоритмічно зручним засобом унаочнення новітніх математичних моделей конкретних сво-

V.S. Lisnyak, Cand. Sci (Phys.-Math.)
Associate Professor

Aholonomic geometry in its basic conclusions

Generalized notion of aholonomic manifold as a field of geometrical objects of special origin is given. The systems of determining differential equations of certain aholonomic manifolds are composed and the main invariants of these manifolds are built. Main properties of aholonomic manifolds are ascertained.

Key Words: aholonomic manifold, complex, congruence.

люючих (зокрема рухомих) суцільних середовищ [36,37]. Тут здійснюється уніфіковане дослідження найприродніших неголономних многовидів.

§ 1. Класична неголономна поверхня

1. Рівняння неголономної поверхні. Найперша задача неголономної геометрії зводилася до диференціально-геометричного тлумачення загального розв'язку лінійного пфафова рівняння

$$\omega \equiv P(x, y, z)dx + Q(x, y, z)dy + R(x, y, z)dz = 0. \quad (1)$$

За невиконання для нього умови Стокса

$$S \equiv P(\partial Q / \partial z - \partial R / \partial y) + Q(\partial R / \partial x - \partial P / \partial z) + R(\partial P / \partial y - \partial Q / \partial x) \neq 0, \quad (2)$$

воно гарантовно має лише множину M інтегральних кривих. Саме вона початково і називалася неголономною поверхнею Σ , а (1) її рів-

нянням.

Неголономна поверхня Σ взаємновизначальна з полем Π площини π

$$P(x, y, z)(X - x) + Q(x, y, z)(Y - y) + R(x, y, z)(Z - z) = 0 \quad (3)$$

(дотичних до ∞^1 інтегральних поверхонь рівняння (1), якщо (2) задовільняється) та з полем E ортів e векторного поля $a = Pi + Qj + Rk$; (4) для нього умова Стокса (2) набуває вигляду $a \cdot \text{rot } a = 0$. (5)

Задля зручності можливих інженерно-фізичних застосувань неголономну поверхню доцільно досліджувати у термінах одиничного векторного поля

2. Рухомий орторепер евклідового простору. Нехай в E_3 маємо деякий орторепер $Q = (A, e_1, e_2, e_3)$ з радіус-вектором A його вершини A та з базисними ортами e_1, e_2, e_3 .

Запишемо найзагальніші дериваційні рівняння (диференціальні рівняння руху) цього ортореперу Q як

$$dA = \omega^r e_r, \quad de_i = \omega_i^r e_r, \quad \alpha_r = 1, 2, 3 \quad (6)$$

Тут відносні (інфінітезимальні) компоненти ω^a та ω_m^c (зміщень) реперу Q підпорядковані рівнянням структури простору E_3 :

$$D\omega^a = [\omega^s \omega_s^a], \quad D\omega_s^a = [\omega_s^r \omega_r^a] \quad (7)$$

Наслідком евклідовості E_3 є алгебраїчні залежності

$$\omega_m^s + \omega_s^m = 0 \quad (8)$$

3. Неголономна поверхня як поле напрямків. Ітимемо від рівнянь класичної двовимірної поверхні у просторі E_3 до побудови диференціальних рівнянь її неголоного аналогу в ньому.

Класична поверхня S визначає своїм першим диференціальним околom двовимірне поле напрямків, занурене в E_3 . Неголономною поверхнею ми назвемо тривимірне поле напрямків у E_3 .

$$\Theta \equiv -\omega_a^3 + a_{ai} \omega^i = 0,$$

Ось так класична двовимірна поверхня породжує вже тривимірну неголономну поверхню – трипараметричний многовид (∞^1) напрямків.

4 Основні диференціальні рівняння поля напрямків. Нехай простір E_3 зараз віднесений до рухомого ортореперу $Q = (A; R)$ з вершиною (визначуваною її радіус-вектором) A та з о.н.б. $R \equiv (e_1, e_2, e_3)$

Кожний напрямок у просторі E_3 зручно задати йому колінеарним ортом e . Тому і поля напрямків зручно задавати полями відповідних їм ортів.

Вважатимемо заданим у деякій області D з E_3 поле E одиничного вектору (орту) e . У його супровідному 0-репері Q векторне поле E має зображення

$$e = e_3 \quad (9)$$

Основні диференціальні рівняння поля E у Q запишуться так:

$$D\Theta_i \equiv 0 \pmod{\Theta_j} \quad (10)$$

Зовнішні продовження цієї системи приводять до рівнянь

$$\Theta_{ai} \equiv da_{ai} - a_{\beta i} \omega_a^\beta - a_{ai} \omega_i^k - a_{aij} \omega^j = 0, \quad (11)$$

$$\Delta a_{aij} \wedge \omega^j \equiv 0 \pmod{\Theta_{\beta i}, \Theta_{ip}} \quad (12)$$

Тут усі компоненти a_{aij} фундаментальних геометричних об'єктів поля E симетричні за всіма їхніми латинськими індексами.

5. Зображення для інваріантних

$$I_1 = a_{12} - a_{21}, \quad I_2 = a_{11} + a_{22}, \quad I_3 = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21},$$

$$I_4 = (a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22})^2 + (a_{13}a_{21} - a_{11}a_{23})^2, \quad I_5 = a_{13}^2 + a_{23}^2 \quad (13)$$

Тут поля $I_1, \dots, I_5$ утворюють повну систему алгебраїчно незалежних (як функцій компонент

ф у н к ц і й. Для довільного векторного поля E прямою перевіркою за допомогою (6) переконуємося в абсолютній інваріантності полів наступних функцій [14] –

$$I_1 = e_3 \operatorname{rot} e_3, \quad I_2 = \operatorname{Sp} T = -\operatorname{div} e_3, \quad I_3 = \det T,$$

$$I_4 = (a|_\pi)^2, \quad I_5 = (de_3|_{dA \perp \pi})^2 / (dA|_{dA \perp \pi})^2 \quad (14)$$

– зручні обчислювальні формули для абсолютних інваріантів (8) поля E .

Зафіксовані тут рівностями (10) – (14) поняття та факти в однаковій мірі стосовні неголономних поверхонь, полів напрямків та її полів ортів. Диференціальні геометрії усіх їх трьох тотожні з точністю до термінології.

§ 2 Узагальнене означення неголоногого многовиду

Існує підхід [3, 16], за яким неголономний многовид можна тлумачити і як певний розпо-

діл геометричних елементів. Найістотніше там таке

Кожний m -вимірний многовид, занурений у N -вимірний простір зображення r -параметричної групи Лі G , прохожий через фіксовану точку (твірний елемент простору), породжує у згаданій точці фундаментальний об'єкт першого порядку. Цей об'єкт (включаючи і відповідну точку) називається m -вимірним дотичним елементом.

Нехай структурні форми твірного елементу простору мають вигляд

$$\Theta^J \equiv dX^J - \xi_{\beta}^J(X) \omega^\beta, \quad J, K, \dots = 1, \dots, N; \quad A, B, \dots = 1, \dots, r \quad (1)$$

У цьому разі система форм $\{\Theta^J, \Delta \Lambda_J^\sigma\}$, де вжито позначення виду

$$\Delta \Lambda_m^\alpha \equiv d\Lambda_m^\alpha + (\Lambda_k^\alpha \frac{\partial \xi_A^k}{\partial X^m} - \Lambda_m^\beta \frac{\partial \xi_A^\beta}{\partial X^\alpha} + \Lambda_k^\alpha \Lambda_m^\beta \frac{\partial \xi_A^k}{\partial X^\beta} - \frac{\partial \xi_A^\alpha}{\partial X^m}) \omega^A, \quad (2)$$

є системою структурних форм m -вимірного дотичного елементу.

Многовид дотичних елементів є розшарованим простором, де базою слугує вихідний простір $\{\Theta^J\}$, а шарами – жмутки дотичних елементів.

Тоді розподілом дотичних елементів називається переріз у розшарованому просторі цих елементів. Розподіл плоских елементів називається неголономним многовидом (нерідко одноіменним з вихідним). Це введення поняття неголономного многовиду не тільки математично цілком досконале, а й досить алгоритмічне і виглядає значно сучаснішим.

У попередньому підході побудова неголономного многовиду звелася до поширення поля $\mu_1(M)$ фундаментального геометричного об'єкту першого порядку (ф.г.о.-1) μ_1 деякого зануреного в однорідний простір S многовиду M на весь S , що привело до утворення поля $\mu_1(S)$. Це ж поле $\mu_1(S)$ і дістало назву неголономного (аналогу) многовиду M . В окремих випадках поля виду $\mu_m(S)$ можна інтерпретувати як поля (відносних) функціональних інваріантів або фігур простору S .

Наведене означення неголономного многовиду (як поля) можна узагальнити відразу у трьох напрямках. Один із них полягає у взятті замість поля об'єкту $\mu_1(M)$ поля $\mu_m(M)$ ф.г.о. деякого порядку m многовиду M . За другим $\mu_m(M)$ поширюється не на увесь простір S , а тільки на деякий (із тим самим що й у M твірним елементом) многовид $N \subseteq S$. Нарешті, можна замість $\mu_m(M)$ поширювати деякий його (чи навіть охоплений ним) підоб'єкт $\tilde{\mu}_m(M)$. Інколи поля $\tilde{\mu}_m(S)$ можна тлумачити як поля (відносних) функціональних інваріантів чи фігур із S .

Узагальнене (розширене) означення неголономного многовиду як певного поля об'єктів чи фігур створює ряд нових понятійних і конструкційних інваріантних можливостей. Наведемо два відповідних приклади.

§ 3. Неголономні криві та лінійчаті поверхні

Криві та лінійчаті поверхні широко залучаються при дослідженнях складніших класичних многовидів. Наведемо ж їхні найелементарніші

неголономні аналоги.

Плоскі та просторові криві не мають функціональних чи векторних інваріантів у першому диференціальному околі ні у просторі E_2 ні в E_3 . Вони там визначають лише локальні інваріантні напрями (їхніх дотичних). А тому в обраній у цьому дослідженні (як і в [10-12]) геометричній схемі їхніми неголономними аналогами (кожної з них) зручно вважати (відповідно плоске та просторове) поля напрямків, а то й просторове для обох.

Для лінійчатої ж поверхні справа не є настільки однозначною, бо цей многовид можна розглядати і як одновимірний лінійчатий і як двовимірний точковий. Ці дві вихідні позиції приводять і до двох істотно різних неголономних аналогів класичної лінійчатої поверхні. Це вказує на залежність і взагалі неголоном(н)ізації від вибору твірного елементу.

§ 4. Загальні властивості неголономних многовидів

Наведені у [15] відповідні зауваження і приклади провокують досить загальні висновки. Відзначимо тут тезово кілька принципових моментів:

1. Неголономний многовид не визначає однозначно свій голономний прототип. Так поле прямих в E_3 може походити як від просторової кривої, так і від плоскої.

2. Чи кожне групо-інваріантне поле можна розглядати як неголономний многовид? Точніше, так як же з'ясувати чи є поле деякого конкретного об'єкту W неголономним многовидом? Неголономний многовид є поняття відносне. Щоб так називати W повинен існувати такий голономний многовид M , що поширення поля $\mu_m(M)$ на Q дало саме $\mu_m(Q) \equiv W$. Тоді з'являються хоч деякі підстави називати W (але взагалі й не тільки його) неголономним M .

3. Нехай маємо деякий занурений многовид H і його ф.г.о.-1 $h^{(1)}$ та ф.г.о.-2 $h^{(2)}$. Ними визначаються відповідно розподіли $H^{(1)}$ й $H^{(2)}$. Розподіл $H^{(1)}$ має свій ф.г.о.-1 $(H^{(1)})^{(1)}$. Взагалі й $(H^{(1)})^{(1)} \neq H^{(2)}$.

4. Означення неголономного многовиду за допомогою голономного істотно залежить від фундаментальної групи G простору. Так навіть і вже плоска крива залежно від евклідовості

чи проективності її площини породжує різні неголономні многовиди (відповідності) $H^{(2)}$.

5. Неголономний многовид, побудований на ґрунті теж неголономного, у загальному випадку не співпадає з вихідним многовидом: навіть $(H^{(1)})^{(1)} \neq H^{(1)}$.

6. Групи G та g взагалі не комутують відносно Σ .

Що тут мається на увазі? Інколи можна вивчати властивості розподілу Σ й у просторі з іншою фундаментальною групою g . Навіть нехай маємо деякий точковий многовид σ в E_3 . Побудуємо йому відповідний неголономний многовид (аналог) Σ в E_3 і дослідимо комплекс K його проективно інваріантних властивостей. Тепер задамо цей самий многовид σ у проективному просторі P_3 і побудуємо йому відповідний неголономний многовид Θ у P_3 . Потім з'ясуємо комплекс L евклідово-інваріантних властивостей Θ . Виявляється, що у загальному випадку $K \neq L$. Таким чином, заміна (транзитивних фундаментальних) груп їхніми підгрупами чи навпаки і неголономізація взагалі не переставні.

7. Означення неголономного многовиду не залежить від глибини канонізації супровідного реперу його голономного прототипу. Це впли-

$$D\omega^r = [\omega^r \omega_s^r] + Q_{sm}^r [\omega^s \omega^m],$$

простору евклідової зв'язності W_3 без кривини але зі скрутом [3]. Тут $Q_{hk}^i = -Q_{kh}^i$ і є компонентами тензору Q скруту W_3 в орторепері $R \equiv (A; e_j)$.

Нехай вихідне рівняння 2-поверхні S у W_3 має вигляд

$$\omega^3 = 0. \quad (2)$$

$$\omega_1^3 = (x_{11} - Q_{11}^3)\omega^1 + (x_{12} - Q_{12}^3)\omega^2,$$

чи, дещо лаконічніше,

$$\omega_1^3 = y_{11}\omega^1 + y_{12}\omega^2,$$

Тут гарантовно $y_{12} \neq y_{21}$, бо $x_{12} = x_{21}$ за лемою Картана, а $Q_{12}^3 = -Q_{21}^3$ й інваріантність $Q_{12}^3 = 0$ внаслідок тензорності Q_{ij}^k викликає $Q_{hk}^i \equiv 0$, що суперечить припущеній наявності для W_3 його (ненульового) скруту.

Але ж систему (5) можна розглядати і як партикуляризацію за інваріантною умови $y_{1,3} \equiv 0$ пфафовой системи

$$\omega_\pi^3 = y_{\pi 1}\omega^1. \quad (6)$$

ває з інваріантності полів геометричних об'єктів.

8. Для довільного натурального числа k існують такі натуральні m та n , що m -поверхня S_m у P_n має порядок свого канонічного реперу не нижчий від k . Це ж утруднює введення зручного уніфікованого поняття відповідної проективної неголономної поверхні.

Переважно ці твердження можна довести і прямою побудовою (частково вже наведених) контрприкладів для їм протилежних тверджень.

9. Об'єкт Картана є невиродженим перетворенням фундаментального геометричного об'єкту того самого порядку. Це технічно зручно при аналітичному оформленні геометрично добре уявлюваних побудов з зануреними многовидами взагалі, а не тільки з неголономними.

10. При партикуляризації голономного многовиду S відповідний йому неголономний аналог NS теж виходить часткового виду й успадковує родову назву S . Так і мінімальна класична поверхня і мінімальна неголономна поверхня характеризуються нульовістю середньої кривини H , але у першому випадку це функція двох змінних, а у другому – трьох.

§ 5. Утяті зовнішні продовження пфафових систем

Замість рівнянь структури (1.7) й (1.8) евклідового простору E_3 (відносно ортореперу Q в ньому) звернемося тепер до рівнянь структури

$$D\omega_s^r = [\omega_s^r \omega_m^r], \quad \omega_m^s + \omega_s^m = 0 \quad (1)$$

Тоді на підставі формул (1) дістанемо залежність $D\omega^3 = [\omega^3 \omega_s^3] + Q_{sm}^3 [\omega^s \omega^m]$. Тому критерій Фробеніуса $D\omega^3 \equiv 0 \pmod{\omega^3}$ цілковитої інтегровності (2) набуває вигляду зовнішнього квадратичного рівняння $[\omega^3 \omega_s^3] + Q_{\alpha\tau}^3 [\omega^\alpha \omega^\tau] \equiv 0$, (3) де $\alpha, \tau = 1, 2$. Розкриваючи (3) одержуємо

$$\omega_2^3 = (x_{21} - Q_{21}^3)\omega^1 + (x_{22} - Q_{22}^3)\omega^2 \quad (4)$$

$$\omega_2^3 = y_{21}\omega^1 + y_{22}\omega^2. \quad (5)$$

визначальної для істотно неголономної поверхні в E_3 , утвореної інтегральними кривими рівняння (2). Оскільки (5) одержується з (6) візуально певним утинанням її рівнянь, то (5) можна називати результатом утятого зовнішнього диференціального продовження однорівнянної системи (2). Подібно утято продовжуються й загальніші пфафові системи.

Принциповою ж підставою можливості диференціально-геометричного їх дослідження є

справдження інваріантних функціональних тождеств виду $y_{\lambda\lambda} \equiv 0$.

З іншого боку, це доводить що загальна неголономна поверхня Σ може мати її визначальними рівняння виду (2) + (5), але не в E_3 , а у просторі W_3 . В E_3 ж її визначальні рівняння – це (6). Вони зводяться до (5) лише для характеризованого умовою $y_{\lambda\lambda} \equiv 0$ часткового класу Σ . Не виключені й інші інтерпретації таких утятих зовнішніх продовжень до рівняння (3), як до рівняння вихідного зануреного многовиду W .

§ 6. Граничні випадки наявності інтегральних многовидів

Спочатку відзначимо що рівняння (1.1) може не задовільняти умову Стокса (2.1.) і все ж мати інтегральні поверхні. Це буде у тому випадку, коли тотожність $S \equiv 0$ в області задання (1.1) не справджується, а ось рівняння $S(x, y, z) = 0$ визначає зокрема якусь поверхню, інтегральну для рівняння $\omega = 0$. Принципово не виключена можливість наявності й зліченної множини таких двовимірних інтегральних многовидів.

Іншим граничним випадком виняткової інтегровності може бути той, коли, як не цілком інтегровна, пфафова система не допускає інтегральних многовидів максимального виміру, але має їх деяких проміжних між максимальним і тривіальним вимірами. Обидва випадки поєднанні.

Перші підходи до неголономних аналогів многовидів здійснені мною зокрема у [4-6] й оглянуті у [7-13]. Обчислювальні формули для їхніх інваріантів у репері нульового порядку наведені у публікаціях [4, 10, 12]. В їх аналітичній побудові мені істотну допомогу надала Г.С.Польща.

Підкреслимо, що історично усталений термін "неголономна геометрія (зануреного в однорідний простір S) многовиду M " означає "диференціальна геометрія у S неголономного аналогу NM многовиду M ", бо і термін "неголономний (занурений в однорідний простір S) многовид M " означає всього лише "неголономний аналог NM многовиду M у S ".

Для перенесення цих побудов на проєктивні простори зручно використати дослідження з проєктивних розподілів точок Г.С. Польщі [5, 18-35].

Концептно найголовнішим у цій статті є побудова ряду загальних висновків щодо диференціально-геометричних властивостей неголономних многовидів довільного походження – з довільним голономним їхнім прототипом – на базі триаспектного узагальнення самого поняття неголономного многовиду. Науково-технологічний висновок полягає у тім, що дослідження него-

лономних многовидів краще розпочинати з побудови диференціальних інваріантів їхніх голономних прототипів [4, 6, 8]. Якщо ж деякий інваріант має кілька способів побудови – кілька його характеристичних властивостей, то тоді можна прослідкувати і за можливим їх розщепленням при неголономізації цього многовиду.

Фрагменти заторкнутих тут вище загальних питань можуть зокрема стати також предметом самостійної науково-дослідної роботи студентів.

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. Лантев Г.Ф. Распределение касательных элементов // Тр. Геометрического семинара. Ин-т информ. АН СССР, 1971, 3, 29-48.
4. Лісняк В.С. Геометрія векторних полів в движущемся твердом теле – М., 1975. – 56 с. / Деп. в ВИНТИ 20.10.75, № 3228.
5. Лісняк В.С. Дослідження Г.С. Польщі з геометрії однорідних просторів K_n , 1983 – 1993. – 22 с. /Деп. у ДНТБ України 05.07.93, № 1373.
6. Лісняк В.С. Алгебраїчна побудова інваріантів прямолінійної конгруенції / Вісник Київськ. ун-ту, с. фіз.-м. н., вип. № 2, 2001 р., с. 148-158.
7. Лісняк В.С. Дослідження з неголономної геометрії. – 1994. – 23 с. /Деп. у ДНТБ України 20.07.94, № 1318.
8. Лісняк В.С. Метричні інваріанти комплексу прямих / Вісник Київського університету, серія: фіз.-мат. науки, вип. № 4, 2001 р., с. 124-129.
9. Лісняк В.С. З історії неголономної геометрії // IX Міжнар. наук. конференція. Матеріали конф-ї. – Київ, КПІ, 2002. – с. 518.
10. Лісняк В.С. Неголономні конгруенції евклідового простору / Вісник Київськ. ун-ту, серія: фіз.-мат. науки, вип. № 2, 2004 р., с. 129-136.
11. Лісняк В.С. Неголономна поверхня – це не розподіл // IX Міжнародна наук. Конференція. Матеріали конф-ї. – Київ, КПІ, 2004. – с. 440.
12. Лісняк В.С. Неголономні комплекси прямих // Вісник Київськ. ун-ту, серія: фіз.-мат. науки, вип. № 3, 2004 р., с. 137-143.
13. Лісняк В.С. Диференціальна геометрія неголономних аналогів класичних многовидів // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. Вип. 4, 2006 р., (8 с.)
14. Лісняк В.С. Диференціальна геометрія векторного поля // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-матем. науки. Вип. 1, 2006 р., 84-92.

15. Лісняк В.С. Неголономна геометрія в її основних поняттях // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. н. Вип. 1, 2007 р., с. (7 с.).

16. Остиану Н.М., Рыжков В.В., Швейкин П.И. Очерк научных исследований Германа Федоровича Лаптева. Тр. Геометр. семинара. Институт информ. АН СССР, 1973, 4, 7-70.

17. Польща Г.С., Лісняк В.С. Отображение двух распределений // Теоретические и прикладные вопросы алгебры и дифференциальных уравнений. – К.: Ин-т математики АН УССР, 1976. – с. 108.

18. Польща Г.С., Лісняк В.С. Інтегральна геометрія та поліметричні системи // Вісник Київськ. ун-ту, серія: фіз.-мат. науки, випуск № 2, 1996 р., с. 70 – 76.

19. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проективно-диференціальна планіметрія точок та прямих // Вісник Київськ. ун-ту, серія: фіз.-мат. науки, вип. № 2, 1997 р., с. 83 – 88.

20. Польща Г.С., Лісняк В.С. Диференціальні рівняння проєктивних векторних полів // Сьома міжнар. наук. конференція. Матеріали конф-ї. – Київ, КПІ, 1998. – с. 402.

21. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проективно-диференціальна геометрія мереж // Вісник Київськ. ун-ту, Серія: фіз.-матем. науки. Вип. №3, 1998 р., с. 82-86.

22. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проективно-диференціальна планіметрія векторного поля // Вісник Київськ. ун-ту, Серія: фіз.-матем. науки, Вип. №3, 1999 р., с. 116-123.

23. Польща Г.С., Лісняк В.С. Перетворення множин змінних проєктивних релерів // VIII Міжнародна Наукова Конференція ім. акад. М. Кравчука. Матеріали конференції. КПІ. – Київ, 2000. – с. 350.

24. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проективно-диференціальна геометрія розподілів точок // Вісник Київськ. ун-ту, серія: фіз.-мат. науки, випуск № 2, 2000 р., с. 91 – 101.

25. Польща Г.С., Лісняк В.С. Нелінійні зображення груп об'єктами відповідностей // International Conference "Dynamical system modelling and stability investigation" Thesis of conference reports. Kyiv – 2001. – с. 87.

26. Польща Г.С. Групові властивості проєктивних автоморфізмів // Український матема-

тичний конгрес – 2001. Топологія і геометрія. Тези доповідей, Київ – 2001. – с. 27, 28.

27. Польща Г.С., Лісняк В.С. Геометричні теми курсу вищої математики // Український математичний конгрес – 2001. Методи викладання та історія математики. Тези доповідей, Київ – 2001. – с. 19, 20.

28. Польща Г.С., Лісняк В.С. Однопараметричні множини проєктивних розподілів // International Conference "Dynamical system modelling and stability investigation". Thesis of conference reports. Kyiv – 2001. – с. 88.

29. Польща Г.С., Лісняк В.С. Диференціальна геометрія розподілів точок у проєктивному просторі // Вісник Київськ. ун-ту, серія: фіз.-мат. науки, випуск № 2, 2001 р., с. 170 – 173.

30. Польща Г.С., Лісняк В.С. Диференціальна геометрія розподілів точок у проєктивному просторі. На стор. 154-163 у кн.: Лісняк В.С. Лекції з лінійної алгебри. Навчальний посібник. – К.: Київський університет, 2001. – 172 с.

31. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проміжна інтегровність пфаффових систем // Теорія еволюційних рівнянь. Міжнародна конференція. П'яті Боголюбовські читання. – Кам'янець-Подільський, 2002. – с. 142.

32. Польща Г.С., Лісняк В.С. Імовірнісні декартово-інваріантні міри на полях // IX Міжнар. наук. конференція. Матеріали конф-ї. – Київ, КПІ, 2002. – с. 447.

33. Польща Г.С., Лісняк В.С. Інтегральні інваріанти образів проєктивного простору // Обчислювальна та прикладна математика. Збірка тез Міжнародної конференції. – Київ: Київський університет, 2002. – с. 78.

34. Польща Г.С., Лісняк В.С. Інтегральна геометрія як зміст спецкурсу // IX Міжнародна наукова конференція. Матеріали конф-ї. – Київ, КПІ, 2002. – с. 538.

35. Польща Г.С., Лісняк В.С. Перші кроки розвитку інтегральної геометрії // IX Міжнародна наукова конференція. Матеріали конф-ї. – Київ, КПІ, 2002. – с. 539.

36. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошной среды. – М.: Мир, 1975. – 532 с.

37. Шутц Б. Геометрические методы математической физики. – М.: Мир, 1984. – 304 с.

Надійшла до редколегії 23 січня 2007 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

Про структуру амплітудних визначальних рівнянь непружних п'єзоелектричних тіл при гармонічному навантаженні

Досліджується структура амплітудних визначальних рівнянь непружних п'єзоелектричних тіл при гармонічному навантаженні з використанням гіпотези одночастотності електромеханічних коливань та умови інваріантності амплітуд відносно перетворення зсуву в часі.

Ключові слова: амплітудні визначальні рівняння, гармонічне навантаження, п'єзоелектричні тіла.

Однією з найбільш продуктивних гіпотез в теорії нелінійних коливань є гіпотеза одночастотності [3]. У випадку стаціонарних коливань непружних п'єзоелектричних тіл [1] ця гіпотеза означає наступне: припускається, що в результаті гармонічного електромеханічного навантаження з круговою частотою ω в об'ємі п'єзоелектричного тіла встановлюється напружено-деформований і електричний стан вигляду

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= \sigma'_{ij} \cos \omega t - \sigma''_{ij} \sin \omega t, & \epsilon_{ij} &= \epsilon'_{ij} \cos \omega t - \epsilon''_{ij} \sin \omega t, \\ E_i &= E'_i \cos \omega t - E''_i \sin \omega t, & D_j &= D'_j \cos \omega t - D''_j \sin \omega t.\end{aligned}\quad (1)$$

Деякі висновки про точність розрахунків нелінійних стаціонарних коливань непружних тіл, виконаних з припущенням одночастотності, можна знайти, наприклад, в оглядовій статті [5]. Особливо точно одночастотний режим витримується при резонансних коливаннях непружних тіл.

Прийmemo за незалежні змінні складові деформації $\epsilon'_{ij}, \epsilon''_{ij}$ і складові вектора індукції електричного поля D'_j, D''_j . Тоді складові механічного напруження $\sigma'_{ij}, \sigma''_{ij}$ і складові вектора напруженості електричного поля E'_i, E''_i розглядаються як тензорні і векторні функції незалежних змінних

$$\begin{aligned}\sigma'_{ij} &= \sigma'_{ij}(\epsilon'_{kl}, \epsilon''_{kl}, D'_k, D''_k), & \sigma''_{ij} &= \sigma''_{ij}(\epsilon'_{kl}, \epsilon''_{kl}, D'_k, D''_k), \\ E'_i &= E'_i(\epsilon'_{kl}, \epsilon''_{kl}, D'_k, D''_k), & E''_i &= E''_i(\epsilon'_{kl}, \epsilon''_{kl}, D'_k, D''_k).\end{aligned}\quad (2)$$

V.V. Mikhaileenko, D.Sci. (Phys.-Math.),
V.O. Pyatetsky, Cand.Sci (Phys.-Math.),
O.V. Lushchikov, PhD student

On the structure of amplitude constitutive equations for non-elastic piezoelectric solids under harmonic loading

In this paper the structure of amplitude constitutive equations for non-elastic piezoelectric solids under harmonic loading is analyzed under the hypotheses of one-frequency electromechanical oscillations and time-shift invariance of amplitudes.

Key Words: amplitude constitutive equations, harmonic loading, piezoelectric solids.

При такому підході нелінійна поведінка п'єзоелектричного тіла враховується нелінійністю залежностей (2). Ці залежності повинні задовольняти умові інваріантності відносно зсуву в часі, тобто відносно заміни в (1) ωt на $\omega t + \varphi$. Цю умову можна записати в символьному матричному вигляді

$$QS(A) = S(QA) \quad (3)$$

де

$$S = (\sigma'_{ij}, \sigma''_{ij}, E'_i, E''_i)^T, \quad A = (\epsilon'_{ij}, \epsilon''_{ij}, D'_i, D''_i)^T.$$

$$Q = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

Далі вважаємо функції (2) диференційовними по $\epsilon'_{ij}, \epsilon''_{ij}, D'_i, D''_i$. Тоді шляхом виключення параметра φ рівності (3) можна записати в диференціальній формі

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{\sigma}_{ij}}{\partial \epsilon'_{kl}} \epsilon''_{kl} - \frac{\partial \tilde{\sigma}_{ij}}{\partial \epsilon''_{kl}} \epsilon'_{kl} + \frac{\partial \tilde{\sigma}_{ij}}{\partial D'_k} D''_k - \frac{\partial \tilde{\sigma}_{ij}}{\partial D''_k} D'_k + i \tilde{\sigma}_{ij} &= 0, \\ \frac{\partial \tilde{E}_i}{\partial \epsilon'_{kl}} \epsilon''_{kl} - \frac{\partial \tilde{E}_i}{\partial \epsilon''_{kl}} \epsilon'_{kl} + \frac{\partial \tilde{E}_i}{\partial D'_k} D''_k - \frac{\partial \tilde{E}_i}{\partial D''_k} D'_k + i \tilde{E}_i &= 0,\end{aligned}\quad (4)$$

де введені позначення

$$\bar{\sigma}_{ij} = \sigma'_{ij} + i\sigma''_{ij}, \quad \bar{E}_k = E'_k + iE''_k, \quad i = \sqrt{-1}. \quad (5)$$

Розглянемо диференціальне рівняння першого порядку

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \varepsilon'_{kl}} \varepsilon''_{kl} - \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \varepsilon''_{kl}} \varepsilon'_{kl} + \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial D'_k} D''_k - \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial D''_k} D'_k = 0, \quad (6)$$

де $\bar{\Phi} = \Phi_1 + i\Phi_2$ - комплекснозначна функція 18 дійсних змінних $\varepsilon'_{kl}, \varepsilon''_{kl}, D'_k, D''_k$. Записавши відповідну характеристичну систему або безпосередньою підстановкою в рівняння (6), легко переконатись, що будь-яка з величин

$$\Gamma_{ijk} = \varepsilon'_{ij} \varepsilon'_{kl} + \varepsilon''_{ij} \varepsilon''_{kl}, \quad \Gamma_{ijk} = \varepsilon'_{ij} D'_k + \varepsilon''_{ij} D''_k, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{kl} &= D'_k D'_l + D''_k D''_l, \\ \hat{\Gamma}_{ijk} &= \varepsilon'_{ij} \varepsilon''_{kl} - \varepsilon''_{ij} \varepsilon'_{kl}, \quad \hat{\Gamma}_{ijk} = \varepsilon'_{ij} D''_k - \varepsilon''_{ij} D'_k, \quad (8) \\ \hat{\Gamma}_{kl} &= D'_k D''_l - D''_k D'_l \end{aligned}$$

є частинним інтегралом рівняння (6).

Величини (7) і (8) можна записати в термінах повних амплітуд і зсувів фаз

$$\begin{aligned} \Gamma_{ijk} &= \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \cos(\varphi_{kl}^{\varepsilon} - \varphi_{ij}^{\varepsilon}), \quad \Gamma_{ijk} = \varepsilon_{ij} D_k \cos(\varphi_k^D - \varphi_{ij}^{\varepsilon}), \\ \Gamma_{kl} &= D_k D_l \cos(\varphi_l^D - \varphi_k^D), \quad \hat{\Gamma}_{ijk} = \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \sin(\varphi_{kl}^{\varepsilon} - \varphi_{ij}^{\varepsilon}), \quad (9) \\ \hat{\Gamma}_{ijk} &= \varepsilon_{ij} D_k \sin(\varphi_k^D - \varphi_{ij}^{\varepsilon}), \quad \hat{\Gamma}_{kl} = D_k D_l \sin(\varphi_l^D - \varphi_k^D), \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= \sqrt{\varepsilon_{ij}^{\prime 2} + \varepsilon_{ij}^{\prime \prime 2}}, \quad D_k = \sqrt{D_k^{\prime 2} + D_k^{\prime \prime 2}}, \quad (10) \\ \text{tg } \varphi_{ij}^{\varepsilon} &= \varepsilon_{ij}^{\prime \prime} / \varepsilon_{ij}^{\prime}, \quad \text{tg } \varphi_k^D = D_k^{\prime \prime} / D_k^{\prime} \end{aligned}$$

і внаслідок цього виразити через 9 амплітуд ε_{ij}, D_k і 8 зсувів фаз, наприклад, $\varphi_{ij}^{\varepsilon} - \varphi_{11}^{\varepsilon}, \varphi_k^D - \varphi_{11}^D$ (всього 17 незалежних змінних). Довільна функція цих 17 змінних є загальним розв'язком рівняння (6). Разом з тим, цей загальний розв'язок далі зручніше зображати у вигляді довільної функції

$$\bar{\Phi} = \bar{\Phi}(\Gamma_{ijk}, \Gamma_{ijk}, \Gamma_{kl}, \hat{\Gamma}_{ijk}, \hat{\Gamma}_{ijk}, \hat{\Gamma}_{kl}). \quad (11)$$

Очевидно, що аргументи в (11) не є незалежними. Наприклад, легко переконатись в справедливості рівностей

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_{ijk} \hat{\Gamma}_{pqrs} &= \Gamma_{ijpq} \Gamma_{klrs} - \Gamma_{ijrs} \Gamma_{klpq}, \\ \hat{\Gamma}_{ijk} \hat{\Gamma}_{pqk} &= \Gamma_{ijpq} \Gamma_{kr} - \Gamma_{ijr} \Gamma_{pqk}, \quad (12) \\ \hat{\Gamma}_{kl} \hat{\Gamma}_{pq} &= \Gamma_{kp} \Gamma_{lq} - \Gamma_{kq} \Gamma_{lp}. \end{aligned}$$

Розглянемо співвідношення

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{ij} &= \bar{C}_{ijkl}^D(\cdot) \bar{\varepsilon}_{kl} + \bar{h}_{kij}(\cdot) \bar{D}_k, \\ \bar{E}_k &= \bar{h}_{kij}^*(\cdot) \bar{\varepsilon}_{ij} + \bar{\beta}_{kl}^{\varepsilon}(\cdot) \bar{D}_l, \end{aligned} \quad (13)$$

де крім (5) використані позначення

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{kl} &= \varepsilon'_{kl} + i\varepsilon''_{kl}, \quad \bar{D}_k = D'_k + iD''_k, \\ \bar{p} &= \{ \bar{C}_{ijkl}^D(\cdot), \bar{h}_{kij}(\cdot), \bar{h}_{kij}^*(\cdot), \bar{\beta}_{kl}^{\varepsilon}(\cdot) \} = p' + ip'', \end{aligned}$$

а комплексні коефіцієнти $\bar{C}_{ijkl}^D(\cdot), \bar{h}_{kij}(\cdot), \bar{h}_{kij}^*(\cdot), \bar{\beta}_{kl}^{\varepsilon}(\cdot)$ є функціями компонент тензорів (7) і (8). Якщо припустити диференційовність цих функцій і підставити співвідношення (13) в рівняння (4), то легко переконатись, що ці рівняння задовольняються тотожно. Для цього потрібно врахувати сказане про рівняння (6) і зображення його загального розв'язку у вигляді (11). Більше того, можна показати, що внаслідок довільності коефіцієнтів $\bar{C}_{ijkl}^D(\cdot), \bar{h}_{kij}(\cdot), \bar{h}_{kij}^*(\cdot), \bar{\beta}_{kl}^{\varepsilon}(\cdot)$ функції $\bar{\sigma}_{ij}$ і $\bar{E}_k$ (13) є загальними розв'язками рівнянь (4).

Отже, якщо деякі диференційовні функції (2) задовольняють умові інваріантності відносно перетворення зсуву в часі (3), то їх можна записати у вигляді (13). З іншого боку, приймаючи до уваги інваріантність величин (7) і (8) відносно перетворення зсуву в часі, тобто відносно заміни

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{kl} &\rightarrow \varepsilon'_{kl} \cos \varphi - \varepsilon''_{kl} \sin \varphi, \\ \varepsilon''_{kl} &\rightarrow \varepsilon'_{kl} \sin \varphi + \varepsilon''_{kl} \cos \varphi, \\ D'_k &\rightarrow D'_k \cos \varphi - D''_k \sin \varphi, \\ D''_k &\rightarrow D'_k \sin \varphi + D''_k \cos \varphi \end{aligned} \quad (14)$$

безпосередньою перевіркою переконуємось, що функції (13) задовольняють умові (3).

Таким чином, необхідною і достатньою умовою інваріантності функцій (2) відносно перетворення зсуву в часі є їх зображення у вигляді (13). При цьому, звичайно, припускається диференційованість коефіцієнтів $\bar{C}_{ijkl}^D(\cdot), \bar{h}_{kij}(\cdot), \bar{h}_{kij}^*(\cdot), \bar{\beta}_{kl}^{\varepsilon}(\cdot)$.

Далі виклад матеріалу спирається на наступне зауваження.

Зауваження 1. Виділимо з множини всіх можливих фізично нелінійних матеріалів клас матеріалів, нелінійні властивості яких можна вважати «симетричними» відносно знака діючих факторів. Наприклад, матеріал з кубічною

нелінійністю однаково («симетрично») реагує на розтяг - стиск або, на зміну знаку електричної індукції. Якщо ж матеріалу, крім того, властива помітна квадратична нелінійність, то його реакція на подібні навантаження уже «несиметрична». Нижче розглядаються тільки матеріали виділеного класу, які будемо називати матеріалами з «симетричними нелінійними властивостями». У випадку одночастотного наближення коливань нелінійні властивості матеріалу проявляються в залежності коефіцієнтів з (13) від амплітуд і зсувів фаз незалежних змінних, а для матеріалу з «симетричними нелінійними властивостями» - від амплітуд і абсолютних величин зсувів фаз. Це означає, що величини (8) згідно з їх зображенням (9) повинні входити до числа аргументів у вигляді добутків або квадратів. Але тоді з (12) слідує, що коефіцієнти в (13) можна вважати функціями тільки величин (7). Зрозуміло, що співвідношення (13) залишаються справедливими і у випадку одночастотного наближення коливань для матеріалів з «несиметричними нелінійними властивостями». Для цього коефіцієнти цих рівнянь потрібно вважати функціями не лише величин (7), а і величин типу (8), які залежать від знака зсуву фаз. Однак такий опис коливань не буде повним без врахування постійних складових цих коливань, які можуть суттєво впливати на осцилюючі складові (1).

Таким чином, коефіцієнти в рівняннях (13) вважаємо далі функціями компонент тензорів (7):
 $(:)= (\Gamma_{ijk}, \Gamma_{jik}, \Gamma_{kij})$.

Розглянемо питання про симетрію цих коефіцієнтів відносно перестановки індексів. Симетрія

$$\begin{aligned}\bar{C}_{ijk}^D(:) &= \bar{C}_{jik}^D(:) = \bar{C}_{kij}^D(:), \\ \bar{h}_{kij}(:) &= \bar{h}_{jik}(:), \bar{h}_{kij}^*(:) = \bar{h}_{jik}^*(:)\end{aligned}$$

очевидна. Що стосується симетрії

$$\bar{C}_{ijk}^D(:) = \bar{C}_{kij}^D(:), \bar{\beta}_{ki}^e(:) = \bar{\beta}_{ik}^e(:)$$

чи рівності коефіцієнтів

$$\bar{h}_{kij}(:) = \bar{h}_{kji}^*(:)$$

то, як слідує з вищесказаного, про них нічого поки що сказати не можна. Для того щоб з'ясувати це питання, звернемося до функції дисипації [4]

$$\bar{D} = \sigma'_{ij}\epsilon'_{ij} - \sigma''_{ij}\epsilon''_{ij} + E'_k D'_k - E''_k D''_k, \quad (15)$$

Якщо записати вираз для цієї функції з врахуванням рівностей (4), то можна показати, що функція

$$\bar{U} = \sigma'_{ij}\epsilon'_{ij} + \sigma''_{ij}\epsilon''_{ij} + E'_k D'_k + E''_k D''_k \quad (16)$$

як функція незалежних змінних $\epsilon'_{kl}, \epsilon''_{kl}, D'_k, D''_k$ задовольняє диференціальному рівнянню (6)

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial \epsilon'_{kl}} \epsilon'_{kl} - \frac{\partial \bar{U}}{\partial \epsilon''_{kl}} \epsilon''_{kl} + \frac{\partial \bar{U}}{\partial D'_k} D'_k - \frac{\partial \bar{U}}{\partial D''_k} D''_k = 0.$$

Цьому ж рівнянню задовольняє і функція $\bar{D}$. Для цього потрібно записати з врахуванням (4) вираз для $\bar{U}$.

Зауваження 2. Розглядувані перетворення з врахуванням рівностей (4) зручно проводити в комплексній формі, якщо ввести комплексно-значну функцію

$$\bar{\Phi} = \bar{\sigma}_{ij} \bar{\epsilon}_{ij} + \bar{E}_k \bar{D}_k \quad (17)$$

і врахувати, що

$$\text{Im } \bar{\Phi} = \bar{D}, \text{ Re } \bar{\Phi} = \bar{U}.$$

Тоді, врахувавши в (17) рівності (4), приходимо до диференціального рівняння (6).

Функцію (16) $\bar{U}$ будемо називати функцією накопичення [4].

Так як функції дисипації і накопичення задовольняють диференціальному рівнянню (6), то для матеріалів з «симетричними» нелінійними властивостями вони, як і коефіцієнти рівнянь (13), є функціями виду

$$\bar{D} = \bar{D}(\Gamma_{ijk}, \Gamma_{jik}, \Gamma_{kij}), \quad \bar{U} = \bar{U}(\Gamma_{ijk}, \Gamma_{jik}, \Gamma_{kij}). \quad (18)$$

З іншого боку, відокремлюючи в рівняннях (13) дійсні та уявні частини і використовуючи їх у співвідношеннях (15) і (16), можна записати

$$\bar{D} = \bar{D}_1 + \bar{D}_2, \quad \bar{U} = \bar{U}_1 - \bar{U}_2, \quad (19)$$

де, з врахуванням позначень (7) і (8),

$$\begin{aligned}\bar{D}_1 &= C_{ijk}^{D'}(:) \Gamma_{ijk} + (h_{kij}^*(:) + h_{kij}^*(:)) \Gamma_{jik} + \beta_{ki}^*(:) \Gamma_{kij}, \\ \bar{D}_2 &= C_{ijk}^{D''}(:) \hat{\Gamma}_{ijk} + (h_{kij}^*(:) - h_{kij}^*(:)) \hat{\Gamma}_{jik} + \beta_{ki}^*(:) \hat{\Gamma}_{kij}, \\ \bar{U}_1 &= C_{ijk}^{U'}(:) \Gamma_{ijk} + (h_{kij}^*(:) + h_{kij}^*(:)) \Gamma_{jik} + \beta_{ki}^*(:) \Gamma_{kij}, \\ \bar{U}_2 &= C_{ijk}^{U''}(:) \hat{\Gamma}_{ijk} + (h_{kij}^*(:) - h_{kij}^*(:)) \hat{\Gamma}_{jik} + \beta_{ki}^*(:) \hat{\Gamma}_{kij}.\end{aligned} \quad (20)$$

Зауваження 3. В результаті перетворення зсуву в часі (14) повні амплітуди деформацій ϵ_{ij} і

індукції електричного поля $\vec{D}_k$ (10) не змінюються, а фази φ_{ij}^E і φ_k^D змінюються відповідно на $\varphi_{ij}^E + \varphi$ і $\varphi_k^D + \varphi$. Розглянемо також перетворення незалежних змінних виду

$$\begin{aligned}\varepsilon_{kl}' &\rightarrow \varepsilon_{kl}' \cos \varphi + \varepsilon_{kl}'' \sin \varphi, \\ \varepsilon_{kl}'' &\rightarrow \varepsilon_{kl}' \sin \varphi - \varepsilon_{kl}'' \cos \varphi, \\ D_k' &\rightarrow D_k' \cos \varphi + D_k'' \sin \varphi, \\ D_k'' &\rightarrow D_k' \sin \varphi - D_k'' \cos \varphi.\end{aligned}\quad (21)$$

Зауважимо, що це перетворення не слідує з (14) при жодному φ . Перетворення (21) також не змінює повних амплітуд деформації ε_{ij} і індукції електричного поля $\vec{D}_k$. Що стосується фаз φ_{ij}^E і φ_k^D , то вони змінюються відповідно на $-\varphi_{ij}^E + \varphi$ і $-\varphi_k^D + \varphi$. Оскільки величини (7) згідно (9) визначаються косинусами зсувів фаз, то вони в результаті перетворення (21) не змінюються. У цьому можна переконатись і безпосередньо, підставивши (21) в (7). Отже, функції дисипації і накопичення (18), як функції аргументів (7), інваріантні відносно перетворення (21). Те саме стосується і коефіцієнтів $C_{ijkl}^{D'}(;)$, $C_{ijkl}^{D''}(;)$, $h_{kl}'(;)$, $h_{kl}''(;)$, $h_{kl}'''(;)$, $\beta_{kl}'(;)$, $\beta_{kl}''(;)$ у співвідношеннях (20). Що стосується величин (8) $\hat{\Gamma}_{ijkl}$, $\hat{\Gamma}_{ijk}$ і $\hat{\Gamma}_{kl}$, які фігурують в (20), то вони в результаті перетворення (21) змінюють знак на протилежний.

Згідно з викладеним, ліві частини рівностей (19) і перші доданки правих частин цих рівностей не змінюються при заміні (21), тоді як другі складові $\bar{D}_2$ і $\bar{U}_2$ правих частин змінюють знак на протилежний. Тому, вимагаючи однозначну визначеність функцій накопичення и дисипації (18) своїми аргументами, потрібно покласти

$$\bar{D}_2 = 0, \quad \bar{U}_2 = 0 \quad (22)$$

Достатніми умовами виконання рівностей (22) є наступні умови симетрії, які постулюються додатково:

$$\begin{aligned}C_{ijkl}^{D'}(;) &= C_{klij}^{D'}(;), \quad h_{kl}'(;) = h_{lk}'(;), \quad \beta_{kl}'(;) = \beta_{lk}'(;), \\ C_{ijkl}^{D''}(;) &= C_{klij}^{D''}(;), \quad h_{kl}''(;) = h_{lk}''(;), \quad \beta_{kl}''(;) = \beta_{lk}''(;).\end{aligned}\quad (23)$$

Таким чином, ми отримаємо загальну структуру амплітудних визначальних рівнянь у вигляді

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}_{ij} &= \tilde{C}_{ijkl}^{D'}(;) \bar{\varepsilon}_{kl} + \tilde{h}_{kl}(;) \bar{D}_k, \\ \bar{E}_k &= \tilde{h}_{kl}(;) \bar{\varepsilon}_{ij} + \tilde{\beta}_{kl}(;) \bar{D}_l.\end{aligned}\quad (24)$$

Зауваження 4. У лінійному випадку коефіцієнти в рівняннях (24) сталі, а умови (23) є не лише достатніми, а й необхідними для виконання рівностей (22) і тому у лінійному випадку структура амплітудних рівнянь повністю визначається умовою їх інваріантності відносно перетворення зсуву в часі.

Аналогічні результати отримуються і у випадку інших наборів незалежних змінних. Розглянемо наприклад, довільні залежності

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}' &= \sigma_{ij}'(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', E_k', E_k''), \quad \sigma_{ij}'' = \sigma_{ij}''(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', E_k', E_k''), \\ D_j' &= D_j'(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', E_k', E_k''), \quad D_j'' = D_j''(\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', E_k', E_k'')\end{aligned}\quad (25)$$

і будемо вимагати щоб вони задовольняли умові інваріантності відносно перетворення зсуву в часі, яка отримується з (3) шляхом формальної заміни

$$E_k' \leftrightarrow D_k', \quad E_k'' \leftrightarrow D_k''.$$

Відповідні рівності в диференціальній формі мають вигляд

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}'} \varepsilon_{kl}'' - \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}''} \varepsilon_{kl}' + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial E_k'} E_k'' - \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial E_k''} E_k' + i \bar{\sigma}_{ij} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{D}_j}{\partial \varepsilon_{kl}'} \varepsilon_{kl}'' - \frac{\partial \bar{D}_j}{\partial \varepsilon_{kl}''} \varepsilon_{kl}' + \frac{\partial \bar{D}_j}{\partial E_k'} E_k'' - \frac{\partial \bar{D}_j}{\partial E_k''} E_k' + i \bar{D}_j &= 0.\end{aligned}\quad (26)$$

Записуючи з врахуванням рівнянь (26) вираз для дисипативної функції (15), отримуємо для даного набору незалежних змінних відповідну консервативну характеристику

$$\bar{H} = \sigma_{ij}' \varepsilon_{ij}' + \sigma_{ij}'' \varepsilon_{ij}'' - D_k' E_k' - D_k'' E_k'', \quad (27)$$

(амплітудний аналог електричної ентальпії).

Дисипативна функція $\bar{D}$ і функція $\bar{H}$, як функції незалежних змінних $\varepsilon_{kl}', \varepsilon_{kl}'', E_k', E_k''$, задовольняють диференціальному рівнянню

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{kl}'} \varepsilon_{kl}'' - \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{kl}''} \varepsilon_{kl}' + \frac{\partial \Phi}{\partial E_k'} E_k'' - \frac{\partial \Phi}{\partial E_k''} E_k' = 0$$

і для матеріалів з «симетричними» нелінійними властивостями є функціями аргументів

$$\bar{D} = \bar{D}(\Gamma_{ijkl}, \Gamma_{ijk}^E, \Gamma_{kl}^E), \quad \bar{H} = \bar{H}(\Gamma_{ijkl}, \Gamma_{ijk}^E, \Gamma_{kl}^E),$$

де

$$\Gamma_{ijk} = \varepsilon'_{ij} \varepsilon'_{kl} + \varepsilon''_{ij} \varepsilon''_{kl}, \quad \Gamma_{ijk}^E = \varepsilon'_{ij} E'_k + \varepsilon''_{ij} E''_k, \quad (28)$$

$$\Gamma_{kl}^E = E'_k E'_l + E''_k E''_l$$

Зауваження 5. Тут також зручно проводити перетворення з використанням рівностей (26) у комплексній формі, ввівши формально комплекснозначну функцію

$$\bar{F} = \bar{\sigma}_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij} - \bar{D}_k \bar{E}_k, \quad \text{Im } \bar{F} = \bar{D}, \quad \text{Re } \bar{F} = \bar{H}.$$

Аналогічно до викладеного вище можна показати, що необхідною і достатньою умовою інваріантності функцій (25) відносно перетворення зсуву в часі є їх зображення у вигляді

$$\bar{\sigma}_{ij} = \bar{C}_{ijkl}^E(\cdot) \bar{\varepsilon}_{kl} + \bar{e}_{kij}^*(\cdot) \bar{E}_k, \quad (29)$$

$$\bar{D}_k = \bar{e}_{kij}(\cdot) \bar{\varepsilon}_{ij} + \bar{\mu}_{kl}^E(\cdot) \bar{E}_l.$$

Комплексні коефіцієнти $\bar{C}_{ijkl}^E(\cdot)$, $\bar{e}_{kij}^*(\cdot)$, $\bar{e}_{kij}(\cdot)$, $\bar{\mu}_{kl}^E(\cdot)$ для матеріалів з «симетричними» нелінійними властивостями є диференційовними функціями аргументів (28).

Видокремлюючи в (29) дійсні і уявні частини з врахуванням позначень

$$\bar{p} = \{ \bar{C}_{ijkl}^E(\cdot), \bar{e}_{kij}^*(\cdot), \bar{e}_{kij}(\cdot), \bar{\mu}_{kl}^E(\cdot) \} = p' + ip''$$

і використовуючи їх у виразі для функції дисипації $\bar{D}$ (15) і функції $\bar{H}$ (27), отримуємо

$$\bar{D} = \bar{D}_1 + \bar{D}_2, \quad \bar{H} = \bar{H}_1 - \bar{H}_2,$$

де

$$\bar{D}_1 = C_{ijkl}^{E*}(\cdot) \Gamma_{ijkl} - (e_{kij}^*(\cdot) - e_{kij}^*(\cdot)) \Gamma_{ijk}^E - \mu_{kl}^{E*}(\cdot) \Gamma_{kl}^E,$$

$$\bar{D}_2 = C_{ijkl}^{E*}(\cdot) [\varepsilon'_{ij} \varepsilon''_{kl} - \varepsilon''_{ij} \varepsilon'_{kl}] + (e_{kij}^*(\cdot) + e_{kij}^*(\cdot)) [\varepsilon'_{ij} E'_k - \varepsilon''_{ij} E'_k] -$$

$$- \mu_{kl}^{E*}(\cdot) [E'_k E'_l - E''_k E'_l],$$

$$\bar{H}_1 = C_{ijkl}^{E*}(\cdot) \Gamma_{ijkl} - (e_{kij}^*(\cdot) - e_{kij}^*(\cdot)) \Gamma_{ijk}^E - \mu_{kl}^{E*}(\cdot) \Gamma_{kl}^E,$$

$$\bar{H}_2 = C_{ijkl}^{E*}(\cdot) [\varepsilon'_{ij} \varepsilon''_{kl} - \varepsilon''_{ij} \varepsilon'_{kl}] + (e_{kij}^*(\cdot) + e_{kij}^*(\cdot)) [\varepsilon'_{ij} E'_k - \varepsilon''_{ij} E'_k] -$$

$$- \mu_{kl}^{E*}(\cdot) [E'_k E'_l - E''_k E'_l].$$

Як і вище, вимога однозначної визначеності функцій $\bar{D}$ і $\bar{H}$ приводить до рівностей

$$\bar{D}_2 = 0, \quad \bar{H}_2 = 0,$$

для виконання яких постулюються наступні умови симетрії

$$C_{ijkl}^{E*}(\cdot) = C_{klij}^{E*}(\cdot), \quad e_{kij}^*(\cdot) = -e_{kij}^*(\cdot), \quad \mu_{kl}^{E*}(\cdot) = \mu_{kl}^{E*}(\cdot);$$

$$C_{ijkl}^{E*}(\cdot) = C_{klij}^{E*}(\cdot), \quad e_{kij}^*(\cdot) = -e_{kij}^*(\cdot), \quad \mu_{kl}^{E*}(\cdot) = \mu_{kl}^{E*}(\cdot).$$

Амплітудні рівняння приймають вигляд

$$\bar{\sigma}_{ij} = \bar{C}_{ijkl}^E(\cdot) \bar{\varepsilon}_{kl} - \bar{e}_{kij}(\cdot) \bar{E}_k, \quad (30)$$

$$\bar{D}_k = \bar{e}_{kij}(\cdot) \bar{\varepsilon}_{ij} + \bar{\mu}_{kl}^E(\cdot) \bar{E}_l.$$

Залишається справедливим зауваження стосовно лінійної теорії.

В роботі [3] рівняння виду (24) чи (30) отримані шляхом усереднення по Гальоркіну співвідношень загальної кратної інтегральної теорії електро'вязкопружності з використанням принципу взаємності, тобто припущення про те, що ядра кратної інтегральної теорії мають таку ж симетрію відносно перестановки індексів як і відповідні коефіцієнти нелінійного електропружного середовища. На відміну від [3] амплітудні рівняння (24) і (30) даної роботи не залежать від того, яке механічне середовище розглядається: в'язкопружне, пружнопластичне чи пружнов'язкопластичне. Єдиною умовою є реалізація в даному середовищі моногармонічного стану виду (1). Тому рівняння (24) і (30) в інтерпретації даної роботи мають ширше застосування.

Список використаних джерел

1. Карнаухов В.Г., Киричок И.Ф. Электро-термовязкоупругость: 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. Общая структура амплитудных определяющих уравнений неупругих пьезоэлектрических тел при циклических электромеханических процессах. // Прикл. механика. - 1996. - 32, N 12. - С. 37-42.
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. Modeling the thermomechanical behavior of physically nonlinear materials under monoharmonic loading. // Int. Appl. Mech. - 2001. - 37, N 11. - P. 1400-1432.

Надійшла до редколегії 16.02.2007

УДК 539.3; 538.6; 534.1

Леонід В. Мольченко, д.ф.-м.н., професор,
Ірина І. Лоос, к.ф.-м.н.,
Равшан Ш. Індіамінов, к.ф.-м.н.

Магнітопружність конічної оболонки з врахуванням ортотропної електропровід- ності в геометрично нелінійній постановці.

В роботі представлено двовимірну модель
магнітопружності нелінійної струмонесучої
конічної оболонки з врахуванням кінцевої
ортотропної електропровідності. Отримано
зв'язану розв'язуючу систему нелінійних рівнянь
магнітопружності для ортотропної конічної
оболонки, яка знаходиться під дією
нестационарних механічних та магнітних полів.

Ключові слова: оболонка, магнітне поле,
магнітопружність.

L.V. Mol'chenko, D.Sci. (Phys.-Math.), Full
Professor.

I. I. Loos, Cand.Sci. (Phys.-Math.),
R. Sh. Indiaminov, Cand.Sci. (Phys.-Math.)

The magnetoelasticity of ortotropic electroconductive conical shell in nonlinear position.

A two-dimensional variant of connected
nonlinear equations of the current-caring ortotropic
conical shell is presented.

The connected solving system of nonlinear
equations of magnetoelasticity for ortotropic
conical shell under the action of mechanic and
magnetic loads has been obtained.

Key Words: shell, magnetic field,
magnetoelasticity.

Розвиток теорії спряжених полів і, зокрема,
теорії електромагнітної взаємодії з середовищем,
що деформується, вважається одним із головних
напрямків розвитку сучасної механіки твердого
тіла.

Механізм взаємодії пружного середовища з
електромагнітним полем різнобічний і
обумовлений геометричними характеристиками і
фізичними властивостями тіла.

У рухомому суцільному середовищі при
наявності електромагнітного поля виникають
сили Лоренца. Механізм взаємодії через сили
Лоренца буде мати місце в струмопровідному
тілі і за відсутності ферромагнітних,
сегнетоелектричних чи п'єзоелектричних
властивостей.

Завдяки такій взаємодії рівняння
магнітопружності для подібних тіл в
лагранжевих змінних в області, що займає тіло
(внутрішня область), запишуться наступним
чином [6]:

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \vec{H} = \vec{J} + \vec{J}_{ct}, \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad \operatorname{div} \vec{D} = 0, \\ \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \rho (\vec{f} + \vec{f}^*) + \operatorname{div} \vec{P}, \quad (2)$$

де $\vec{J}_{ct}$ - густина стороннього електричного
струму; $\vec{E}$ - напруженість електричного поля; $\vec{H}$ -
напруженість магнітного поля; $\vec{B}$ - магнітна
індукція; $\vec{D}$ - електрична індукція; $\vec{J}$ - густина
електричного струму; ρ - густина матеріалу; $\vec{f}$
і $\vec{f}^*$ - об'ємні механічна і Лоренца сили
відповідно.

При повільній зміні електромагнітного поля
у рухомому зі швидкістю $\vec{v}$ суцільному
середовищі рівняння поля доповнюються
матеріальними співвідношеннями. Ці
співвідношення, узагальнений закон Ома і вирази
для пондеромоторних сил в змінних Лагранжа
запишуться відповідно у вигляді [4]:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}, \quad \vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E}, \quad (3)$$

$$\vec{J} = \sigma_0 \Gamma F^i F^{-1} \left[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right], \quad (4)$$

$$\rho \vec{f}^* = \Gamma^{-1} F^{-1} \left[\vec{J}_{ct} \times \vec{B} + \sigma_0 (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \times \vec{B} \right], \quad (5)$$

$$\text{де } \Gamma = \det \left| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{\xi}} \right|, \quad \vec{F} = \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{\xi}}, \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

$\sigma_{ij}, \epsilon_{ij}, \mu_{ij}$ - відповідно тензори електричної провідності, діелектричної та магнітної проникливості струмонесучого тіла ($i, j = 1, 2, 3$).

Система рівнянь (1), (2), яка визначає рух пружного струмонесучого тіла в електромагнітному полі, повинна бути доповнена початковими та граничними умовами і умовами на нескінченності.

Обмежившись розглядом випадків, коли електропровідне тіло контактує з зовнішнім неполяризованим не електропровідним середовищем, в якості початкових умов приймемо

$$\vec{u} = 0, \dot{\vec{u}} = 0, \vec{B} = 0, \vec{B}^{(c)} = 0, \vec{H} = 0, \vec{H}^{(c)} = 0, \quad (6)$$

де $\vec{u}$ - вектор переміщень; індекс (c) - вказує на величини зовнішнього середовища.

Крайові умови на вектори електромагнітного поля на поверхні (s) контакту середовищ з різними властивостями матеріалу у випадку, коли на поверхні тіла поверхневі заряди і струми дорівнюють нулю, для повільно рухомих середовищ, запишемо у вигляді [1,6]:

$$\begin{aligned} (\vec{E}^{(c)} - \vec{E}) \times \vec{n}_R &= 0, \quad (\vec{D}^{(c)} - \vec{D}) \cdot \vec{n}_R = 0, \\ (\vec{H}^{(c)} - \vec{H}) \times \vec{n}_R &= 0, \quad (\vec{B}^{(c)} - \vec{B}) \cdot \vec{n}_R = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

де $(\vec{a}^{(c)} - \vec{a})$ - стрибки векторів при переході через поверхні (s) розподілу середовищ; $\vec{n}_R$ - вектор нормалі до поверхні розриву.

Відмітимо, що умови на нормальні складові електричного і магнітного полів, виконуються тотожно, внаслідок рівнянь

$$\begin{aligned} \text{div} \vec{D}^{(c)} &= 0, \quad \text{div} \vec{D} = 0, \\ \text{div} \vec{B}^{(c)} &= 0, \quad \text{div} \vec{B} = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

Крайові умови для функцій, які характеризують, як механічну частину задачі, так і електромагнітну, у випадку задання на поверхні тіла зовнішнього силового навантаження $\vec{P}$ записуються у лагранжевих змінних наступним чином [6]:

$$(\vec{\sigma}_R + \vec{\tau}_R) \cdot \vec{n}_R|_S = \vec{P}_R + \vec{\tau}_R^{(c)} \cdot \vec{n}_R|_S, \quad (9)$$

Тут $\vec{\sigma}_R = \Gamma \vec{\sigma} \Gamma^{-1}$ - тензор напружень віднесений до недеформованої поверхні; $\vec{P}_R$ - вектор поверхневої сили, віднесений до одиничної поверхні тіла в недеформованому стані;

$$\vec{\tau}_R = F^{-1} \vec{\tau}, \quad \vec{\tau}_R^{(c)} = \Gamma F^{-1} \vec{\tau}^{(c)} \quad (10)$$

-тензори напружень Максвелла відповідно в тілі і вакуумі.

У наведеній постановці розв'язок задач

нелінійної магнітопружості пов'язаний з великими труднощами. В роботах [1,4] пропонуються і обґрунтовуються гіпотези магнітопружості для тонких ізотропних тіл, які спрощують розв'язок задач магнітопружості пластин та оболонок.

В даній роботі пропонується застосовувати вказані гіпотези також у задачах магнітопружості анізотропних пластин і оболонок. Ці гіпотези аналітично записуються наступним чином [1,6]:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_1(\alpha, \beta, t); E_2 = E_2(\alpha, \beta, t); \\ E_3 &= \frac{\partial u_2}{\partial t} B_1 - \frac{\partial u_1}{\partial t} B_2, \\ J_1 &= J_1(\alpha, \beta, t); J_2 = J_2(\alpha, \beta, t), J_3 = 0, \\ H_1 &= \frac{1}{2} (H_1^+ + H_1^-) + \frac{\gamma}{h} (H_1^+ - H_1^-), \\ H_2 &= \frac{1}{2} (H_2^+ + H_2^-) + \frac{\gamma}{h} (H_2^+ - H_2^-), \\ H_3 &= H_3(\alpha, \beta, t), \end{aligned} \quad (11)$$

Тут u_i - компоненти просторового вектора переміщень; $H_i^{\pm}$ - невідомі компоненти вектора напруженості магнітного поля на поверхні оболонки.

Для розглядуваного випадку квадратичної нелінійності [2] деформації й кути повороту малі, але останні значно перевищують перші. Врахування малих подовжень і нехтування зсувами в порівнянні з кутами повороту дозволяють не проводити різниці між розмірами об'єкта до і після деформації. Такий підхід дозволяє враховувати нелінійність в співвідношеннях для деформацій, кривизни і кручення. При цьому метрика оболонки залишається практично недеформованою, тому що радіуси кривизни і параметри Ламе відповідають недеформованому стану оболонки.

Будемо розглядати гнучкі струмонесучі конічні оболонки змінної товщини, які знаходяться під дією нестационарних електромагнітних і механічних полів. Процесами поляризації і намагнічування, а також температурними напруженнями нехтуємо. Пружні властивості матеріалу оболонки вважаються ортотропними, головні напрямки пружності якого співпадають з напрямками відповідних координатних ліній, електромагнітні властивості матеріалу характеризуються тензорами електричної провідності σ_{ij} , магнітної проникливості μ_{ij} , діелектричної проникливості

ε_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$), При цьому, виходячи з кристалографії [3], для розглядуваного класу провідних ортотропних середовищ з ромбічною кристалічною структурою вважаємо, що тензори $\sigma_{ij}, \mu_{ij}, \varepsilon_{ij}$ приймають діагональний вигляд.

Якщо в якості незалежної змінної прийняти довжину дуги меридіану конуса s (система координат s, θ, ξ), то величини, що характеризують геометрію оболонки, запишуться слідуєчим чином:

$$A=1, B=r, \\ \frac{1}{R_s}=0, \quad \frac{1}{R_\theta}=\frac{\sin \varphi}{r}, \quad r=s \cos \varphi,$$

де φ - кут, між нормаллю до серединної поверхні і віссю обертання; $r=r(s)$ - радіус

паралельного кола.

Рівняння Коши-Гаусса записується слідуєчим чином:

$$\frac{dr}{ds} = \cos \varphi.$$

З врахуванням діагонального вигляду тензорів $\sigma_{ij}, \mu_{ij}, \varepsilon_{ij}$ і згідно результатам робіт [2,5,6], а також враховуючи описану геометрію оболонки, повна система рівнянь в криволінійній системі координат, яка дозволяє математично описати нелінійну двовимірну модель магнітопружкості ортотропних конічних оболонок складається з [6]:

рівняння руху

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s}(rN_s) - \cos \varphi N_\theta + \frac{\partial S}{\partial \theta} + r(P_s + \rho F_s) &= r\rho h \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial N_\theta}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial s}(r^2 S) + \frac{\partial}{\partial s}(\sin \varphi H) + \sin \varphi Q_\theta + r(P_\theta + \rho F_\theta) &= r\rho h \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial}{\partial s}(rQ_s) + \frac{\partial Q_\theta}{\partial \theta} - \sin \varphi N_\theta + r(P_\xi + \rho F_\xi) &= r\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial s}(rM_s) - \cos \varphi M_\theta - rQ_s - r\left(N_s - \frac{\sin \varphi}{r} M_\theta\right) \mathcal{G}_s &= rS \mathcal{G}_\theta = 0, \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial s}(r^2 H) + \frac{\partial M_\theta}{\partial \theta} - rQ_\theta - rN_\theta \mathcal{G}_\theta - rS \mathcal{G}_s &= 0, \end{aligned}$$

рівняння електродинаміки

$$\begin{aligned} -\frac{\partial B_\xi}{\partial t} &= \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rE_\theta)}{\partial s} - \frac{\partial E_s}{\partial \theta} \right), \\ \sigma_1 \left[E_s + \frac{\partial v}{\partial t} B_\xi - 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_\theta^+ + B_\theta^-) \right] &= \frac{1}{r} \left(\frac{\partial H_\xi}{\partial \theta} - \frac{r}{h} (H_\theta^+ - H_\theta^-) \right), \\ \sigma_2 \left[E_\theta - \frac{\partial u}{\partial t} B_\xi + 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_s^+ + B_s^-) \right] &= \left(-\frac{\partial H_\xi}{\partial s} + \frac{(H_s^+ - H_s^-)}{h} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

вирази деформацій через переміщення

$$\begin{aligned} \varepsilon_s &= \frac{\partial u}{\partial s} + \frac{1}{2} \mathcal{G}_s^2, \quad \varepsilon_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r} u + \frac{\sin \varphi}{r} w + \frac{1}{2} \mathcal{G}_\theta^2, \\ \varepsilon_{s\theta} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{v}{r} \right) + \mathcal{G}_s \mathcal{G}_\theta, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\chi_s = \frac{\partial \vartheta_s}{\partial s}, \quad \chi_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial \vartheta_\theta}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r} \vartheta_s,$$

$$2\chi_{s\theta} = \frac{\partial \vartheta_\theta}{\partial s} + \frac{1}{r} \frac{\partial \vartheta_s}{\partial \theta} - \frac{\cos \varphi}{r} \vartheta_\theta + \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial v}{\partial s},$$

де:

$$\vartheta_s = -\frac{\partial w}{\partial s}, \quad \vartheta_\theta = -\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{r} v. \quad (15)$$

співвідношення пружності

$$N_s = \frac{e_s h}{1 - \nu_s \nu_\theta} (\varepsilon_s + \nu_\theta \varepsilon_\theta), \quad N_\theta = \frac{e_\theta h}{1 - \nu_s \nu_\theta} (\varepsilon_\theta + \nu_s \varepsilon_s),$$

$$H = g_{s\theta} \frac{h^3}{12} 2\chi_{s\theta}, \quad S = g_{s\theta} h \varepsilon_{s\theta}, \quad (16)$$

$$M_s = \frac{e_s h^3}{12(1 - \nu_s \nu_\theta)} (\chi_s + \nu_\theta \chi_\theta),$$

$$M_\theta = \frac{e_\theta h^3}{12(1 - \nu_s \nu_\theta)} (\chi_\theta + \nu_s \chi_s),$$

тут

$$\nu_s = \nu_{\theta s}, \quad \nu_\theta = \nu_{s\theta}, \quad e_s \nu_\theta = e_\theta \nu_s,$$

Компоненти сили Лоренца мають вигляд

$$\rho f_s = -h J_{\theta z} B_z + \sigma_1 h \left[E_\theta B_z - \frac{\partial u}{\partial t} B_z^2 + 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_\theta^* + B_\theta) B_z \right] +$$

$$+ \sigma_1 h \frac{\partial v}{\partial t} \left(0,25 (B_\theta^* + B_\theta) (B_\theta^* + B_\theta) + \frac{1}{12} (B_\theta^* - B_\theta) (B_\theta^* - B_\theta) - \frac{1}{12} (B_\theta^* + B_\theta) B_z \right),$$

$$\rho f_\theta = h J_{sz} B_z + \sigma_2 h \left[-\frac{\mu_z}{\sigma_1 r} \left(\frac{\partial B_z}{\partial \theta} - \frac{r (B_\theta^* - B_\theta)}{h} \right) - \frac{\partial v}{\partial t} B_z + \right.$$

$$+ 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_\theta^* + B_\theta) B_z + 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_\theta^* + B_\theta) B_z - \frac{\partial v}{\partial t} B_z^2 \left. \right] -$$

$$- \sigma_2 h \frac{\partial v}{\partial t} \left[0,25 (B_\theta^* + B_\theta)^2 + \frac{1}{12} (B_\theta^* - B_\theta)^2 - 0,5 (B_\theta^* + B_\theta) B_z \right]. \quad (17)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial s} = -\mu_1 \sigma_2 \left[E_\varphi + 0.5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_s^* + B_s) - \frac{\partial u}{\partial t} B_z \right] + \frac{(B_s^* - B_s)}{\mu_1 h},$$

$$\frac{\partial E_\varphi}{\partial s} = \frac{\partial B_z}{\partial t} - \frac{\cos \varphi}{\varphi} E_\varphi.$$

Оримана зв'язана нелінійна система гіперболо-параболічних рівнянь восьмого порядку в частинних похідних зі змінними коефіцієнтами описує симетричну деформацію гнучких струмонесучих конічних оболонок змінної вздовж меридіана товщини.

Компоненти сили Лоренца вміщують нелінійні члени, які обумовлені врахуванням переміщення оболонки при її деформуванні. Для визначення довільностей, які присутні в загальному розв'язку системи диференціальних рівнянь (18), на граничних контурах $s = s_0$ і $s = s_N$ необхідно задати умови їх навантаження чи закріплення. На кожному контурі повинні бути задані чотири граничні умови.

Крайові умови для функцій, які характеризують механічну частину задачі, задаються так, як і в звичайній теорії оболонок. В якості граничних умов для електромагнітної групи рівнянь можуть задаватися електричні поля чи комбінації магнітних та електричних полів.

У векторному вигляді крайова задача запишеться:

рівняння руху

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial s} = \vec{F} \left(s, t, \vec{N}, \frac{\partial \vec{N}}{\partial t}, \frac{\partial^2 \vec{N}}{\partial t^2} \right),$$

$$\left(s_0 \leq s \leq s_N, \quad t_0 \leq t \leq t_N \right), \quad (19)$$

граничні умови

$$\vec{g}_1(\vec{N}(s_0, t)) = \vec{h}_1^*, \quad \vec{g}_2(\vec{N}(s_N, t)) = \vec{h}_2^*, \quad (20)$$

початкові умови

$$\vec{N}(s, t) = 0, \quad \dot{\vec{N}}(s, 0) = 0. \quad (21)$$

Тут $\vec{N} = \{N_u, w, \vartheta_s, N_s, Q_s, M_s, E_\varphi, B_z\}^T$ - вектор стовпець шуканих функцій; $\vec{F}, \vec{g}_1, \vec{g}_2, \vec{h}_1^*, \vec{h}_2^*$ - в загальному випадку нелінійні вектор функції. В подальшому, крайова задача (19), (20) з початковими умовами (21), розв'язується чисельно, у відповідності з методикою, яка викладена в роботах [5,6].

На основі отриманих рівнянь, з використанням запропонованої методики, маємо можливість враховувати, як анізотропію

матеріалу, так і анізотропію внутрішнього електромагнітного поля оболонки.

Ці питання дуже актуальні, як з точки зору самої теорії, так і, особливо, з точки зору додатків. Справа в тому, що у випадку тонких анізотропних чи ізотропних тіл з анізотропною електропровідністю можна ставити і розв'язувати оптимальні задачі магнітопружності шляхом варіації всіх фізико-механічних параметрів матеріалу тіла. Зокрема, при постійних механічних і геометричних параметрах задачі, за допомогою зміни анізотропних електро-динамічних параметрів можна отримати конструктивні елементи з якісно новою механічною поведінкою.

Список використаних джерел

1. Амбарцумян С. А., Багдасарян Г. Е., Белубекян М. В. Магнитоупругость тонких оболочек и пластин. - М.: Наука, 1977. - 272 с.
2. Григоренко Я. М., Мольченко Л. В. Основы теории пластин та оболонок. - Київ: Либідь, 1993. - 231 с.
3. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. - М.: Мир, 1974. - 496 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. - М.: Физматгиз, 1959. - 523 с.
5. Мольченко Л. В., Индиаминов Р. Ш. Учет влияния комбинированного нагружения на напряженное состояние конической оболочки находящейся в магнитном поле. // Докл. АН Рух. №6, 1993. с. 21-22.
6. Улітко А.Т., Мольченко Л.В., Ковальчук В.Ф. Магнітопружність при динамічному навантаженні. - Київ: Либідь, 1994. - 155 с.

Надійшла до редколегії 26.02.2007

УДК 517.9

Юрій Б. Мосєєнков, к. ф. - м. н. доцент

Yuri B. Moseyenko, Cand.Sci. (Phys. - Math.),
Associate Professor

Постановка задачі та структура асимптотичних розв'язків при дослідженні одно- та багаточастотних режимів коливань в збурених системах з розподіленими параметрами

В роботі розглядаються одномірні слабо-нелінійні крайові задачі неавтономного типу та слабонелінійні змішані крайові задачі автономного типу при дослідженні одно- та багаточастотних режимів коливань. При постановці вище зазначених крайових задач враховується їх специфіка відносно початкових умов та особливостей структури асимптотичних розв'язків як у випадках дослідження одночастотних, так і багаточастотних режимів коливань.

Ключові слова: асимптотичні розв'язки, слабонелінійні крайові задачі автономного типу, одно - та багаточастотні режими коливань.

Definition of the problem and structure of asymptotic solutions in the time of study the single- and multi-frequency oscillation modes in the disturbed systems with distributed parameters

The paper deals with a unidimensional weakly-nonlinear boundary problem of the non-autonomous type and weakly-nonlinear mixed boundary problem of the autonomous type when studying the single- and multi-frequency oscillation modes. Definition of the above boundary problem takes into account the specific features in terms of initial conditions and structure particularities of an asymptotic solutions both in the case of studying the single- and multi-frequency oscillation modes.

Key Words: asymptotic solutions, single- and multi-frequency modes, mixed nonlinear boundary problem, autonomous quasi-wave equation.

*E-mail: yuri_mos@i.ua

1. Вступ

Асимптотичні методи нелінійної механіки широко застосовуються при вивченні одно- та багаточастотних режимів нелінійних коливань в збурених системах з розподіленими параметрами. Цей напрямок досліджень набув великого значення у зв'язку з розвитком асимптотичних методів [1, 2, 3, 4] стосовно слабо нелінійних коливальних систем з багатьма степенями вільності та з повільно змінними параметрами, в тому числі із нескінченним числом степенів вільності (систем з розподіленими параметрами). Київська школа нелінійної механіки академіка Ю.О. Митропольського зробила великий внесок у вирішенні проблем дослідження нестационарних процесів коливань та одно- і багаточастотних режимів коливань в умовах резонансу [5]. Зокрема, важливі результати стосуються коливальних систем з розподіленими параметрами, які описуються рівняннями в частинних похідних та відповідними крайовими умовами.

Таким чином, при дослідженні одно - та багаточастотних режимів нестационарних коливань в системах з розподіленими параметрами приходимо до одномірних чи двомірних слабо-

нелінійних крайових задач неавтономного типу або ж до змішаних крайових задач автономного типу.

2. Основні результати

1. У випадку, коли слабо-нелінійна крайова задача неавтономного типу для певної коливальної системи з розподіленими параметрами утримує нелінійність лише в рівнянні (крайові умови є лінійними), то для побудови асимптотичного розв'язку в першому та другому наближеннях ефективно застосувати енергетичний метод, розроблений Ю.О. Митропольським. Суть і схема цього метода та багаторазове його застосування до конкретних коливальних систем досить повно викладені в монографії [4]. Не зупиняючись на цьому, слід зазначити, що наявність навіть малої нелінійності в крайових умовах не дає можливості застосувати енергетичний метод для дослідження одно- та багаточастотних режимів нестационарних коливань, бо він не розроблений для таких систем. Разом з тим крайові задачі неавтономного типу з нелінійністю в крайових умовах зустрічаються в механіці та інших прикладних науках техніки досить часто. Тому при постановці задач і з'ясуванні структури

асимптотичних розв'язків при дослідженні одно- та багаточастотних режимів коливань в системах з розподіленими параметрами будемо виходити із більш загального випадку одномірних (а також двомірних) слабо-нелінійних крайових задач неавтономного типу з нелінійністю як у рівнянні, так і в крайових умовах. Сюди відноситься ряд

$$\frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + R^4 \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \mathcal{E}(x, \tau, \theta, y, \frac{\partial y}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial x}, \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}, \frac{\partial^3 y}{\partial x^3}, \frac{\partial^4 y}{\partial x^4}, \varepsilon) \quad (1)$$

при нелінійних крайових умовах неавтономного типу:

$$L_{1j}(\frac{\partial y}{\partial x}, \frac{\partial^2 y}{\partial x^2})|_{x=j} = \varepsilon \varphi_j(\tau, \theta, \frac{\partial y}{\partial x}, \varepsilon)|_{x=j}, \quad (2)$$

$$L_{2j}(y, \frac{\partial^3 y}{\partial x^3})|_{x=j} = \varepsilon \psi_j(\tau, \theta, y, \varepsilon)|_{x=j}, (j = (0, l))$$

де $\varepsilon > 0$, $\tau = \varepsilon t$, $\frac{d\theta}{dt} = v(\tau)$ ($0 \leq \tau \leq L$), $R^4 = \frac{m}{EJ}$,

L_{1j} і L_{2j} – лінійні однорідні диференціальні оператори.

Відносно функцій, що знаходяться в правих частинах рівняння (1) та крайових умов (2) припускаємо достатню гладкість відносно їх аргументів та періодичність по θ періоду 2π .

Крайові умови (2) відповідають ряду практичних випадків закріплення кінців стержня і включають в себе випадки пружного закріплення з нелінійною характеристикою та заданого зміщення їх у часі.

Фізичними умовами виникнення коливань близьких до одночастотних режимів, являються наявність дисипативних сил та зовнішніх збурюючих нагрузок з частотою дії, близької до однієї з власних частот незбуреної системи (одержаної із системи (1) – (2) при $\varepsilon = 0$ і $\tau = const$). Для визначеності покладемо, що

$\frac{P}{q}v(\tau) \approx \omega_1$ при $0 \leq \tau \leq L$. Тобто має місце резонанс на основній частоті.

Суть методики побудови асимптотичних наближень розв'язків полягає в наступному. Спочатку розглядається незбурена крайова задача (або незбурена система). Звичайним шляхом розділення змінних (методом Фур'є) для неї визначаються двопараметричні розв'язки у вигляді:

$$y_{\omega n}(x, t) = a_n X_n(x) \cos(\omega_n t + \varphi_n), (n = 1, 2, \dots), \quad (3)$$

відповідні одно-частотним коливанням, де ω_n – власні частоти, а $X_n(x)$ – ортогональні на від-

задач (в уточненій постановці) теорії нелінійних коливань, динамічної стійкості пружних систем, деякі задачі віброізоляції та інші.

Зокрема, розглянемо нестационарні коливання стержнів, близькі до одночастотних режимів і які описуються квазілінійними рівняннями вигляду:

різку $[0, l]$ функції, тобто форми динамічної рівноваги (власні функції незбуреної крайової задачі).

Тоді, одночастотний розв'язок, відповідний резонансним коливанням збуреної системи, близьким до першого нормального коливання (3), розшукується у вигляді асимптотичного розвинення:

$$y(x, t) = aX_1(x) \cos \psi + \varepsilon U_1(x, \tau, a, \psi, \theta) + \varepsilon^2 \dots, \quad (4)$$

В розвиненні (4) $\psi = \frac{P}{q}\theta + \varphi$, $U_i(x, \tau, a, \psi, \theta)$

($i = 1, 2, 3, \dots$) – функції періоду 2π по ψ і θ , а величини a і φ визначаються із системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= \varepsilon A_1(\tau, a, \varphi) + \varepsilon^2 \dots, \\ \frac{d\varphi}{dt} &= \omega_1 - \frac{P}{q}v(\tau) + \varepsilon B_1(\tau, a, \varphi) + \varepsilon^2 \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Оскільки сама суть знаходження асимптотичних розв'язків, відповідних одно- та багато-частотним режимам нестационарних коливань, викладена достатньо повно в [4], то на цьому зупинятись немає потреби.

В тому випадку, коли на розглянутому інтервалі часу $0 \leq \tau \leq L$ збурюючі розподілені сили мають вигляд багато-частотного збурення:

$$\mathcal{E}(x, \tau, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k, y, \frac{\partial y}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial x}, \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}, \frac{\partial^3 y}{\partial x^3}, \frac{\partial^4 y}{\partial x^4}, \varepsilon), \quad (6)$$

причому приводять до резонансних явищ вигляду

$$\frac{d\theta_i}{dt} = v_i(\tau) \approx \omega_i \frac{q_i}{P_i}, (i = \overline{1, k}) \quad (7)$$

при обов'язковій умові відсутності внутрішніх резонансів, тоді асимптотичний розв'язок, відповідний багато-частотним нестационарним коливанням в умовах діючих резонансів (7), слід розшукувати у вигляді:

$$y(x, t) = \sum_{i=1}^k a_i X_i(x) \cos \psi_i + \varepsilon U_1(x, \tau, a_1, \dots, a_k, \psi_1, \dots, \psi_k, \theta_1, \dots, \theta_k) + \varepsilon^2 \dots, \quad (8)$$

де $U_j(x, \tau, a_1, \dots, a_k, \psi_1, \dots, \psi_k, \theta_1, \dots, \theta_k)$ ($j = 1, 2, 3, \dots$) - функції періоду 2π по кутовим аргументам $\psi_i = \frac{p_i}{q_i} \nu_i(\tau) + \varphi_i, \theta_i (i = \overline{1, k})$, а величини a_i та φ_i визначаються із системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{da_i}{dt} &= \varepsilon A_i^{(1)}(\tau, a_1, \dots, a_k, \varphi_1, \dots, \varphi_k) + \varepsilon^2 \dots, \\ \frac{d\varphi_i}{dt} &= \omega_i - \frac{p_i}{q_i} \nu_i(\tau) + \varepsilon B_i^{(1)}(\tau, a_1, \dots, a_k, \varphi_1, \dots, \varphi_k) + \varepsilon^2 \dots \\ &(i = \overline{1, k}) \quad (9) \end{aligned}$$

Необхідність дослідження двочастотного або k -частотного режимів коливань в неавтономній системі також може виникнути і у випадку рівняння (1) при дослідженні одночастотних збурень. В тому випадку, коли за час $0 \leq \tau \leq L$ $\frac{d\theta}{dt} = \nu(\tau)$ буде близька до декількох перших власних частот $\omega_i (i = \overline{1, k})$, ситуація буде аналогічна як і при багато-частотному збуренні з точки зору необхідності дослідження багато-частотного режиму нестационарних коливань у вигляді (8) - (9).

Таким чином, при наявності дисипативних сил в реальних неавтономних коливальних системах з розподіленими параметрами можливість дослідження одно- та багато-частотних режимів нестационарних коливань істотно залежить від характеру постійно діючих у часі збурень (періодичних по $\theta_i (i = \overline{1, k})$ сил), які знаходяться у резонансі з власними частотами $\omega_i (i = \overline{1, k})$. Ці збурення і визначають в основному можливість дослідження відповідних одно і багато-частотних режимів нестационарних коливань. Слід зазначити, що в системах з розподіленими параметрами, які розглядаються в п. 1, початкові умови не приймалися до уваги в силу характеру постійно діючих збурень.

2. Далі розглянемо постановку слабонелінійних одномірних змішаних крайових задач автономного типу при дослідженні одно- та k -частотних режимів нестационарних коливань в автономних системах з розподіленими параметрами. Зокрема сюди відносяться задачі (в уточненій постановці) теорії нелінійних коливань при дослідженні власних коливань в системах з розподіленими параметрами.

Якщо в неавтономних коливальних системах основною фізичною передумовою виникнення коливань, близьких до одно-частотного режиму коливань, являлась наявність постійно діючих збурюючих періодичних сил з частотою, що знаходиться у комбінаційному резонансі з однією з власних частот системи, то в автономних коливальних системах роль таких фізичних передумов (за відсутністю постійно діючих збурень) виконують миттєві збурення, які задаються у вигляді початкових умов змішаної крайової задачі. Специфіка останньої і знаходиться в її математичній постановці. Про вказану специфіку для автономних коливальних систем з відповідним детальним аналізом структури асимптотичних розв'язків зазначено в роботі [6].

Отже, розглянемо одномірну слабонелінійну змішану крайову задачу автономного типу, яка описується квазіхвильовим рівнянням вигляду:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - b^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \varepsilon f(x, U, \frac{\partial U}{\partial x}, \frac{\partial U}{\partial t}, \varepsilon), \quad (10)$$

з близькими до лінійних крайовими умовами:

$$L_j(U, \frac{\partial U}{\partial x}) \Big|_{x=j} = \varepsilon F_j(U_{x=j}, \varepsilon), (j = 0, \ell) \quad (11)$$

та початковими умовами

$$U|_{t=0} = Y(x), \frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{t=0} = Z(x) \quad (12)$$

Відносно правих частин (10) - (12) припускаємо, що вони являються цілими раціональними функціями відносно U і її частинних похідних, аналітичними по ε та достатньо гладкими по x .

Розглядаючи незбурену крайову задачу ((10)-(11) при $\varepsilon = 0$) і враховуючи, що вона розв'язується методом розділення змінних, знаходимо її загальний розв'язок:

$$U_0(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n X_n(x) \cos(\omega_n t + \varphi_n), \quad (13)$$

де a_n та φ_n - довільні сталі, ω_n - власні частоти, $X_n(x)$ - власні функції, попарно ортогональні на $[0, \ell]$. Якщо тепер припустити, що функції $Y(x), Z(x)$ початкових умов (12) ε -апроксимуються на $[0, \ell]$ першою власною

функцією $X_1(x)$ (з точністю до величин порядку ε), то ці початкові умови можна представити у вигляді:

$$U|_{t=0} = p_1 X_1(x) + \varepsilon Y(x), \quad \frac{\partial U}{\partial t}|_{t=0} = q_1 X_1(x) + \varepsilon Z(x) \quad (14)$$

Одержуючи з останніх початкові умови незбуреної системи (при $\varepsilon=0$) і виходячи із загального розв'язку (13), знаходимо відповідний частинний розв'язок змішаної крайової задачі:

$$U_0(x, t) = a_1^0 X_1(x) \cos(\omega_1 t + \varphi_1^0), \quad (15)$$

де a_1^0 та φ_1^0 виражаються через p і q

Отже, тільки при початкових умовах вигляду (14) можливі одно-частотні двопараметричні коливання вигляду (15) в незбуреній автономній системі. Тому природно при переході до розгляду вихідної збуреної змішаної крайової задачі (10) - (12), тобто при $\varepsilon \neq 0$, досліджувати режим коливань, близький до незбуреного одно-частотного режиму, що описується розв'язком (15).

Тоді розв'язок і розшукується у вигляді асимптотичного розвинення.

$$U(x, t) = a X_1(x) \cos \psi + \varepsilon U_1(x, a, \psi) + \varepsilon^2 \dots \quad (16)$$

де величини a і ψ визначаються із системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= \varepsilon A_1(a) + \varepsilon^2 \dots \\ \frac{d\psi}{dt} &= \omega_1 + \varepsilon B_1(a) + \varepsilon^2 \dots \end{aligned} \quad (17)$$

На завершення зупинимося на дослідженні багаточастотних коливальних режимів і на розгляді відповідної постановки задачі.

Список використаних джерел

1. Боголюбов Н. Н. Одночастотные свободные колебания в нелинейных системах со многими степенями свободы // Сб. трудов Института строительной механики АН УССР. - 1949. - №10. - с.9-21.
2. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. - М.: Наука, 1974. - 501с.
3. Митропольский Ю. А. Проблема асимптотической теории нестационарных колебаний. - М.: Наука, 1964. - 431с.

Розглянемо автономну коливальну систему, яка описується слабо-нелінійною змішаною крайовою задачею (10) - (12), і припустимо, що функції $Y(x), Z(x)$ початкових умов (12) ε -апроксимуються першими k фундаментальними функціями $X_i (i = \overline{1, k})$. Тоді початкові умови (12) представляються у вигляді:

$$\begin{aligned} U|_{t=0} &= \sum_{i=1}^k p_i X_i(x) + \varepsilon Y(x), \\ \frac{\partial U}{\partial t}|_{t=0} &= \sum_{i=1}^k q_i X_i(x) + \varepsilon Z(x), \end{aligned} \quad (18)$$

а відповідний частинний розв'язок незбуреної змішаної крайової задачі набуває вигляду:

$$U_0(x, t) = \sum_{i=1}^k a_i^0 X_i(x) \cos(\omega_i t + \varphi_i^0), \quad (19)$$

Тому для збуреної змішаної крайової задачі розшукується $2k$ - параметричний розв'язок у вигляді асимптотичного розвинення:

$$\begin{aligned} U(x, t) &= \sum_{i=1}^k a_i X_i(x) \cos \psi_i + \\ &+ \varepsilon U_1(x, a_1, \dots, a_k, \psi_1, \dots, \psi_k) + \varepsilon^2 \dots \end{aligned} \quad (20)$$

де величини a_i та ψ_i визначаються із системи рівнянь $2k$ - того порядку:

$$\begin{aligned} \frac{da_i}{dt} &= \varepsilon A_i^{(1)}(a_1, \dots, a_k) + \varepsilon^2 \dots, (i = \overline{1, k}) \\ \frac{d\psi_i}{dt} &= \omega_i + \varepsilon B_i^{(1)}(a_1, \dots, a_k) + \varepsilon^2 \dots \end{aligned} \quad (21)$$

Подальше визначення і методика побудови цих асимптотичних розв'язків відомі з [4].

4. Митропольский Ю. А., Мосеев Б. И. Асимптотические решения уравнений в частных производных. - К.: "Вища школа". - 1976. - 590с.
5. Митропольский Ю. О., Мосеев Б. И. Дослідження коливань в системах з розподіленими параметрами (асимптотичні методи). Київ, Вид-во Київ. ун-ту, 1961, 121с.

Надійшла до редакції 19.04.2007

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК

Антонюк М. А.

Інформаційні технології переводять освіту на якісно новий рівень

В роботі проаналізовано тенденції розвитку електронного навчання в системі сучасної освіти.

Ключові слова: електронне навчання, інформаційні технології, освіта, учбовий курс.

Вступ

В основі сучасного етапу розвитку суспільства вирішальну роль відіграє інформація, безперервне оновлення знань. На межі третього тисячоліття відбулась революція на основі сучасної комп'ютерної техніки та телекомунікаційних засобів зв'язку, що ще більше посилює вагомість інформації та науки. Інформація перетворилася в невичерпне джерело розвитку людства, яке вступило в епоху інтенсивного освоєння інформаційних ресурсів. Саме ефективне використання інформації і способів її обробки для організації та управління всіх сторін життя суспільства дозволило розвинутим країнам увійти в нову цивілізацію.

Вдосконалення пристроїв та процесів їх використання за допомогою електроніки набувають дедалі масштабніших розмірів. І в результаті ми маємо що певні галузі набувають ознак «електронних»: фінансові, комерційні операції відбуваються «електронним» шляхом – і виникає електронна комерція (e-commerce); листування між людьми відбувається за допомогою «електронної» пошти (e-mail); освіта переміщується з аудиторій до електронних мереж – і виникає електронне навчання (e-learning). Приставка e- (електронний) виводить поняття на новий рівень сприйняття і означає повне або часткове переміщення явища, предмету чи процесу до електронного (віртуального) світу. Віртуальна реальність, це результат моделювання і симуляції, які дозволяють людині взаємодіяти зі штучним навколишнім середовищем.

Прогресивна система освіти повинна бути спроможна не тільки озброювати знаннями, але і в результаті постійного і швидкого оновлення знань в нашу епоху, формувати потреби в безперервному самостійному оволодінні ними, виховувати вміння і навички самоосвіти, самостійний і творчий підхід до знань на протязі

M. A. Antoniuk

Information technologies move education to new qualitative level

Tendencies of development of electronic education in modern education system have been analyzed in the work.

Key words: electronic education, information technologies, education, teaching course (materials)

всього активного життя людини. Освіта повинна стати таким соціальним інститутом, який був би здатний надавати людині різноманітні набори освітніх послуг, що дозволяють навчатися безперервно. Виходячи з цього важливим і перспективним напрямком розвитку системи освіти стає широке впровадження методів електронного навчання на основі використання сучасних педагогічних, перспективних інформаційних і телекомунікаційних технологій.

1. Загальні ознаки електронного навчання

Що ж таке електронне навчання? Електронне навчання (e-learning) – навчання з використанням електронних технологій, насамперед Інтернету, що дозволяє пройти курс навчання, з можливістю постійного діалогу з викладачем та іншими слухачами. Поняття електронне навчання хоча і асоціюється з вищою освітою чи спеціалізованим навчанням, охоплює навчання на всіх його рівнях.

До головних особливостей електронного навчання слід віднести:

Гнучкість. Студенти не відвідують, як правило, регулярних занять у вигляді лекцій, семінарів, а займаються в зручний для себе час, в зручному для них місці і темпі. Кожен може навчатися стільки, скільки йому особисто необхідно для засвоєння учбового курсу, тієї чи іншої дисципліни, отримання необхідних знань по обраній спеціальності;

Модульність. В основу програм електронного навчання закладається модульний принцип. Кожна окрема дисципліна (навчальний курс), яка засвоєна студентом, адекватна по змісту певній предметній області. Це дозволяє з набору незалежних (але зв'язаних логічно) навчальних курсів формувати навчальний план, який відповідає індивідуальним чи груповим потребам. З'являється та унікальна можливість,

яка не властива поки що традиційним формам отримання освіти, коли студент формує для себе практично персоніфікований навчальний план, що відображає його індивідуальні нахили;

Паралельність. Навчання при суміщенні з основною професійною діяльністю;

Масштабність. Відстань від територіального місцезнаходження студента до місця розташування освітнього закладу не є перешкодою для ефективного освітнього процесу;

Асинхронність. В процесі навчання кожен конкретний викладач і конкретний студент можуть реалізовувати процес електронного навчання незалежно від інших, за зручним для кожного графіком, тобто їх одночасна взаємодія не є обов'язковою;

Масовість. Кількість студентів не є критичним параметром. Вони мають доступ до будь-яких джерел навчальної та довідкової інформації (електронні бібліотеки, інформаційні бази даних) незалежно від їх кількості;

Викладач. З'являється якісно нова роль і специфічні функції викладача;

Інтернаціональність. Дистанційна освіта значною мірою сприяє обміну освітніми послугами між країнами.

З розвитком електронного навчання пов'язується можливість вирішити ряд соціально-економічних проблем: підвищення загальноосвітнього рівня населення; розширення доступу до вищих рівнів освіти; задоволення потреб у вищій освіті; організація регулярного підвищення кваліфікації різних спеціалістів. Ефективність цього процесу оцінюється на основі показників, які орієнтовані на критерії, що визначають наявність і динаміку розвитку творчого потенціалу (креативність).

Також за допомогою електронного навчання можна досягнути ще однієї цілі – оцінки ефективності програм та способів навчання, навчальних матеріалів та посібників. Така Оцінка може здійснюватися в двох напрямках: через оцінку успішності програми і через освітній ефект програми. Успішність програми має більшою мірою кількісний характер, а саме:

- кількість студентів;
- бажання продовжити навчання в системі електронного навчання.

Оцінка навчаючої програми через освітній ефект пов'язана з діяльністю студентів і аналізом підсумкових даних. Оцінка освітнього ефекту проходить через:

- бажання продовжувати навчання (по даному курсу чи іншим курсам, реалізованими в

системі електронного навчання);

- вироблення нового стереотипу взаємодії «викладач-студент»;
- реорганізація власної діяльності;
- оволодіння новими формами навчальної роботи (написання рефератів, наукова діяльність);
- оволодіння навичками роботи на комп'ютері і в телекомунікаційному середовищі;
- робота з цілями педагогічної діяльності (визначення різноманітних форм роботи і типів розумової праці).

Залишається відкритим питання про вироблення нового стереотипу взаємодії між викладачем та студентом. Опосередковане спілкування (за допомогою електронної пошти, відеоконференцій і т.п.) дозволяє максимально реалізувати особистісну позицію. У всіх формах електронного навчання реалізується прояв і розвиток суб'єктної позиції. Таким чином, стимулювання і розвиток розумової діяльності визначає стратегію організації пізнавальної діяльності в електронному навчанні.

2. Існуючі системи електронного навчання

Різнороманітність та відкритість програмних інструментальних засобів реалізації електронного навчання досягла такої точки коли пересічному викладачеві можна самому створювати навчальні курси, систематизувати та впроваджувати існуючі учбові курси, а також їх адмініструвати. Вони розрізняються як по функціональності так і по аудиторії, для якої вони призначені. В основі більшості лежить інтерфейс користувача для завантаження та передачі навчальних матеріалів, обмін інформацією за допомогою електронної пошти, тестування (складання екзаменів). Багато платформ також включають форуми, дискусійні списки, дошки об'яв.

Найбільш популярними у світі на цей час є системи організації електронного навчання WebCT (World Wide Web Course Tools), Lotus Learning Space, Microsoft Class Server.

WebCT – недорога система асинхронного навчання та управління, розроблена Департаментом комп'ютерних наук в Університеті Британської Колумбії. Пакет WebCT не обмежує викладача у виборі інструментів для формування авторських курсів. Діапазон типів навчальних курсів може бути від простих структурованих послідовних курсів до динамічних, інтерактивних віртуальних класів. Структура курсу залежить від змісту й складності

досліджуваного матеріалу, а також від методології взаємодії викладач-учень. Пакет WebCT забезпечує поступову адаптацію учня до інтерактивного середовища навчання й в остаточному підсумку вона стає альтернативою природному способу навчання в аудиторіях. В Україні цей пакет взято за базовий при створенні Української системи дистанційного навчання при Львівському інституті менеджменту.

Lotus Learning Space є сімейством продуктів для асинхронно-синхронного подавання інформації з використанням Інтернет технологій. Це масштабована, гнучка платформа для управління електронним навчанням, навчальними планами і каталогами електронних ресурсів у масштабі підприємства. Learning Space надає можливість навчатись і викладати в асинхронному режимі і приймати участь в on-line заняттях в режимі реального часу. Користувач може створювати контент в будь-яких інших програмах і розміщувати створений матеріал в Learning Space. Програма має гнучку систему редагування і адміністрування курсів, дозволяє вибирати різноманітні режими викладання і слідкувати за поточними результатами роботи учнів. Орієнтована передусім на корпоративних користувачів, бо потребує придбання та обслуговування додаткових програмних середовищ, що суттєво підвищує вартість системи та її обслуговування.

Microsoft Class Server (MCS) – сучасна платформа для управління навчальним процесом. Являє собою структуру для розвитку нових форм навчання в одному або декількох класах або навчальних закладах. MCS підтримує основні відкриті стандарти в сфері навчання: сертифікація SIF (обмін даними); підтримка SCORM (формат контенту); сумісність із IMS (формат архівації контенту); підтримка XML (навчальний план зберігається у файлі XML). Програмні продукти третіх фірм можуть бути інтегровані з MCS за допомогою .Net API і Web Service. Також можуть бути написані додаткові Web-частини для реалізації власних елементів візуального інтерфейсу. Відкрита архітектура системи дає можливість використовувати MCS для взаємодії методистів і викладачів, викладачів і учнів, а також їхніх батьків Система може використовуватися як у школах, так і у вищих навчальних закладах.

3. Складові електронного навчання

В основі процесу навчання завжди лежить передача інформації від викладача до студента. У цьому змісті будь-яку технологію, застосовувану

в освіті, можна називати інформаційною. З іншого боку, нерідко термін «інформаційні технології» застосовують стосовно всіх технологій, що базуються на використанні комп'ютерної техніки й засобів телекомунікації. Щоб уникнути неправильної інтерпретації, визначимо три поняття, що мають першорядне значення для електронного навчання. Це:

- навчальна інформація;
- навчальні технології;
- інформаційні технології.

Навчальна інформація – це знання, які необхідно передати тому, кого навчають, для того, щоб він міг кваліфіковано виконувати ту чи іншу діяльність.

У дисциплінарній моделі навчання, властивій очній системі освіти, інтерпретатором знань виступає викладач. При електронному навчанні інтерпретатором у більшій мірі є сам студент і тому до якості навчальної інформації й способам її подання повинні пред'являтися підвищені вимоги.

Насамперед, це відноситься до новостворюваних електронних підручників, а також до інформаційних баз і банків знань, довідкових і експертних систем, що використовуються для цілей освіти. Інформація, що представляється в них, на відміну від поліграфічної, повинна мати зовсім іншу організацію й структуру. Це обумовлено як психофізіологічними особливостями сприйняття інформації на екрані комп'ютера, так і технологією доступу до неї.

Навчальні технології – це комплекс дидактичних методів і прийомів, що використовуються для передачі навчальної інформації від її джерела до споживача й залежить від форми її подання.

Особливістю навчальних технологій є випереджуючий характер їхнього розвитку стосовно технічних засобів. Справа в тому, що впровадження комп'ютерної техніки в освіту приводить до перегляду всіх компонентів процесу навчання. В інтерактивному середовищі «учень – комп'ютер – викладач» велика увага повинна приділятися активізації образного мислення за рахунок використання технологій синтетичного мислення. Інакше кажучи, головним моментом в навчальних технологіях електронного навчання стає візуалізація думки, інформації, знань.

До навчальних технологій, найбільш пристосованими для використання в електронному навчанні, відносяться:

- відео-лекції;

- мультимедіа-лекції й лабораторні практикуми;
- електронні мультимедійні підручники;
- комп'ютерні навчальні й тестуючі системи;
- імітаційні моделі й комп'ютерні тренажери;
- консультації й тести з використанням телекомунікаційних засобів;
- відеоконференції.

Інформаційні технології – це апаратно-програмні засоби, що базуються на використанні обчислювальної техніки і забезпечують зберігання й обробку навчальної інформації, доставку її тому, кого навчають, інтерактивну взаємодію студента з викладачем або педагогічним програмним засобом, а також тестування знань студента.

У навчальному процесі важлива не інформаційна технологія сама по собі, а те, наскільки її використання служить досягненню навчальних цілей. Вибір засобів комунікації повинен визначатися змістом, а не технологією. Це означає, що в основі вибору технологій повинно лежати дослідження змісту навчальних курсів, ступеня необхідної активності студентів, їх залучення в навчальний процес, конкретних цілей і очікуваних результатів навчання й т.п. Результат навчання залежить не від типу комунікаційних і інформаційних технологій, а від якості розробки й надання курсів.

Виходячи з вищесказаного можемо сформулювати **основні вимоги** до нової моделі навчання – електронного навчання:

- перехід від директивного стилю навчання до спільної співпраці педагогів і студентів (учнів);
- індивідуальне мобільне налаштування навчаючої системи з урахуванням не тільки вимог навчального закладу, а й особливостей і інтересів особистості що навчається;
- вільний доступ до інформації і контроль за її використанням;
- наявність базової інформаційної культури (володіння загальносистемними та мереженими програмними засобами: редакторами, поштовими програмами, браузером) і потреба до саморозвитку.

Висновки

Впровадження в освітніх закладах комп'ютерних програм навчального призначення показує, що важливим фактором, що перешкоджає їхньому широкому застосуванню, є

неповна відповідність матеріалу інструментальних програмних засобів ідеям і методам викладання тієї або іншої дисципліни. Багато педагогів проявляють значну обережність і навіть острах у використанні навчальних програм і педагогічних програмних засобів. Сучасному більш менш досвідченому педагогові, скоріше потрібний не диск із повним мультимедійним курсом по предмету, а деякі елементарні цеглинки, які він міг би використати як ілюстрації своїх ідей і методів, і які більш органічно вписались би у звичне для нього традиційне використання наочного приладдя.

У зв'язку із цим представляється доцільним створення інструментальних комплексів, які не лише дозволяють створювати закінчену навчальну продукцію, а є своєрідних електронних конструкторів – інструментальних програмних засобів для створення педагогом власних електронних учбових курсів (авторських систем).

Список використаних джерел

1. Андреев А.А., Солдаткин В.И. Дистанционное обучение: сущность, технология, организация. – М.: Издательство МЕСИ, 1999. – 196 с.
2. Интернет-технологии в образовании: Учебно-методическое пособие. Ч.3. Тамбов: Изд-во ТГТУ, 2002. – 114 с.
3. Комп'ютерно-орієнтовані системи навчання: Зб. наук. пр. / Редкол. – К: НПУ ім. М.П. Драгоманова. – Випуск 4. – 2001
4. Агапонов С.В., Джалишвили З.О., Кречман Д.Л., Никифоров И.С., Неносова Е.С., Юркив А.В. Средства дистанционного обучения. Методика, технология, инструментарий. – СПб.: БХВ+Петербург, 2003. – 336с.
5. Гершунский Б.С. Философия образования. – М.: МПСИ, Флинта, 1998. – 432с.
6. Кудрявцева С., Колос В. Трансформація системи освіти України на основі впровадження сучасних комунікаційних технологій // Праці семінару НЦІТН, К. 2000.
7. Некора О. Навчання на відстані: можливості, переваги, недоліки // Надзвичайна ситуація. – 2005. – № 1. – С. 22-23.
8. Астат'єва М. Дистанційне навчання – це данина моді, а вимога часу // Рідна школа. – 2003. – № 10. – С. 28-29

Надійшла до редакції
27.03.2007

УДК 517.9:519.3

І.В. Бейко, доктор техн.наук, проф.,
Л.Ю.Бодачівська, канд. техн-наук,
П.М.Зінько, канд. фіз.-мат. наук, доцент

Системний аналіз процесів підвищення техніко-експлуатаційних характеристик свердловин

У даній роботі розроблено моделі і методи
для системного аналізу і комплексної
оптимізації технологічних систем і свердловин
для відновлення техніко-економічних
характеристик в умовах неповних даних.

Ключові слова: системний аналіз,
математичне моделювання, чисельні
алгоритми, рівняння в частинних похідних

E-mail: zinko@unicyb.kiev.ua

В процесі експлуатації та капітального
ремонті свердловин в продуктивному пласті
проходять процеси, які приводять до зміни
колекторських властивостей гірських порід і
перш за все в привибійній зоні, яка прилягає до
стовбура свердловини. Встановлено, що через
використання неякісних технологічних рідин,
головним чином на водній основі, в багатьох
випадках спостерігається повна ізоляція
свердловини від пласта як в процесі розкриття
продуктивних пластів бурінням і цементуванням
колон, так і в процесі експлуатації і ремонту.
внаслідок чого продуктивні об'єкти знижують
нафтогазовидобуток. Негативні аспекти впливу
технологічних систем (ТС) на продуктивний
пласт найбільше проявляються в процесах
глушіння свердловин, на прикладі яких ми і
зосередимо свою увагу в даній роботі.

Процес глушіння свердловин охоплює
комплекс робіт, який включає підбір та
приготування ТС (рідини, гелі, емульсії, суспензії
та їх суміші), а також забезпечення умов та
технологічних режимів використання ТС для
створення необхідного протитиску на
продуктивний пласт з метою забезпечення
можливостей ефективного проведення ремонтних
робіт.

На даний час переважна більшість крупних
газоконденсатних родовищ уже знаходиться у
стадії спадаючого видобутку і експлуатація
свердловин ведеться в умовах низьких пластових
тисків. Це вимагає створення та використання
полегшених інвертних ТС із певними

I.Beyko, Dr.Tech.Sci, prof.,
L. Bodachivska, PhD,
P.Zinko, PhD

System analysis of well repair process

*In the paper we develop models and methods
for system analysis and complex optimization of
technology systems and wells providing an objective
estimation of the attained technical level and its
economical efficiency under incomplete data.*

*Key Words: system analysis, mathematical
modeling, numerical algorithms, partial differential
equation*

властивостями, які відповідають умовам
конкретних родовищ. Необхідність використання
саме інвертних ТС обумовлена тим, що глобули
води і твердих наповнювачів у вуглеводнях
ефективно перекривають обводнену частину
колектора з розмірами фільтраційних каналів
понад 100 мкм, а у випадку проникнення в
продуктивний пласт легко витісняються з
порового середовища спорідненою пластовою
вуглеводневою продукцією, яка поступає у
свердловину в процесі її експлуатації.
Оптимізація ТС здійснюється за критеріями
забезпечення мінімальної густини, міжфазового
натягу, стійкості до розділення фаз,
фільтраційних втрат та необхідної в'язкості.
Задача відшукування оптимальних параметрів
емульсійно-суспензійних систем для проведення
процесу глушіння свердловини із забезпеченням
максимального дебіту, високої екологічної
безпеки та економічного ефекту є задачею
багатокритеріальної оптимізації. Практична
реалізація оптимальної технології глушіння
вимагає розв'язання таких підзадач:

- оцінювання стану привибійної зони
свердловини,
- підбір технологічної системи для
проведення процесу глушіння
свердловини,
- проведення процесу глушіння за
обчисленими оптимальними значеннями
технологічних параметрів.

Конфігурація привибійної зони
свердловини (ПЗС), її розміри та гідродинамічні

параметри визначають гідравлічний зв'язок свердловини з пластом і суттєво впливають на її продуктивність. Оскільки розміри та гідродинамічні параметри ПЗС постійно змінюються протягом усього періоду розробки, об'єктивну якісну і кількісну характеристику стану пласта, ПЗС і продуктивності свердловини дають результати гідродинамічних досліджень свердловин і пластів. В натурних умовах ПЗС із зміненими гідродинамічними характеристиками пласта не має строгої геометричної форми, її морфологія складна і багатогранна. Для зручності вивчення і оцінки гідродинамічних властивостей ця зона приймається циліндричною, а її простирання в глибину пласта характеризується певним радіусом. Для спрощення гідродинамічних розрахунків вважаємо, що поровий газонасичений пласт є ізотропним, практично кругом.

У загальному випадку моделі причинно-наслідкових залежностей будуються в класі параметричних p -моделей, які оптимізуються до вигляду граф-операторних моделей, вершинами яких є оптимізовані робочі моделі усіх n підсистем

$$A_k(x^k, u^k, p^k, q^k, z^k) = 0, \quad k \in \{1, \dots, n\},$$

де k – номер підсистеми, A_k – параметричний оператор, що визначає зв'язок між x^k – станом k -ої підсистеми, u^k – керування k -ю підсистемою, q^k – збурення k -ої підсистеми, якими описується неповнота даних, p^k – параметри моделі, z^k – вплив стану інших підсистем із її зовнішнього середовища на стан k -ої підсистеми, $z^k = Z^k(x^{l(k)}, u^{l(k)}, p^k, q^k)$, $l(k)$ – індексна множина номерів тих підсистем стан яких впливає на стан k -ої підсистеми.

$$x^{l(k)} = \{x^i \mid i \in l(k) \subset \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{k\}\},$$

$$u^{l(k)} = \{u^i \mid i \in l(k) \subset \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{k\}\}.$$

Підсистемами є моделі руху газоконденсату у продуктивному пласті, ПЗС та безпосередньо в самій свердловині. Для видобувної свердловини, яка пронизує товщу гірських порід від поверхні до продуктивного шару, взаємодіючі підсистеми включають підсистеми руху продукції по пласту, у привибійній зоні та у стовбурі свердловини.

Процес фільтрації в продуктивному шарі характеризується малими швидкостями плинну і великими поверхнями теплообміну. При невисоких тисках фільтрація рідин описується узагальненим законом Дарсі для обох фаз (1 – ТС, 2 – газоконденсат)

$$\begin{aligned} v_1 &= -\frac{k}{\mu_1} k'_1(s) \left(\frac{\partial p_1}{\partial z} - \rho_1 g \right), \\ v_2 &= -\frac{k}{\mu_2} k'_2(s) \left(\frac{\partial p_2}{\partial z} - \rho_2 g \right), \end{aligned} \quad (1)$$

а рівняння нерозривності

$$\frac{m \partial s}{\partial t} = (-1)^i \frac{\partial v_i}{\partial z}, \quad i = 1, 2, \quad (2)$$

де v_i – швидкість фільтрації відповідних фаз, $s(z, t)$ – насиченість, μ_i, ρ_i – в'язкість і густина відповідних фаз, m – пористість, g – сила тяжіння ($g = 9,8 \text{ Н/кг}$), $k, k'_i(s)$ – абсолютна та фазові проникності.

Тиски у фазах пов'язані між собою капілярним тиском

$$p_c(s) = p_1(s) - p_2(s), \quad (3)$$

$$p_c(s) = \sigma J(s) \cos \theta / \sqrt{k/m},$$

де $p_i(s)$ – тиски відповідних фаз, p_c – капілярний тиск, σ – поверхневий натяг ТС, θ – статичний кут змочування, $J(s)$ – функція Леверета отримана експериментально у такій формі:

$$J(s) = \begin{cases} 0,1 \left(\frac{1-s^*}{s^*} - 1 \right), & 0 \leq s \leq s^*, \\ 0,1 \left(\frac{1-s^*}{s} - 1 \right), & s^* < s < 1-s^*, \\ 0, & 1-s^* \leq s \leq 1. \end{cases}$$

Тут s^* – залишкова повітряна насиченість, а s_* – залишкова нафтова насиченість. Система рівнянь (1)-(3) замкнута і після певних перетворень з перепозначеннями $k_i(s) = k'_i(s) / \mu_i$, $i = 1, 2$ зводиться до рівняння насиченості [1]

$$m \frac{\partial s}{\partial t} = k \frac{\partial}{\partial z} \left[k_1(s) \left(\frac{\partial p_1(s)}{\partial z} - \frac{\partial p_2(s)}{\partial z} - \rho_1 g \right) \right], \quad (4)$$

яке повинно задовольняти умови

$$p_2(z, t)|_{z=0} = p_1(z, t)|_{z=0} = \rho_1 g h(t),$$

$$h(t) = h_0 - m \int_0^H s(z, t) dz,$$

$$p_2(z, t)|_{z=H} = \rho_2 g h(t),$$

$$s(z, t)|_{t=0} = 0,$$

$$\begin{cases} s(z, t)|_{z=0, t < T} = 1 - s^*, \\ p'_c \frac{\partial s}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial p_2(s(\tau, t))}{\partial z} - \rho_1 g, z = 0, t \geq T, \end{cases}$$

$$p'_c \frac{\partial s}{\partial z} \Big|_{z=H} = \frac{\partial p_2(s(\tau, t))}{\partial z} - \rho_1 g, z = H,$$

де $h(t)$ – поточна товщина шару ТС на поверхні, h_0 – початкова товщина шару ТС на поверхні, H – товщина шару насичення.

Нескладними перетворення від рівняння (4) переходимо до наступного

$$\begin{aligned} \frac{\partial s(z, t)}{\partial t} = & \frac{\partial^2 s(z, t)}{\partial z^2} \cdot \varphi_1(s(z, t)) + \\ & + \left(\frac{\partial s(z, t)}{\partial z} \right)^2 \cdot \varphi_2(s(z, t)) + \\ & + \frac{\partial s(z, t)}{\partial z} \cdot \varphi_3(s(z, t)), \end{aligned} \quad (5)$$

де

$$\varphi_1(s(z, t)) = \frac{k}{m} \cdot k_1(s(z, t)) \left[\frac{\partial p_2(s(z, t))}{\partial s} - \frac{\partial p_c(s(z, t))}{\partial s} \right];$$

$$\begin{aligned} \varphi_2(s(z, t)) = & \frac{k}{m} \left[k_1(s(z, t)) \left(\frac{\partial^2 p_2(s(z, t))}{\partial s^2} - \frac{\partial^2 p_c(s(z, t))}{\partial s^2} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\partial k_1(s(z, t))}{\partial s} \left(\frac{\partial p_2(s(z, t))}{\partial s} - \frac{\partial p_c(s(z, t))}{\partial s} \right) \right]; \end{aligned}$$

$$\varphi_3(s(z, t)) = -\frac{k}{m} \cdot \frac{\partial k_1(s(z, t))}{\partial s} \rho_1 g.$$

Вводимо по змінній z сітку ω_Δ

$$\omega_\Delta = \{z_i = i \cdot \Delta, i = 0, 1, \dots, N, \Delta = H/N\}.$$

Рівняння (5) в точці z_i має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{ds(z_i, t)}{dt} = & \frac{\partial^2 s(z_i, t)}{\partial z^2} \cdot \varphi_1(s(z_i, t)) + \\ & + \left(\frac{\partial s(z_i, t)}{\partial z} \right)^2 \cdot \varphi_2(s(z_i, t)) + \\ & + \frac{\partial s(z_i, t)}{\partial z} \cdot \varphi_3(s(z_i, t)); \quad i = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Скористаємось відомими апроксимаціями першої та другої похідних функції $s(z, t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial s(z_i, t)}{\partial z} = & \frac{s(z_i + \Delta, t) - s(z_i - \Delta, t)}{2\Delta} + O(\Delta^2), \\ \frac{\partial^2 s(z_i, t)}{\partial z^2} = & \frac{s(z_i + \Delta, t) - 2s(z_i, t) + s(z_i - \Delta, t))}{\Delta^2} + \\ & + O(\Delta^2). \end{aligned} \quad (7)$$

Отримаємо з (6) із врахуванням (7)

$$\begin{aligned} \frac{ds(z_i, t)}{dt} = & \frac{1}{\Delta^2} \cdot \varphi_1(s(z_i, t)) [s(z_i + \Delta, t) - \\ & - 2s(z_i, t) + s(z_i - \Delta, t)] + \\ & + \frac{1}{4\Delta^2} \cdot \varphi_2(s(z_i, t)) [s^2(z_i + \Delta, t) + \\ & + s^2(z_i - \Delta, t) - 2s(z_i + \Delta, t) \cdot s(z_i - \Delta, t)] + \\ & + \frac{1}{2\Delta} \cdot \varphi_3(s(z_i, t)) [s(z_i + \Delta, t) - \\ & - s(z_i - \Delta, t)], \quad i = \overline{1, N-1}, \end{aligned} \quad (8)$$

Позначимо $s(z_i, t) = s_i(t)$, $i = \overline{0, N}$.

Формула (8) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \frac{ds_i(t)}{dt} = & s_{i-1}(t) \left[\frac{\varphi_1(s_i(t))}{\Delta^2} - \frac{\varphi_3(s_i(t))}{2\Delta} \right] - \\ & - s_i(t) \left[\frac{2 \cdot \varphi_1(s_i(t))}{\Delta^2} \right] + \\ & + s_{i+1}(t) \left[\frac{\varphi_1(s_i(t))}{\Delta^2} + \frac{\varphi_3(s_i(t))}{2\Delta} \right] + \\ & + s_{i-1}^2(t) \cdot \frac{\varphi_2(s_i(t))}{4\Delta^2} + \\ & + s_{i+1}(t) s_{i-1}(t) \cdot \frac{\varphi_2(s_i(t))}{2\Delta^2}, \quad i = \overline{1, N-1}, \end{aligned} \quad (9)$$

або у векторній формі

$$\frac{ds(t)}{dt} = f(s(t), t). \quad (10)$$

Для розв'язування системи (10) скористасмося формулою наближеного обчислення розв'язку задачі Коші [2]

$$\begin{aligned} s(t + \delta) = & r(t + \delta) + \\ & + \int_t^{t+\delta} [f(r(\tau), \tau) - dr(\tau)/d\tau] d\tau, \end{aligned} \quad (11)$$

де $\delta > 0$ – крок інтегрування, $r(\tau)$ – “прогнозна” функція. Якщо виберемо “прогнозу” функцію $r(\tau)$ у вигляді

$$\begin{aligned} r(\tau) = & s(t) + (\tau - t) f(s(t), t) \\ & + O(\delta^2), \quad \tau \in [t - \delta, t + \delta], \end{aligned} \quad (12)$$

тоді з (12) будемо мати

$$\begin{aligned} r(t + \delta) = & s(t) + \delta \cdot f(s(t), t), \\ \frac{dr(\tau)}{d\tau} = & f(s(t), t). \end{aligned} \quad (13)$$

Підставивши (13) у формулу (11), одержимо

$$\begin{aligned} s(t + \delta) = & s(t) + \delta f(s(t), t) + \\ & + \int_t^{t+\delta} [f(r(\tau), \tau) - f(s(t), t)] d\tau. \end{aligned} \quad (14)$$

Використавши в (14) формулу трапеції наближеного обчислення інтегралів (похибка якої $O(\delta^3)$), одержимо

$$\begin{aligned} s(t + \delta) = & s(t) + \frac{\delta}{2} [f(s(t), t) + \\ & + f(r(t + \delta), t + \delta)]. \end{aligned} \quad (15)$$

Наближене значення $s(t + \delta)$ апроксимує розв'язок задачі Коші (10) в точці $t + \delta$ з похибкою $O(\delta^3)$.

Розроблений програмний комплекс для оптимізації технологічного процесу капітального ремонту свердловин на Ямбурзькому газоконденсатному родовищі дозволив отримати економічний ефект понад 400 тис. грн., дебіт – 45 тис. м³/добу на одну свердловину.

Література

1. Бодачівська Л.Ю., Поп Г.С., Бейко І.В. Оптимізація технологічних систем глибокого свердловин в умовах низьких пластових тисків // Вісник Київ. ун-ту. Серія: фіз.-мат. науки. 2004. вип. №4. – С.152-157.
2. Зінко П.М. Неявна різницева схема для розв'язування неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами // Вісник Київ. ун-ту. Серія: фіз.-мат. науки – 2006. – Вип. №2. – С.186-191.

Надійшла до редакції 12 квітня 2007 р.

УДК 517.95.001.573

Бомба* А.Я., д.т.н., проф., Климчук Ю.Є.,
Скопечкий В.В., чл.-кор. НАНУ, проф.

Просторові нелінійні сингулярно збуджені крайові задачі типу "конвекція-дифузія" в анізотропних середовищах

Побудовано просторовий аналог плоскої крайової задачі на квазіконформне відображення криволінійного чотирикутника на прямокутник для анізотропних середовищ і на цій основі одержано алгоритм асимптотичного наближення розв'язку нелінійної сингулярно збудженої крайової задачі типу "конвекція-дифузія" в криволінійному паралелепіпеді, обмеженому двома еквіпотенціальними поверхнями та чотирма поверхнями течії, у випадку многочленної залежності коефіцієнта дифузії від концентрації, коли на вході і виході фільтраційної течії задаються умови третього роду.

Ключові слова: просторова нелінійна сингулярно збуджена крайова задача, квазіконформне відображення, розподіл концентрації.

* E-mail: abomba@ukr.net

На основі [1-4] в [5-9] розроблено підхід до розв'язання двовірних задач для рівнянь конвективної дифузії при фільтрації підземних вод, що ґрунтується на переході від криволінійної фізичної області фільтрації, обмеженої лініями течії і сквіпотенціальними лініями, до відповідної області комплексного потенціалу. Послугуючи цей підхід із числово-асимптотичними методами отримані розв'язки найбільш типових плоских задач "фільтрація-конвекція-дифузія-реакція", зокрема задач для багатозв'язних областей [7, 10-11], задач гетеродифузії [12-13], нелінійних задач із запізненням [8]. У роботі [9] побудовано просторовий аналог плоскої крайової задачі на конформне відображення криволінійного чотирикутника на прямокутник і, на цій основі, одержано асимптотичне розв'язання розв'язку сингулярно збудженої крайової задачі для рівняння конвективної дифузії у криволінійному паралелепіпеді обмеженому двома сквіпотенціальними поверхнями та чотирма поверхнями течії. У даній роботі йдеться про побудову просторового аналогу плоскої крайової задачі

Bomba* A.Ya., d. t. s., prof.,
Klymyuk Yu.E.,
Scopecky V.V., prof.

3D nonlinear singular indignant boundary "convection-diffusion" problems in anisotropic mediums

3D analogue of a flat boundary value problem on quasiconformal mapping of a curvilinear quadrangle on a rectangular for the anisotropic mediums is constructed. On this basis algorithm of asymptotic approximation of solution of the nonlinear singular indignant boundary value "convection-diffusion" problem in the curvilinear parallelepiped, bounded by two equipotential surfaces and four surfaces of the current, in case of polynomial dependence of the factor of diffusion from concentration, when the conditions of the third sort are set on an input and an output of filtrational current, is received.

Key Words: 3D nonlinear singular indignant boundary value problem, quasiconformal mapping, distribution of concentration.

на квазіконформне відображення і розв'язання нелінійних просторових сингулярно збуджених крайових задач конвективної дифузії в анізотропному середовищі у випадку многочленної залежності коефіцієнта дифузії від концентрації, коли на вході і виході фільтраційної течії задаються умови третього роду.

Постановка задачі. Для області $G = G_z \times (0, \infty)$, де $G_z = ABCDA_z B_z C_z D_z$ ($z = (x, y, z)$) – однозв'язний криволінійний паралелепіпед (анізотропний пористий пласт), обмежений квазіортогональними між собою в кутових точках та вздовж ребер (тут „приреброві кути” на стільки відрізняються від прямих, на скільки в їх околах анізотропія „відхиляє” вектор швидкості від градієнта напору), еквіпотенціальними поверхнями $ABB_z A_z = \{z : f_1(x, y, z) = 0\}$, $CDD_z C_z = \{z : f_2(x, y, z) = 0\}$ та поверхнями течії $ADD_z A_z = \{z : f_3(x, y, z) = 0\}$, $BCC_z B_z = \{z : f_4(x, y, z) = 0\}$, $ABCD = \{z : f_5(x, y, z) = 0\}$, $A_z B_z C_z D_z = \{z : f_6(x, y, z) = 0\}$ (рис. 1а), розглянемо нелінійну модельну задачу:

$$\vec{v} = \kappa \cdot \text{grad } \varphi, \quad \text{div } \vec{v} = 0; \quad (1)$$

$$\varphi|_{ABBA_*} = \varphi_*, \quad \varphi|_{CDD_*A_*} = \varphi^*, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial n}|_{ADD_*A_* \cup A_*B_*C_*D_* \cup BCC_*B_* \cup ABCD} = 0; \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon \left(\frac{\partial C}{\partial x} \left(\left(a_0 + \sum_{s=1}^{\lambda} \varepsilon^s a_s C^s \right) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial C}{\partial y} \left(\left(a_0 + \sum_{s=1}^{\lambda} \varepsilon^s a_s C^s \right) \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\partial C}{\partial z} \left(\left(a_0 + \sum_{s=1}^{\lambda} \varepsilon^s a_s C^s \right) \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial t}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\alpha_1(x, y, z, t)C(x, y, z, t) + \beta_1(x, y, z, t)C_1(x, y, z, t)|_{ABBA_*} = \gamma_1(x, y, z, t),$$

$$\alpha_2(x, y, z, t)C(x, y, z, t) + \beta_2(x, y, z, t)C_2(x, y, z, t)|_{CDD_*A_*} = \gamma_2(x, y, z, t),$$

$$C(x, y, z, t)|_{ADD_*A_*} = c_{**}(x, y, z, t), \quad C(x, y, z, t)|_{BCC_*B_*} = c^{**}(x, y, z, t),$$

$$C(x, y, z, t)|_{ABCD} = c_{***}(x, y, z, t), \quad C(x, y, z, t)|_{A_*B_*C_*D_*} = c^{***}(x, y, z, t),$$

$$C(x, y, z, 0) = c_0^0(x, y, z), \quad (4)$$

де $\varphi = -\chi_* h$ – фільтраційний потенціал ($0 < \varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^* < \infty$), $h = h(x, y, z)$ – напір, $\kappa = \chi_*^{-1} \chi = (\kappa_{rs})_{r,s=1,2,3}$ – тензор проникності ($\kappa_{rs} = \kappa_{sr}$), $\chi = (\chi_{rs})_{r,s=1,2,3}$ – тензор (χ_* – його характерний розмір) і $\vec{v}$ – вектор швидкості фільтрації в точці $\mathbf{z} = (x, y, z)$ анізотропного пористого середовища ($|\vec{v}| = \sqrt{v_x^2(x, y, z) + v_y^2(x, y, z) + v_z^2(x, y, z)} > v_* \gg \varepsilon$), $C(x, y, z, t)$ – концентрація розчинної речовини в фільтраційній течії у точці (x, y, z)

в момент часу t , a_i ($i = \overline{0, \lambda}$) – дійсні числа, n – зовнішня нормаль до відповідної поверхні, ε – малий параметр ($\varepsilon > 0$), $\alpha_j(x, y, z, t)$, $\beta_j(x, y, z, t)$, $\gamma_j(x, y, z, t)$ ($j = \overline{1, 2}$), $c_{**}(x, y, z, t)$, $c^{**}(x, y, z, t)$, $c_{***}(x, y, z, t)$, $c^{***}(x, y, z, t)$, $c_0^0(x, y, z)$ – достатньо гладкі функції, узгоджені між собою вздовж ребер області G . При цьому квазігармонічна функція $\varphi = \varphi(x, y, z)$ (квазіпотенціал) задовольняє диференціальне рівняння:

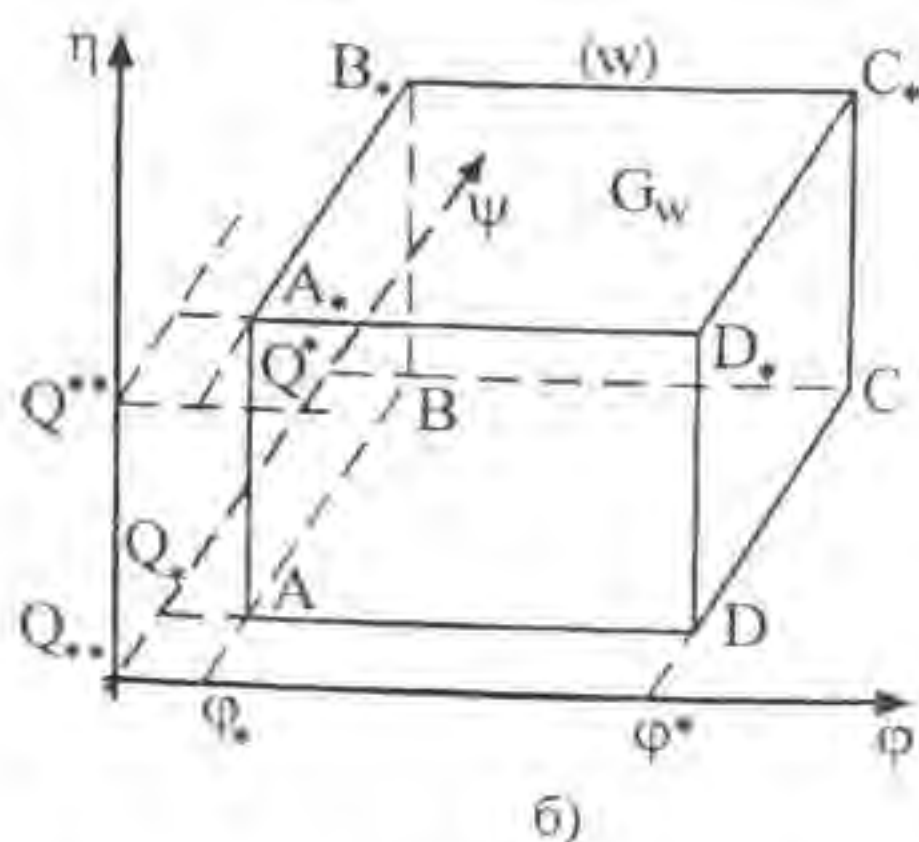
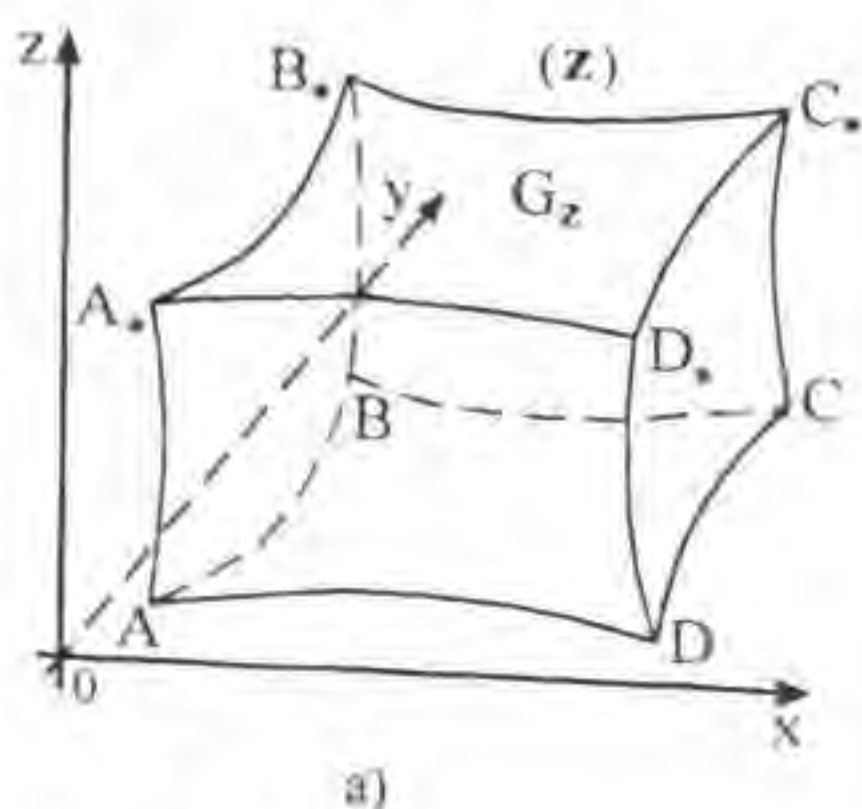


Рис. 1. Фізична область G_z (а) і відповідна область комплексного потенціалу G_w (б)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_{11}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \kappa_{12}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \kappa_{13}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa_{21}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \kappa_{22}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \kappa_{23}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_{31}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \kappa_{32}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \kappa_{33}(x, y, z, \varphi, \psi, \eta) \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Шляхом введення пари функцій $\psi = \psi|_{BCC_*B_*} = Q^*$, $\eta|_{ABCD} = Q_{**}$, $\eta|_{A_*B_*C_*D_*} = Q^{**}$, $= \psi(x, y, z)$, $\eta = \eta(x, y, z)$, “просторово квазі- комплексно спряжених” із функцією $\varphi = \varphi(x, y, z)$ тобто, таких, що: $\kappa \cdot \text{grad} \varphi(x, y, z) = \text{grad} \psi(x, y, z) \times \text{grad} \eta(x, y, z)$, $\text{grad} \psi(x, y, z) \times \text{grad} \eta(x, y, z) = 0$ і заміни третьої із граничних умов (2) на умови: $\psi|_{ADD_*A_*} = Q_*$, $Q_{**} \leq \eta \leq Q^{**}$ (рис. 1б):

$$\begin{cases} \kappa_{11} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \kappa_{12} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \kappa_{13} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\partial \psi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial z} - \frac{\partial \psi}{\partial z} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y}, \\ \kappa_{21} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \kappa_{22} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \kappa_{23} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\partial \psi}{\partial z} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial z}, \\ \kappa_{31} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \kappa_{32} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \kappa_{33} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x}, \\ \frac{\partial \psi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial z} = 0; \end{cases} \quad (6)$$

$$\varphi|_{ABBA_*A_*} = \varphi_*, \quad \varphi|_{BCC_*D_*} = \varphi^*, \quad \psi|_{ADD_*A_*} = Q_*, \quad \psi|_{BCC_*B_*} = Q^*, \quad \eta|_{ABCD} = Q_{**}, \quad \eta|_{A_*B_*C_*D_*} = Q^{**}, \quad (7)$$

де $Q = Q_0 \cdot Q^0$ – потік через довільний поперечний переріз течії ($Q_0 = Q^* - Q_*$, $Q^0 = Q^{**} - Q_{**}$ – потоки через відповідні горизонтальний та вертикальний “одиничні прошарки”).

Відповідна обернена до (6), (7) задача на

$$\begin{aligned} & I(x(\varphi, \psi, \eta), y(\varphi, \psi, \eta), z(\varphi, \psi, \eta)) \left(\kappa_{11} \left(\frac{\partial y}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} \right) + \right. \\ & + \kappa_{12} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} - \frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) + \kappa_{13} \left(\frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) \Big) = \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \times \\ & \times \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} - \frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} \right) - \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} - \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \psi} - \frac{\partial \varphi}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \psi} \right), \\ & I(x(\varphi, \psi, \eta), y(\varphi, \psi, \eta), z(\varphi, \psi, \eta)) \left(\kappa_{21} \left(\frac{\partial y}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} \right) + \right. \\ & + \kappa_{22} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} - \frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) + \kappa_{23} \left(\frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) \Big) = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} - \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} - \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) - \left(\frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} - \frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} \right), \\
 & I(x(\varphi, \psi, \eta), y(\varphi, \psi, \eta), z(\varphi, \psi, \eta)) \left(\kappa_{31} \left(\frac{\partial y}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} \right) + \right. \\
 & \left. + \kappa_{32} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} - \frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) + \kappa_{33} \left(\frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) \right) = \left(\frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} \right) \times \\
 & \times \left(\frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \varphi} - \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} \right) - \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} - \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} \right), \\
 & \left(\frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} - \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) + \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \times \\
 & \times \left(\frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \varphi} - \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial z}{\partial \psi} \right) + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} - \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \psi} - \frac{\partial x}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} \right) = 0, \tag{8}
 \end{aligned}$$

де I – яacobіан відповідного перетворення;

$$\begin{cases} f_1(x(\varphi_*, \psi, \eta), y(\varphi_*, \psi, \eta), z(\varphi_*, \psi, \eta)) = 0, \\ f_2(x(\varphi^*, \psi, \eta), y(\varphi^*, \psi, \eta), z(\varphi^*, \psi, \eta)) = 0, \\ f_3(x(\varphi, Q_*, \eta), y(\varphi, Q_*, \eta), z(\varphi, Q_*, \eta)) = 0, \\ f_4(x(\varphi, Q^*, \eta), y(\varphi, Q^*, \eta), z(\varphi, Q^*, \eta)) = 0, \\ f_5(x(\varphi, \psi, Q_{**}), y(\varphi, \psi, Q_{**}), z(\varphi, \psi, Q_{**})) = 0, \\ f_6(x(\varphi, \psi, Q^{**}), y(\varphi, \psi, Q^{**}), z(\varphi, \psi, Q^{**})) = 0, \end{cases} \quad \begin{matrix} \varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^*, \\ Q_* \leq \psi \leq Q^*, \\ Q_{**} \leq \eta \leq Q^{**} \end{matrix} \tag{9}$$

Припустимо, що задача на просторово-квazіконформне відображення $G_z \mapsto G_w$ (або $G_w \mapsto G_z$) є розв'язаною, зокрема, знайдено поле швидкості $\vec{v}$ і параметри Q_0, Q^0, Q .

Здійснивши заміну змінних $x = x(\varphi, \psi, \eta), y = y(\varphi, \psi, \eta), z = z(\varphi, \psi, \eta)$ у рівнянні (3) та умовах (4), приходимо до відповідної "дифузійної задачі" для області G_w :

$$\begin{aligned}
 & \varepsilon \cdot \left(\left(a_0 + \sum_{s=1}^{\lambda} \varepsilon^s a_s c^s \right) \cdot (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi\varphi} + b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi\psi} + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi\eta} + \right. \\
 & \quad \times c_{\eta\eta} + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) c_{\psi\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) c_{\psi\eta} + b_{3,1}(\varphi, \psi, \eta) c_{\eta\eta} + \\
 & \quad \left. + b_{3,2}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi\eta} + b_{3,3}(\varphi, \psi, \eta) c_{\eta\eta} \right) + \left(\varepsilon a_1 + \sum_{s=2}^{\lambda} s \varepsilon^s a_s c^{s-1} \right) \times \\
 & \quad \times (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi}^2 + b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi}^2 + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) c_{\eta}^2 + \\
 & \quad \left. + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi} c_{\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi} c_{\eta} \right) - q(\varphi, \psi, \eta) c_{\varphi} = \varepsilon_1, \tag{10}
 \end{aligned}$$

$$\alpha_1(\psi, \eta, t) c(\varphi_*, \psi, \eta, t) + \beta_1(\psi, \eta, t) c_{\varphi}(\varphi_*, \psi, \eta, t) = \gamma_1(\psi, \eta, t),$$

$$\alpha_2(\psi, \eta, t) c(\varphi^*, \psi, \eta, t) + \beta_2(\psi, \eta, t) c_{\varphi}(\varphi^*, \psi, \eta, t) = \gamma_2(\psi, \eta, t),$$

$$c(\varphi, Q_*, \eta, t) = c_{**}(\varphi, \eta, t), \quad c(\varphi, Q^*, \eta, t) = c^{**}(\varphi, \eta, t),$$

$$c(\varphi, \psi, Q, \dots, t) = c_{\dots}(\varphi, \psi, t), \quad c(\varphi, \psi, Q^{\dots}, t) = c^{\dots}(\varphi, \psi, t),$$

$$c(\varphi, \psi, \eta, 0) = c_0^0(\varphi, \psi, \eta), \quad (11)$$

де

$$c = c(\varphi, \psi, \eta, t) = C(x(\varphi, \psi, \eta), y(\varphi, \psi, \eta), z(\varphi, \psi, \eta), t),$$

$$b_{1,1} = \varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2, \quad b_{1,2} = \psi_x^2 + \psi_y^2 + \psi_z^2, \quad b_{1,3} = \eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2,$$

$$b_{2,1} = 2(\varphi_x \psi_x + \varphi_y \psi_y + \varphi_z \psi_z), \quad b_{2,2} = 2(\varphi_x \eta_x + \varphi_y \eta_y + \varphi_z \eta_z), \quad b_{3,1} = \varphi_{xx} + \varphi_{yy} + \varphi_{zz},$$

$$b_{3,2} = \psi_{xx} + \psi_{yy} + \psi_{zz}, \quad b_{3,3} = \eta_{xx} + \eta_{yy} + \eta_{zz}, \quad q = v_x \varphi_x + v_y \varphi_y + v_z \varphi_z$$

або

$$b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{1}{I^2} \left((y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi)^2 + (x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta)^2 + (x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi)^2 \right),$$

$$b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{1}{I^2} \left((y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta)^2 + (x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi)^2 + (x_\eta y_\varphi - x_\varphi y_\eta)^2 \right),$$

$$b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{1}{I^2} \left((y_\varphi z_\psi - y_\psi z_\varphi)^2 + (x_\psi z_\varphi - x_\varphi z_\psi)^2 + (x_\varphi y_\psi - x_\psi y_\varphi)^2 \right),$$

$$b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{1}{I^2} \left((y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi)(y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta) + (x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta) \times \right. \\ \left. \times (x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi) + (x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi)(x_\eta y_\varphi - x_\varphi y_\eta) \right),$$

$$b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{1}{I^2} \left((y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi)(y_\varphi z_\psi - y_\psi z_\varphi) + (x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta) \times \right. \\ \left. \times (x_\psi z_\varphi - x_\varphi z_\psi) + (x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi)(x_\varphi y_\psi - x_\psi y_\varphi) \right),$$

$$b_{3,1}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi}{I} \right) \cdot \frac{y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi}{I} \right) \times \\ \times \frac{y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi}{I} \right) \cdot \frac{y_\varphi z_\psi - y_\psi z_\varphi}{I} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} \right) \times \\ \times \frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} \right) \cdot \frac{x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} \right) \times \\ \times \frac{x_\psi z_\varphi - x_\varphi z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} \right) \cdot \frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} \right) \times \\ \times \frac{x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} \right) \cdot \frac{x_\psi z_\varphi - x_\varphi z_\psi}{I},$$

$$b_{3,2}(\varphi, \psi, \eta) = \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta}{I} \right) \cdot \frac{y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta}{I} \right) \times \\ \times \frac{y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{y_\eta z_\varphi - y_\varphi z_\eta}{I} \right) \cdot \frac{y_\varphi z_\psi - y_\psi z_\varphi}{I} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi}{I} \right) \times \\ \times \frac{x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi}{I} \right) \cdot \frac{x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{x_\varphi z_\eta - x_\eta z_\varphi}{I} \right) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{x_\psi z_\psi - x_\psi z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{x_\eta y_\psi - x_\psi y_\eta}{I} \right) \cdot \frac{x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{x_\eta y_\psi - x_\psi y_\eta}{I} \right) \times \\ & \times \frac{x_\eta y_\psi - x_\psi y_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{x_\eta y_\psi - x_\psi y_\eta}{I} \right) \cdot \frac{x_\psi y_\psi - x_\psi y_\psi}{I}, \\ b_{3,3}(\varphi, \psi, \eta) = & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{y_\psi z_\psi - y_\psi z_\psi}{I} \right) \cdot \frac{y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{y_\psi z_\psi - y_\psi z_\psi}{I} \right) \times \\ & \times \frac{y_\eta z_\psi - y_\psi z_\eta}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{y_\psi z_\psi - y_\psi z_\psi}{I} \right) \cdot \frac{y_\psi z_\psi - y_\psi z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{x_\psi z_\psi - x_\psi z_\psi}{I} \right) \times \\ & \times \frac{x_\psi z_\psi - x_\psi z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{x_\psi z_\psi - x_\psi z_\psi}{I} \right) \cdot \frac{x_\psi z_\eta - x_\eta z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{x_\psi z_\psi - x_\psi z_\psi}{I} \right) \times \\ & \times \frac{x_\psi z_\psi - x_\psi z_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{x_\psi y_\psi - x_\psi y_\psi}{I} \right) \cdot \frac{x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{x_\psi y_\psi - x_\psi y_\psi}{I} \right) \times \\ & \times \frac{x_\psi y_\psi - x_\psi y_\psi}{I} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{x_\psi y_\psi - x_\psi y_\psi}{I} \right) \cdot \frac{x_\psi y_\psi - x_\psi y_\psi}{I}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q(\varphi, \psi, \eta) = & \frac{1}{f^2} \left(\left(\kappa_{11} (y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi) + \kappa_{12} (x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta) + \kappa_{13} (x_\psi y_\eta - \right. \right. \\ & \left. \left. - x_\eta y_\psi) \right) (y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi) + \left(\kappa_{21} (y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi) + \kappa_{22} (x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \kappa_{23} (x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi) \right) (x_\eta z_\psi - x_\psi z_\eta) + \left(\kappa_{31} (y_\psi z_\eta - y_\eta z_\psi) + \kappa_{32} (x_\eta z_\psi - \right. \right. \\ & \left. \left. - x_\psi z_\eta) + \kappa_{33} (x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi) \right) (x_\psi y_\eta - x_\eta y_\psi) \right), \end{aligned}$$

Асимптотика розв'язку. Розв'язок задачі (10), (11) з точністю $O(\varepsilon^{n+1})$ шукаємо у вигляді асимптотичного ряду:

$$\begin{aligned} c(\varphi, \psi, \eta, t) = & c_0(\varphi, \psi, \eta, t) + \sum_{i=1}^n \varepsilon^i c_i(\varphi, \psi, \eta, t) + \sum_{i=0}^{n+1} \varepsilon^i P_i(\xi, \psi, \eta, t) + \\ & + \sum_{i=0}^{n+1} \varepsilon^{i/2} H_i(\varphi, \xi, \eta, t) + \sum_{i=0}^{n+1} \varepsilon^{i/2} \bar{H}_i(\varphi, \bar{\xi}, \eta, t) + \sum_{i=0}^{n+1} \varepsilon^{i/2} T_i(\varphi, \psi, \xi, t) + \\ & + \sum_{i=0}^{n+1} \varepsilon^{i/2} \bar{T}_i(\varphi, \psi, \bar{\xi}, t) + R_n(\varphi, \psi, \eta, t, \varepsilon), \end{aligned} \quad (12)$$

де $R_n(\varphi, \psi, \eta, t, \varepsilon)$ – залишковий член (його оцінка встановлюється аналогічно [5-6, 9] на основі принципу максимуму), $c_0(\varphi, \psi, \eta, t)$ – розв'язок відповідної виродженої задачі (конвективного переносу); $c_i(\varphi, \psi, \eta, t)$ ($i = \overline{1, n}$) – поправки, які враховують “вплив” дифузії всюди в даній області (за винятком деякої її приграничної ділянки), $P_i(\xi, \psi, \eta, t)$ ($i = \overline{0, n+1}$) – функції типу примежевого шару в околі $\varphi = \varphi^*$ (поправки на виході конвективної течії), $H_i(\varphi, \xi, \eta, t)$, $\bar{H}_i(\varphi, \bar{\xi}, \eta, t)$, $T_i(\varphi, \psi, \xi, t)$,

$\bar{T}_i(\varphi, \psi, \bar{\xi}, t)$ ($i = \overline{0, n+1}$) – функції типу примежевого шару відповідно в околах ділянок $\psi = Q_*$, $\psi = Q^*$, $\eta = Q_{**}$, $\eta = Q^{**}$, що враховують вплив “бічних джерел забруднень”, $\xi = \frac{\varphi^* - \varphi}{\varepsilon}$, $\zeta = \frac{\psi - Q_*}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\bar{\xi} = \frac{Q^* - \psi}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\bar{\zeta} = \frac{\eta - Q_{**}}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\bar{\bar{\xi}} = \frac{Q^{**} - \eta}{\sqrt{\varepsilon}}$ – відповідні їм “розтягнуті” змінні.

В результаті підстановки (12) в (10) і виконання процедури прирівнювання коефіцієнтів при однакових степенях ε , одержимо за-

дачі для знаходження головної частини c_0 і поправок c_i :

$$\begin{cases} q(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{0\varphi}(\varphi, \psi, \eta, t) + c_{0t}(\varphi, \psi, \eta, t) = 0, c_0(\varphi, \psi, \eta, 0) = c_0^0(\varphi, \psi, \eta), \\ \alpha_1(\psi, \eta, t) \cdot c_0(\varphi_*, \psi, \eta, t) + \beta_1(\psi, \eta, t) \cdot c_{0\varphi}(\varphi_*, \psi, \eta, t) = \gamma_1(\psi, \eta, t), \end{cases}$$

$$\begin{cases} q(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i\varphi}(\varphi, \psi, \eta, t) + c_{it}(\varphi, \psi, \eta, t) = g_i(\varphi, \psi, \eta, t), \\ c_i(\varphi, \psi, \eta, 0) = 0, c_i(\varphi_*, \psi, \eta, t) = 0, i = \overline{1, n}, \end{cases}$$

де

$$\begin{aligned} g_i(\varphi, \psi, \eta, t) = & a_0 \cdot (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\varphi\varphi} + b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\varphi\psi} + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\varphi\eta} + \\ & + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\psi\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\psi\eta} + b_{3,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\eta\eta} + b_{3,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\psi} + \\ & + b_{3,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{i-1\eta}) + \sum_{k=0}^{i-2} \sum_{m=0}^k (a_{i-1-k} \cdot c_{k-m} (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\varphi\varphi} + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\varphi\psi} + \\ & + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\varphi\eta} + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\psi\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\psi\eta} + b_{3,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\eta\eta} + \\ & + b_{3,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\psi} + b_{3,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{m\eta})) + a_1 \cdot \sum_{k=0}^{i-2} (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k\varphi} \cdot c_{i-2-k\varphi} + \\ & + b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k\psi} \cdot c_{i-2-k\psi} + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k\eta} \cdot c_{i-2-k\eta} + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k\varphi} \cdot c_{i-2-k\psi} + \\ & + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k\psi} \cdot c_{i-2-k\eta}) + \sum_{k=0}^{i-3} \left((i-2) \cdot a_{i-2} \sum_{m=0}^k (c_m \cdot (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k-m\varphi} \cdot c_{i-3-k\varphi} + \right. \\ & + b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k-m\psi} \cdot c_{i-3-k\psi} + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k-m\eta} \cdot c_{i-3-k\eta} + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k-m\varphi} \cdot c_{i-3-k\psi} + \\ & \left. + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot c_{k-m\psi} \cdot c_{i-3-k\eta})) \right), \end{aligned}$$

а у результаті їх розв'язання:

$$c_0(\varphi, \psi, \eta, t) = \begin{cases} h(\varphi, \psi, \eta, t), t \geq f(\varphi, \psi, \eta), \\ c_0^0(f^{-1}(f(\varphi, \psi, \eta) - t), \psi, \eta), t < f(\varphi, \psi, \eta), \end{cases}$$

$$\begin{aligned} h(\varphi, \psi, \eta, t) = & e^{\int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{q(\varphi_*, \psi, \eta)}{\beta(\psi, \eta, f(\bar{\varphi}, \psi, \eta) + t - f(\varphi, \psi, \eta))} d\bar{\varphi}} \left(c_0^0(\varphi_*, \psi, \eta) - q(\varphi_*, \psi, \eta) \times \right. \\ & \left. \times \int_{\varphi_*}^{\varphi} e^{-\int_{\varphi_*}^{\bar{\varphi}} \frac{q(\varphi_*, \psi, \eta)}{\beta(\psi, \eta, f(\bar{\varphi}, \psi, \eta) + t - f(\varphi, \psi, \eta))} d\bar{\varphi}} \frac{\gamma(\psi, \eta, f(\bar{\varphi}, \psi, \eta) + t - f(\varphi, \psi, \eta))}{\beta(\psi, \eta, f(\bar{\varphi}, \psi, \eta) + t - f(\varphi, \psi, \eta))} d\bar{\varphi} \right), \end{aligned}$$

$$c_i(\varphi, \psi, \eta, t) = \begin{cases} \int_{\varphi_*}^{\varphi} q(\bar{\varphi}, \psi, \eta) \cdot g_i(\bar{\varphi}, \psi, \eta, f(\bar{\varphi}, \psi, \eta) + t - f(\varphi, \psi, \eta)) d\bar{\varphi}, t \geq f(\varphi, \psi, \eta), \\ \int_0^t g_i(f^{-1}(\bar{t} + f(\varphi, \psi, \eta) - t), \psi, \eta, \bar{t}) d\bar{t}, t < f(\varphi, \psi, \eta), i = \overline{1, n}, \end{cases}$$

де $f(\varphi, \bar{\psi}, \bar{\eta}) = \int_{\varphi_*}^{\varphi} v^{-2}(s, \bar{\psi}, \bar{\eta}) ds$ – час проходження виділеної частинки від точки $(\varphi_*, \bar{\psi}, \bar{\eta})$ до точки $(\varphi, \bar{\psi}, \bar{\eta})$ вздовж відповідної лінії те-

чії, f^{-1} – функція, обернена до f відносно змінної φ (відмітимо, що вона існує, оскільки функція $q(\varphi, \psi, \eta)$ – неперервно диференційовна, обмежена і додатньо визначена).

Для знаходження функцій $P_i(\xi, \psi, \eta, t)$ та $H_i(\varphi, \zeta, \eta, t)$ відповідно матимемо задачі [5, 6, 9]:

$$\begin{cases} a_0 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\xi} + q(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi} = 0, P_0(\xi, \psi, \eta, t) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0, \alpha_2(\psi, \eta, t) \cdot (P_0(\varphi, \psi, \eta, t) + \\ + c_0(\varphi, \psi, \eta, t)) + \beta_2(\psi, \eta, t) \cdot (P_{0\varphi}(\varphi, \psi, \eta, t) + c_{0\varphi}(\varphi, \psi, \eta, t)) \Big|_{\varphi=\varphi_*} = \gamma_2(\psi, \eta, t), \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{i\xi\xi} + q(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{i\xi} = d_i(\xi, \psi, \eta, t), \\ P_i(0, \psi, \eta, t) = -c_i(\varphi, \psi, \eta, t), P_i(\xi, \psi, \eta, t) \xrightarrow{\xi \rightarrow 0} 0, i = \overline{1, n+1}; \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 \cdot b_{1,2}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\eta\eta} - q(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\varphi} = H_{0t}, \\ H_0(\varphi, \zeta, \eta, t) \xrightarrow{\zeta \rightarrow \infty} 0, H_0(\varphi, 0, \eta, t) = c_{**}(\varphi, \eta, t) - \hat{M}_0(\varphi, \zeta, \eta, t), \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 \cdot b_{1,2}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{i\eta\eta} - q(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{i\varphi} = H_{it} + M_i(\varphi, \zeta, \eta, t), i = \overline{1, n+1}, \\ H_i(\varphi, \zeta, \eta, t) \xrightarrow{\zeta \rightarrow \infty} 0, H_i(\varphi, 0, \eta, t) = \begin{cases} 0, \text{ якщо } i - \text{ не парне,} \\ -\hat{M}_i(\varphi, \zeta, \eta, t), \text{ якщо } i - \text{ парне,} \end{cases} \end{cases}$$

де

$$\begin{aligned} d_1(\xi, \psi, \eta, t) = & P_{0t} + a_0 \cdot b_{1,1\xi}(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{0\xi\xi} - a_1 \cdot P_0 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\xi} - \\ & - a_0 \cdot (b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\eta} + b_{3,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi}) - \\ & - a_1 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi}^2 + q_\xi(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{0\xi}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_2(\xi, \psi, \eta, t) = & P_{1t} - a_0 \cdot (b_{1,1\xi\xi}(\varphi, \psi, \eta) / 2 \cdot \xi^2 \cdot P_{0\xi\xi} - b_{1,1\xi\xi}(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{1\xi\xi}) + \\ & + a_1 \cdot P_0 \cdot (b_{1,1\xi}(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{0\xi\xi} - b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{1\xi\xi}) - a_1 \cdot P_1 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\xi} - \\ & - a_2 \cdot P_0^2 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\xi} - a_0 \cdot (b_{1,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\psi\psi} + b_{1,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\eta\eta} + \\ & + b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{1\xi\psi} - b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{0\xi\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{1\xi\eta} - b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{0\xi\eta} + \\ & + b_{3,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\psi} + b_{3,3}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\eta}) - a_1 \cdot P_0 \cdot (b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\psi} + b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi\eta}) - \\ & - a_1 \cdot (b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{1\xi} - b_{1,1\xi}(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{1\xi} - b_{2,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi} \cdot P_{0\psi} - b_{2,2}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi} \cdot P_{0\eta}) - \\ & - a_2 \cdot P_0^2 \cdot b_{1,1}(\varphi, \psi, \eta) \cdot P_{0\xi} + q_\xi(\varphi, \psi, \eta) \cdot \xi \cdot P_{1\xi} - q_{\xi\xi}(\varphi, \psi, \eta) / 2 \cdot \xi^2 \cdot P_{0\xi}, \dots; \end{aligned}$$

$$\hat{M}_i(\varphi, \zeta, \eta, t) = c_{i-1/2}(\varphi, Q, \eta, t) + P_{i-1/2}(\varphi, Q, \eta, t),$$

$$\begin{aligned} M_1(\varphi, \zeta, \eta, t) = & H_{1t} - a_0 \cdot (b_{1,2\xi}(\varphi, Q, \eta) \cdot \zeta \cdot H_{0\xi\xi} + b_{2,1}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\varphi\xi} + \\ & + b_{3,2}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\xi}) + q_\xi(\varphi, Q, \eta) \cdot \zeta \cdot H_{0\xi}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_2(\varphi, \zeta, \eta, t) = & H_{2t} - a_0 \cdot (b_{1,1}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\varphi\varphi} + b_{1,2\xi}(\varphi, Q, \eta) \cdot \zeta \cdot H_{1\xi\xi} + \\ & + b_{1,2\xi\xi}(\varphi, Q, \eta) / 2 \cdot \zeta^2 \cdot H_{0\xi\xi} + b_{1,3}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\eta\eta} + b_{2,1}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{1\varphi\xi} + \\ & + b_{2,1\xi}(\varphi, Q, \eta) \cdot \zeta \cdot H_{0\varphi\xi} + b_{2,2}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\varphi\eta} + b_{3,1}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\varphi} + \\ & + b_{1,2}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{1\xi} + b_{3,2\xi}(\varphi, Q, \eta) \cdot \zeta \cdot H_{0\xi} + b_{3,3}(\varphi, Q, \eta) \cdot H_{0\eta}) + \\ & + q_\xi(\varphi, Q, \eta) \cdot \zeta \cdot H_{1\xi} + q_{\xi\xi}(\varphi, Q, \eta) / 2 \cdot \zeta^2 \cdot H_{0\xi}, \dots \end{aligned}$$

Функції $\tilde{H}_i(\varphi, \bar{\zeta}, \eta, t)$, $\tilde{T}_i(\varphi, \psi, \bar{\zeta}, t)$, $\tilde{\bar{T}}_i(\varphi, \psi, \bar{\zeta}, t)$ знаходяться аналогічно.

Зауважимо, що одержані формули можуть бути використанні при розрахунку про-

цесу "конвекції-дифузії" в анізотропному пористому середовищі у випадку, коли його анізотропія пов'язана з опадонакопиченням: проникність вздовж шарів має одне значення, а в перпендикулярному напрямку – інше, значно менше. У перспективі – поширення запропонованої методики на випадки розв'язання відповідних просторових сингулярно збурених нелінійних задач із запізненням [8, 14], задач гетеродифузії [12-13].

Список використаних джерел

1. Васильева А.Б., Бутузов В.Ф. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений. – М.: Высшая школа, 1980. – 208 с.
2. Теория сингулярных возмущений в прикладных задачах. – Рига: Hitelser, 1990. – 187 с.
3. Bobisud L.E. Parabolic Equations with a Small Parameter and discontinuous Data // Journal of mathematical analysis and applications. – 1969 – Volum 26, №1. – P. 208-220.
4. Вишик М.И., Люстерник Л.А. Регулярное вырождение и пограничный слой для линейных дифференциальных уравнений с малым параметром. – Успехи математических наук. – 1957. – 12, вып. 5. – С. 3-122.
5. Бомба А.Я. Про асимптотичний метод розв'язання однієї задачі масопереносу при фільтрації в пористому середовищі // Укр. мат. журн. – 1982. – Т.4, №4. – С. 493-496.
6. Лаврик В.И., Бомба А.Я., Власюк А.П. Об асимптотическом приближении решений некоторых задач массопереноса при фильтрации в неоднородной анизотропной среде. – К.: 1985. – 17 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т математики; 85.72).
7. Присяжнюк І.М. Асимптотичний метод розв'язування сингулярно збурених крайових задач типу "конвекція-дифузія" у многозв'язних областях // Волинський математичний вісник. – 2003. – Вип. 10. – С. 118-128.
8. Бомба А.Я., Присяжнюк І.М. Асимптотичне розв'язання розв'язків нелінійних сингулярно збурених крайових задач типу "конвекція-дифузія" із запізненням // Доповіді НАН України. – 2005. – №3. – С. 60-66.
9. Бомба А.Я. Просторові сингулярно збурені крайові задачі типу "конвекція-дифузія" // Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика. – 2003. – Вип. 1. – С. 27-35.
10. Бомба А.Я., Пригорницький Д.А., Присяжнюк І.М. Решение задач типа "конвекция-фильтрация" в многосвязных областях // Компьютерная математика. – 2004. – №1. – С. 152-159.
11. Бомба А.Я., Скопечкий В.В., Присяжнюк І.М. Решение задач типа "конвекция-фильтрация" в многосвязных областях // Компьютерная математика. – 2004. – №2. – С. 99-104.
12. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. НАН України, Центр математичного моделювання Ін-ту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с.
13. Burak Ya., Chaplia Ye., Chernukha O. Problems of mechanothermodiffusive processes modelling and optimization in manyphases continuum systems // In mat. II Szkola Geomechaniki (miedz. konf.). – Gliwice: Polit. Slaska, 1995. – P. 343-351.
14. Ельсгольц Л.Е., Норкин С.Б. Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. – М.: Наука, 1971. – 296 с.

Надійшла до редакції 27.02.2007

УДК 519.21

Андрій М. Братійчук, аспірант

Точні зображення для характеристик системи $M^b/G/1/b$ з відновлюючим рівнем вхідного потоку.

Розглядається система обслуговування типу $M^b/G/1/b$, в якій вхідний потік регулюється за допомогою деякого порогового рівня. Отримані формули для характеристичних функцій наступних функціоналів: першого періоду зайнятості та числа вимог обслугованих на цьому періоді, віртуального часу чекання

Ключові Слова: система обслуговування, процес Пуассона, період зайнятості, час чекання

E-mail: basic@ks.net.ua

Вступ

У даній праці продовжуються дослідження, які були започатковані в роботі [1], для систем типу $M^b/G/1/b$, в яких вхідний потік вимог регулюється за допомогою деякого рівня. Формально така система 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 n -того замовлення відповідно. В момент часу $\sum_{i=1}^n \tau_i$ до системи надходить n -та група замовлень, яка містить θ_n вимог. β_n є час обслуговування n -тої вимоги, і дисципліна обслуговування є типу FCFS. Якщо в момент надходження вимог обслуговуючий пристрій зайнятий, то вимоги стають у чергу. І спосіб організації черги всередині групи не є для нас суттєвим, оскільки характеристики, які будуть вивчатись у 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

Andriy M. Bratiychuk, post-graduate student

Explicit formulae for characteristics of the system $M^b/G/1/b$ with a resume level of the input stream.

The paper deals with a finite capacity queueing system of the type $M^b/G/1/b$ in which the input flow is regulated by some level. The formulae for the characteristic functions of the following functionals: the first busy period and the number of customers served on that period, virtual waiting time are obtained

Key Words: queueing system, Poisson process, busy period, virtual waiting time.

числом b . Тобто, у працюючій системі в черзі можуть знаходитись максимально $b-1$ вимог. Отже, якщо чергова група вимог об'єму θ_n впливає до системи, де вже є k вимог, то лише $\min\{b-k, \theta_n\}$ з них приєднуються до черги, а решта - 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 роботу системи.

Наскільки відомо автору, така ідея була вперше запропонована в [2], а в роботі [3] можна знайти формули для ергодичного розподілу π_k , $0 \leq k \leq b$ - довжини черги в такій системі. Як було зауважено раніше [1], незручність тих формул полягає в тому, що

обчислення конкретного π_k неможливе без обчислення всіх π_k . Цей недолік особливо помітний, якщо ми змінюємо рівні a, b , а така ситуація є типовою при дослідженні оптимізаційних задач для таких систем. В [1] був запропонований підхід, який дає можливість обчислення індивідуальних π_k . Цей же підхід використовується і в даній праці для дослідження інших характеристик системи.

Наведемо деякі позначення, які будуть використовуватись у статті. Позначимо

$$P\{\beta_i \leq x\} = F(x), P\{\theta_i = k\} = a_k, x \geq 0, k = 1, 2, \dots$$

$$f(s) = \int_0^\infty e^{-sx} dF(x), a(z) = \sum_{k=1}^\infty z^k a_k, \operatorname{Re} s \geq 0, |z| \leq 1.$$

$$m_i = \int_0^\infty x^i dF(x), \alpha_i = \sum_{k=1}^\infty k^i a_k, i \geq 1.$$

Нехай $\xi(t), t \geq 0$ позначає число вимог в системі в момент часу t , символ M_n позначає умовне математичне сподівання 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 M .

Якщо $\eta(x)$ позначає число вимог, які надійшли до системи на інтервалі $[0; x]$, то

$$\sum_{i=0}^\infty z^i P\{\eta(x) = i\} = e^{-\lambda x(1-a(z))}.$$

Позначимо також $\tau = \tau_b = \inf\{t \geq 0; \xi(t) = 0\}$ - перший період зайнятості; $N(\tau)$ - кількість вимог, які були обслужені за час τ_b ; $W(t)$ - віртуальний час чекання.

Допоміжні факти.

У цьому параграфі ми наведемо деякі результати, доведення яких можна знайти в [1].

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

$$\sum_{i=-1}^\infty z^i p_i = Ez^{\delta_{n+1}-\delta_n} = k(z), 0 < |z| \leq 1.$$

Для $0 < v < 1$ розглянемо наступне рівняння

$$\phi(n) - v \sum_{i=-1}^{b-n-2} p_i \phi(n+i) = f_n, 1 \leq n \leq b-1, (1)$$

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

$$\sum_{k=1}^\infty z^k B_k(v) = \frac{1}{k(z) - 1 - v} \quad (2)$$

і оскільки $p_{-1} > 0$, то таке визначення є коректним для всіх достатньо малих $|z|$. У роботі [4] 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 (2) має місце для $0 < |z| < z(v)$.

В [1] отримано наступний результат.

Теорема 1. Загальний розв'язок рівняння (1) можна подати у вигляді

$$\phi(n) = (1 + \tilde{Q}_{b-n}(v)) \phi(b-1) - v^{-1} \sum_{k=n+1}^{b-1} B_{k-n}(\mu) f_k, \quad 0 \leq n \leq b-1 \quad (3)$$

$$\text{де } \tilde{Q}_n(v) = v^{-1} \sum_{k=0}^{n-2} B_{n-1-k}(\mu) d_k(v),$$

$$d_k(v) = 1 - v \sum_{i=-1}^{k-1} p_i, \quad \mu = v^{-1} - 1.$$

Відмітимо, що розв'язок (3) визначений з докладністю до величини $\phi(b-1)$, яка для конкретних функціоналів визначається з відповідної граничної умови в точці $n = 0$.

Перший період зайнятості та число вимог обслужених на цьому періоді.

Нехай

$$p_i(s) = f^{-1}(s) \sum_{l=0}^{i+1} a_{l+1}^* \int_0^\infty e^{-(\lambda+s)x} \frac{(\lambda x)^l}{l!} dF(x),$$

$$i = -1, 0, 1, \dots$$

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 легко перекоонатись, 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 $B_k(v, s)$, $k = 1, 2, \dots$, яка була визначена в (2) (але тепер ми добавили змінну s , оскільки наше блукання залежить від цього параметра), визначається так

$$\sum_{k=1}^{\infty} z^k B_k(v, s) = \frac{zf(s)}{f(a(s, z)) - (1+v)zf(s)}, \quad (4)$$

Надалі нам буде зручніше мати справу з функцією $R_k(s, \theta) = (\theta f'(s))^{-1} B_k((\theta f'(s))^{-1} - 1, s)$ з $|\theta| \leq 1$ для якої, враховуючи (4), маємо

$$\sum_{k=1}^{\infty} z^k R_k(s, \theta) = \frac{z}{\theta f'(a(s, z)) - z}, \quad |z| < v_-(s) \quad (5)$$

де $v_-(s)$ є єдиним коренем рівняння

$$\theta f'(a(s, z)) - z = 0, \quad 0 < z < 1$$

на інтервалі $[0; 1]$. Рівність (5) будемо вважати за означення функції $R_k(s, \theta)$.

Позначимо

$$Q_n(s, \theta) = \sum_{k=n}^{\infty} R_{n-k-1}(s, \theta) d_k(s, \theta),$$

$$d_k(s, \theta) = 1 - \theta f'(s) \sum_{j=-1}^{k-1} p_j(s), \quad \bar{p}_n(s) = \sum_{j=n}^{\infty} p_j(s), \quad (6)$$

$$\varphi(n) \equiv \varphi(n, s, \theta) = M_n e^{-s\tau} \theta^{N(\tau)},$$

$$\operatorname{Re} s \geq 0, |\theta| \leq 1, 0 \leq n \leq b,$$

і нехай

$$\Delta(s, \theta) = \begin{vmatrix} 1 + (\theta f'(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s) & -1 - Q_{b-a}(s, \theta) \\ -(\theta f'(s))^{b-a} \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s) & 1 + Q_b(s, \theta) \end{vmatrix}$$

Теорема 2. Для довільних $1 \leq n \leq b-1$ та $s > 0$ має місце зображення

$$M_n e^{-s\tau} \theta^{N(\tau)} = (1 + Q_{b-n}(s, \theta)) \varphi(b-1) - (\theta f'(s))^{b-a-1} \varphi(a) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s), \quad (7)$$

де функції $\varphi(a)$ та $\varphi(b-1)$ визначаються так

$$\varphi(a) = \frac{1 + Q_{b-a}(s, \theta)}{\Delta(s, \theta)},$$

$$\varphi(b-1) = \frac{1 + (\theta f'(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s)}{\Delta(s, \theta)}, \quad (8)$$

Доведення. Використовуючи формулу повної ймовірності, маємо

$$\begin{aligned} \varphi(n) &= \theta \sum_{i=0}^{b-n-1} \varphi(n+i-1) \int_0^\infty P\{\eta(x) = i\} dF(x) + \\ &+ \varphi(a) \theta^{b-a} \int_0^\infty P\{\eta(x) \geq b-n\} \int_0^\infty e^{-n(x+v)} P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dv\right\} dF(x) \\ &= \\ &= \theta \sum_{i=0}^{b-n-1} \varphi(n+i-1) \sum_{j=0}^{\infty} a_{j+1}^* \int_0^\infty e^{-(\lambda+s)x} \frac{(\lambda x)^j}{j!} dF(x) + \\ &+ \varphi(a) \theta^{b-a} \sum_{i=b-n}^{\infty} \sum_{j=0}^i a_{j+1}^* \int_0^\infty e^{-(\lambda+s)x} \frac{(\lambda x)^j}{j!} \int_0^\infty e^{-n(x+v)} P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dv\right\} dF(x) \\ &= \\ &= \theta f'(s) \sum_{i=0}^{b-n-1} \varphi(n+i-1) p_{i-1}(s) + (\theta f'(s))^{b-a} \bar{p}_{b-a-1}(s) \varphi(n) \end{aligned}$$

для $1 \leq n \leq b-1$ і $\varphi(0) = 1$.

Пояснимо тепер ймовірнісний зміст доданків у правій частині першої з наведених вище рівностей. Доданок

$$\theta \sum_{i=0}^{b-n-1} \varphi(n+i-1) \int_0^{\infty} P\{\eta(x) = i\} dF(x)$$

відповідає ситуації, що за час обслуговування першої вимоги розмір черги не перевищив $b-1$. Доданок

$$\varphi(a) \theta^{b-a} \int_0^{\infty} P\{\eta(x) \geq b-n\} \int_0^{\infty} e^{-s(x+v)} P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dv\right\} dF(x)$$

відповідає ситуації, що за час обслуговування першої вимоги розмір черги досягнув рівня b , але потім, після завершення обслуговування першої вимоги нових надходжень вимог не було і їх надходження відновилось лише тоді, коли довжина черги досягла рівня $a-1$ (тобто коли обслужились $b-a-1$ вимог).

Отже, маємо наступне рівняння

$$\varphi(n) - \theta f(s) \sum_{i=1}^{b-n-2} p_i(s) \varphi(n+i) = (\theta f(s))^{b-a} \bar{p}_{b-n-1}(s) \varphi(a),$$

$$1 \leq n \leq b-1$$

з такою граничною умовою

$$\varphi(0) = 1. \quad (9)$$

Тепер з Теорема 1 дістаємо

$$\begin{aligned} \varphi(n) &= (1 + \bar{Q}_{b-n}(\theta f(s))) \varphi(b-1) - (\theta f(s))^{b-a-1} \cdot \\ &\cdot \varphi(a) \sum_{i=n+1}^{b-1} B_{i-n}((\theta f(s))^{-1} - 1) \bar{p}_{b-i-1}(s). \end{aligned} \quad (10)$$

Якщо тепер врахувати означення функцій $R_k(s, \theta)$ та $Q_k(s, \theta)$ (рівність (5) та перша рівність в (6) відповідно), то співвідношення (10) можемо переписати в наступному вигляді

$$\begin{aligned} \varphi(n) &= (1 + Q_{b-n}(s, \theta)) \varphi(b-1) - (\theta f(s))^{b-a} \cdot \\ &\cdot \varphi(a) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s). \end{aligned} \quad (11)$$

Поклавши тут $n=a$, отримаємо перше рівняння для $\varphi(a)$ та $\varphi(b-1)$.

$$\begin{aligned} &\varphi(a) \left(1 + (\theta f(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s) \right) - \\ &- \varphi(b-1) (1 + Q_{b-a}(s, \theta)) = 0 \end{aligned}$$

З (9) маємо друге рівняння

$$\begin{aligned} &- \varphi(a) (\theta f(s))^{b-a} \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s) + \\ &+ \varphi(b-1) (1 + Q_b(s, \theta)) = 1 \end{aligned}$$

Отже, для $\varphi(a)$ та $\varphi(b-1)$ маємо наступну систему лінійних рівнянь

$$\begin{cases} \varphi(a) \left(1 + (\theta f(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s) \right) - \\ - \varphi(b-1) (1 + Q_{b-a}(s, \theta)) = 0 \\ \\ - \varphi(a) (\theta f(s))^{b-a} \sum_{i=1}^{b-1} R_i(s, \theta) \bar{p}_{b-i-1}(s) + \\ + \varphi(b-1) (1 + Q_b(s, \theta)) = 1. \end{cases}$$

розв'язки якої подано в (8). (8) та (11) завершують доведення теореми.

Віртуальний час чекання

У цьому параграфі розглянемо випадок системи $M/G/1/b$, тобто, припускаємо, що вимоги поступають по одній. Метод дослідження, який застосовувався вище, дозволяє розглядати і випадок групового надходження вимог. Але оскільки відповідні формули в цьому випадку є громіздкими, то, напевно, немає сенсу подавати їх в журнальній статті.

Покладемо

$$\varphi_n(t, \mu) = M_n e^{-\mu W(t)}, \quad \operatorname{Re} \mu \geq 0, \quad n = 0, 1, \dots, b$$

$$\text{і нехай } R_k(s) = R_k(s, 1), \quad Q_k(s) = Q_k(s, 1),$$

$$\hat{R}_i(s, \lambda) = R_i(s) - \frac{\lambda}{\lambda + s} R_{i-1}(s).$$

Позначимо також

$$\Delta_a(s, \mu) = \left| \begin{array}{cc} -\sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) D_i(s, \mu) & -1 - (1-f(s)) \sum_{i=a+1}^{b-1} R_i(s) - f(s) \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) \\ \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) D_i(s, \mu) + \frac{1}{\lambda+s} & \frac{s}{\lambda+s} + (1-f(s)) \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) + f(s) \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) \bar{p}_{b-i-1}(s) \end{array} \right|$$

$$\Delta_b(s, \mu) = \left| \begin{array}{cc} 1 + (f(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) & -\sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) D_i(s, \mu) \\ -(f(s))^{b-a} \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) \bar{p}_{b-i-1}(s) & \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) D_i(s, \mu) + \frac{1}{\lambda+s} \end{array} \right|$$

де функція $D_i(s, \mu)$ означена в (15).

Теорема 3. Для всіх $0 \leq n \leq b-1$ та $\operatorname{Re} s > 0$ справедливе зображення

$$\int_0^\infty e^{-st} M_n e^{-\mu W(t)} dt = (1 + Q_{b-n}(s)) \Phi_{b-1}(s, \mu) -$$

$$- (f(s))^{b-a-1} \Phi_a(s, \mu) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s)$$

$$- \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) D_i(s, \mu),$$

де

$$\Phi_a(s, \mu) = \frac{\Delta_a(s, \mu)}{\Delta(s)}, \quad \Phi_{b-1}(s, \mu) = \frac{\Delta_b(s, \mu)}{\Delta(s)}, \quad (12)$$

Доведення. Як і вище, використовуючи формулу повної ймовірності, маємо

$$\varphi_n(t, \mu) = \sum_{i=0}^{b-n-1} \int_0^t P\{\eta(x) = i\} \varphi_{n+i-1}(t-x, \mu) dF(x)$$

$$+ \int_0^t \int_0^{t-x} \varphi_a(t-x-z, \mu) P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dz\right\} +$$

$$+ \sum_{k=1}^{b-a-2} f^{b-k-2}(\mu) \int_0^t e^{-\mu x} P\left\{\sum_{i=1}^k \beta_i < t-x, \sum_{i=1}^{k+1} \beta_i - t+x \in dz\right\} \cdot$$

$$\cdot P\{\eta(x) \geq b-n\} dF(x)$$

$$+ \int_0^t e^{-\mu x} \left(\sum_{i=1}^{b-a-1} f^{b-i-1}(\mu) P\{\eta(x) = i\} + f^{b-1}(\mu) P\{\eta(x) \geq b-n\} \right) dH(x) \quad (13)$$

для $1 \leq n \leq b-1$

$$\varphi_0(t, \mu) = \lambda \int_0^t e^{-\lambda x} \varphi_1(t-x, \mu) dx + e^{-\lambda t},$$

Пояснимо тепер ймовірнісний зміст доданків в правій частині першої з наведених вище рівностей. Доданок

$$\sum_{i=0}^{b-n-1} \int_0^t P\{\eta(x) = i\} \varphi_{n+i-1}(t-x, \mu) dF(x)$$

відповідає ситуації, що за час обслуговування першої вимоги, який закінчився перед моментом t , розмір черги не перевищив $b-1$.

Доданок

$$\int_0^t \int_0^{t-x} \varphi_a(t-x-z, \mu) P\left\{\sum_{i=1}^{b-a-1} \beta_i \in dz\right\} P\{\eta(x) \geq b-n\} dF(x)$$

відповідає ситуації, що за час обслуговування першої вимоги, який закінчився перед моментом t , розмір черги досягнув рівня b , але потім, після завершення обслуговування першої вимоги, нових надходжень не було і їх надходження відновилось лише тоді, коли довжина черги досягла рівня $a-1$ (тобто, коли обслужились $b-a-1$ вимог).

Доданок

$$\sum_{k=1}^{b-a-2} f^{b-k-2}(s) \int_0^t \int_0^{t-x} e^{-\mu z} P\left\{\sum_{i=1}^k \beta_i < t-x, \sum_{i=1}^{k+1} \beta_i - t+x \in dz\right\} P\{\eta(x) \geq b-n\} dH(x)$$

відповідає ситуації, що за час обслуговування першої вимоги, який закінчився перед моментом t (в момент $x < t$), розмір черги досягнув рівня b , і нових надходжень не було аж до моменту t - тобто, на інтервалі $[x, t]$ обслужились лише

$k \in [0, b-a-2]$ вимог, причому, $k+1$ перша вимога обслужилась в момент $t+z$, $z \in (0, \infty)$.

Доданок

$$\int_0^\infty e^{-\lambda(x-t)} \left(\sum_{i=0}^{b-n-1} f^{n+i-1}(\mu) P\{\eta(t)=i\} + f^{b-1}(\mu) P\{\eta(t) \geq b-n\} \right) dR(x)$$

відповідає ситуації, що час обслуговування першої вимоги був більший, ніж t .

Позначимо

$$\Phi_n(s, \mu) = \int_0^\infty e^{-st} \varphi_n(t, \mu) dt.$$

Зі співвідношення (13) для $1 \leq n \leq b-1$ отримуємо

$$\Phi_n(s, \mu) = f(s) \sum_{i=0}^{b-n-1} p_{i-1}(s) \Phi_{n+i-1}(s, \mu) + f^{b-a}(s) \Phi_a(s, \mu) \bar{p}_{b-n-1}(s) + D_n(s, \mu),$$

де позначено

$$D_n(s, \mu) =$$

$$= f(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) \sum_{i=0}^{b-a-2} f^{b-k-2}(\mu) \int_0^\infty e^{-sx} \int_0^\infty e^{-\mu z} \int_0^\infty d_z F(x-v+z) dF^{**}(v) dx$$

$$+ \sum_{i=0}^{b-n-1} f^{n+i-1}(\mu) \int_0^\infty e^{-sx} \int_0^\infty e^{-(s-\mu)t} P\{\eta(t)=i\} dt dF(x)$$

$$+ f^{b-1}(\mu) \int_0^\infty e^{-sx} \int_0^\infty e^{-(s-\mu)t} P\{\eta(t) \geq b-n\} dt dF(x),$$

з такою граничною умовою

$$\Phi_0(s, \mu) = \frac{\lambda}{\lambda+s} \Phi_1(s, \mu) dx + \frac{1}{\lambda+s}. \quad (14)$$

Прості перетворення з використанням формули

$$\int_0^\infty e^{-\beta t} \frac{(\alpha t)^i}{i!} dt = \frac{\alpha^i e^{-\beta t}}{\beta^{i+1}} \sum_{j=i+1}^\infty \frac{(x\beta)^j}{j!}$$

дають

$$D_n(s, \mu) =$$

$$\frac{f(s) \bar{p}_{b-n-1}(s) f^a(\mu) (f^{b-a-1}(\mu) - f^{b-a-1}(s))}{s-\mu} +$$

$$+ \sum_{i=0}^{b-n-1} \frac{f^{n+i-1}(\mu) \lambda^i}{(s-\mu+\lambda)^{i+1}} \sum_{j=i+1}^\infty \frac{e^{-(s+\lambda)x} (x(s-\mu+\lambda))^j}{j!} dF(x)$$

$$+ f^{b-1}(\mu) \sum_{i=b-n}^\infty \frac{\lambda^i}{(s-\mu+\lambda)^{i+1}} \sum_{j=i+1}^\infty \frac{e^{-(s+\lambda)x} (x(s-\mu+\lambda))^j}{j!} dF(x) \quad (15)$$

Отже, маємо рівняння

$$\Phi_n(s, \mu) - f(s) \sum_{i=n-1}^{b-n-2} p_i(s) \Phi_{n+i}(s, \mu) =$$

$$= (f(s))^{b-a} \Phi_a(s, \mu) \bar{p}_{b-n-1}(s) + D_n(s, \mu)$$

для $1 \leq n \leq b-1$ з граничною умовою (14).

Точно так само, як і вище, дістаємо

$$\Phi_n(s, \mu) = (1 + Q_{b-n}(s)) \Phi_{b-1}(s, \mu) -$$

$$- (f(s))^{b-a} \Phi_a(s, \mu) \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s)$$

$$- \sum_{i=n+1}^{b-1} R_{i-n}(s) D_i(s, \mu) \quad (16)$$

Поклавши тут $n=a$, отримаємо перше рівняння для $\Phi_a(s, \mu)$ та $\Phi_{b-1}(s, \mu)$.

$$\Phi_a(s, \mu) \left(1 + (f(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) \right) -$$

$$- \Phi_{b-1}(s, \mu) (1 + Q_{b-a}(s)) = - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) D_i(s, \mu)$$

З (14) та (16) маємо друге рівняння

$$(f(s))^{b-a} \sum_{i=1}^{b-1} \left(\frac{\lambda}{\lambda+s} R_{i-1}(s) - R_i(s) \right) \bar{p}_{b-i-1}(s) \Phi_a(s, \mu)$$

$$\left(\frac{s}{\lambda+s} + Q_b(s) - \frac{\lambda}{\lambda+s} Q_{b-1}(s) \right) \Phi_{b-1}(s, \mu) =$$

$$= \sum_{i=1}^{b-1} \left(R_i(s) - \frac{\lambda}{\lambda+s} R_{i-1}(s) \right) D_i(s, \mu) + \frac{1}{\lambda+s}$$

Якщо врахувати означення функції $\hat{R}_i(s, \lambda)$, яке ми привели на початку цього параграфу, а також наступну рівність

$$Q_n(s) = (1 - f(s)) \sum_{i=1}^{n-1} R_i(s) + f(s) \sum_{i=n}^{n-1} R_i(s) \bar{p}_{n-i-1}(s),$$

яка впливає з означення функції $Q_n(s)$, то наведені вище рівняння можемо переписати так

$$\begin{aligned} \Phi_a(s, \mu) \left(1 + (f(s))^{b-a} \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) \bar{p}_{b-i-1}(s) \right) - \\ - \Phi_{b-1}(s, \mu) (1 + Q_{b-a}(s)) = - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a}(s) D_i(s, \mu) \\ - \Phi_a(s, \mu) (f(s))^{b-a} \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) \bar{p}_{b-i-1}(s) + \\ + \Phi_{b-1}(s, \mu) \left(\frac{s}{\lambda + s} + (1 - f(s)) \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) + \right. \\ \left. + f(s) \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i(s, \lambda) \bar{p}_{b-i-1}(s) \right) = \\ = \sum_{i=1}^{b-1} \left(R_i(s) - \frac{\lambda}{\lambda + s} R_{i+1}(s) \right) D_i(s, \mu) + \frac{1}{\lambda + s} \end{aligned}$$

Розв'язуючи ці рівняння за правилом Крамера, отримуємо формули (12), що і завершує доведення теореми.

Напишемо ще формулу для характеристичної функції стаціонарного віртуального часу чекання. Легко зрозуміти, що цей час існує і його розподіл не залежить від початкового стану.

Неважко порахувати, що

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow 0} s^{-1} \Delta(s) = \begin{vmatrix} 1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i-1} & m \left(b-a-1 - \sum_{i=1}^{b-a-1} R_i \right) \\ - \sum_{i=1}^{b-1} (R_i - R_{i+1}) \bar{p}_{b-i-1} & \frac{1}{\lambda} + m R_{b-1} \end{vmatrix} \\ = \left(1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i-1} \right) \left(\frac{1}{\lambda} + m R_{b-1} \right) + \\ + m \left(b-a-1 - \sum_{i=1}^{b-a-1} R_i \right) \sum_{i=1}^{b-1} (R_i - R_{i+1}) \bar{p}_{b-i-1} \end{aligned}$$

де позначено $m = \int_0^\infty x dF(x)$, а $R_i(s) = R_i(0,1)$,

$Q_i(s) = Q_i(0,1)$. Аналогічно

$$\lim_{s \rightarrow 0} \Delta_a(s, \mu) = \Delta_a(\mu) =$$

$$= \begin{vmatrix} - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} D_i(\mu) & -1 - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i-1} \\ \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i D_i(\mu) + \frac{1}{\lambda} & \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i \bar{p}_{b-i-1} \end{vmatrix}$$

$$= \left(1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i-1} \right) \left(\sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i D_i(\mu) + \frac{1}{\lambda} \right) - \\ - \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} D_i(\mu) \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i \bar{p}_{b-i-1}$$

Використовуючи Тауберову теорему та перше співвідношення в (12), отримуємо такий результат.

Наслідок. Для всіх $0 \leq n \leq b-1$, та $\operatorname{Re} s > 0$ справедливе зображення

$$\begin{aligned} Me^{-sW(s)} = \frac{\left(1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i-1} \right) \left(\lambda \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i D_i(\mu) + 1 \right)}{\left(1 + \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} \bar{p}_{b-i-1} \right) (1 + \lambda m R_{b-1}) +} \\ + \lambda \sum_{i=a+1}^{b-1} R_{i-a} D_i(\mu) \sum_{i=1}^{b-1} \hat{R}_i \bar{p}_{b-i-1} \\ + \lambda m \left(b-a-1 - \sum_{i=1}^{b-a-1} R_i \right) \sum_{i=1}^{b-1} (R_i - R_{i+1}) \bar{p}_{b-i-1} \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} D_n(\mu) = \frac{\bar{p}_{b-n-1} f^n(\mu) (1 - f^{b-n-1}(\mu))}{\mu} + \\ + \sum_{i=0}^{b-n-1} f^{b-i-1}(\mu) \lambda^i \sum_{j=i+1}^{\infty} \frac{(\lambda - \mu)^{j-i-1}}{j!} m_j(\lambda) \\ + f^{b-i-1}(\mu) \sum_{j=b-a}^{\infty} \lambda^j \sum_{i=j+1}^{\infty} \frac{(\lambda - \mu)^{i-j-1}}{j!} m_i(\lambda) \end{aligned}$$

$$\text{а } m_i = \int_0^\infty e^{-\lambda x} x^i dF(x).$$

Література

1. Братійчук А.М. Система $M^G/G/1/b$ з відновлюючим рівнем входного потоку. Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки.
2. Takagi, H. Analysis of finite-capacity SM/G/1 S queue with a resume level. Performance Evaluation. -1985.- v, 5, N.3.- p. 197-203.
3. Takagi, H. Queueing Analysis.- Elsevier Science Publishers B.V., The Netherlands. v 2., 1993.
4. Королюк В.С. Граничные задачи для сложных пуассоновских процессов. - Киев: Наукова Думка, 1975.

Надійшло до редколегії 26.03.07

УДК 627.324.2/3-532.72

Власюк А.П., д.т.н., проф., Мартинюк* П.М.,
к.ф.-м.н., доц., Федорчук Н.А.

Двовимірна задача фільтраційної консолідації ґрунту з урахуванням повзучості його скелету в умовах тепло- масопереносу

Побудовано математичну модель задачі фільтраційної консолидації ґрунту з урахуванням повзучості його скелету та впливу перенесення солей в неізотермічному режимі. Числовий розв'язок відповідної двовимірної крайової задачі знайдено методом скінченних різниць. Досліджено задачу консолидації масиву глинистого ґрунту в області прямокутної форми.

Ключові слова: фільтраційна консолидація, повзучість скелету ґрунту, тепло-масоперенос.

A. P. Vlasjuk, Doctor of engineering sciences,
P. M. Martinyuk*, Candidate of physics and
mathematics sciences, N. A. Fedorchuk

The two-dimensional filtration consolidation problem taking into account the salt and heat transfer and creep of the soil skeleton

The mathematical model of the soil layer filtration consolidation problem taking into account the salt and heat transfer and creep of the soil skeleton has been formulated. The numerical solution of the correspondent two-dimensional boundary-value problem has been found by the finite difference method. As an example, the clayey soil layer infinite width filtration consolidation problem has been investigated.

Key Words: filtration consolidation, creep of the soil skeleton, salt and heat transfer.

*E-mail: A.P.Vlasjuk@rstu.lv.ua, P.M.Martinyuk@rstu.lv.ua

1. Вступ. В умовах зростаючого техногенного впливу людської діяльності на навколишнє середовище властивості ґрунтів, як природних систем, змінюються. Відповідно мають коригуватись та вдосконалюватись математичні моделі, якими описуються різноманітні процеси в ґрунтах, з метою підвищення їх (моделей) адекватності.

В роботах [2-4] було запропоновано врахувати явища тепло-масопереносу при дослідженні процесів фільтраційної консолидації ґрунтів. Зокрема, враховано явища хімічного та термічного осмосу, термодифузії, залежності коефіцієнтів фільтрації та дифузії від концентрації розчинених в поровій воді солей і температури пористого середовища.

Сам процес фільтраційної консолидації являє собою ущільнення насичених ґрунтів під впливом зовнішніх навантажень або власної ваги ґрунту. Протікання даного процесу пов'язане зі зміною тисків в поровій рідині, а також напружено-деформівного стану скелету ґрунту. Тому з фільтраційною консолидацією безпосередньо пов'язане питання стійкості споруд, зведених на водонасичених ґрунтах, а також самих ґрунтових споруд [7]. Саме з огляду на важливе практичне значення, задача фільтраційної консолидації є актуальною.

Ґрунти володіють властивістю повзучості [8]. Дана властивість передбачає зміну пористості

ґрунтового середовища в часі при постійних напруженнях в скелеті ґрунту. Урахування повзучості скелету ґрунту підвищує адекватність побудованих математичних моделей фільтраційної консолидації в умовах тепло-масопереносу, проте ускладнює їх.

В роботах [1, 2] досліджено математичні моделі задачі фільтраційної консолидації з урахуванням впливу масопереносу та явищ повзучості скелету ґрунту. Однак, не було враховано впливу теплопереносу. Крім того, числові розрахунки були проведені лише для одновимірної задачі. В роботі [6] знайдено числовий розв'язок одновимірної задачі фільтраційної консолидації з урахуванням повзучості скелету ґрунту та тепло-масопереносу. Тому є актуальним числове розв'язання двовимірної задачі фільтраційної консолидації з урахуванням впливу тепло-масопереносу та повзучості скелету ґрунту.

2. Математична модель задачі. Математичну модель двовимірної задачі фільтраційної консолидації ґрунтового масиву під впливом прикладеного смугового навантаження інтенсивністю $q(x,t)$ (рис.1) з урахуванням повзучості скелету ґрунту та впливу переносу солей в неізотермічному режимі, враховуючи результати робіт [1, 3, 4, 6], можна описати наступною крайовою задачею:

$$\frac{(1+e)(1+\xi)}{2\gamma_1} \left[\operatorname{div}(\mathbf{K}(c, T) \nabla h - \mathbf{v}(c, T) \nabla c - \mu(c, T) \nabla T) + \frac{1}{\gamma_1} \frac{\partial}{\partial t} (\operatorname{div}(\mathbf{K}(c, T) \nabla h - \mathbf{v}(c, T) \nabla c - \mu(c, T) \nabla T)) \right] + \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} + \frac{1}{2\gamma} \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{D}(c, T) \nabla c) + \operatorname{div}(\mathbf{D}_T(c, T) \nabla T) - (\mathbf{u}, \nabla c) - \gamma_m(c - C_m) = n \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\operatorname{div}(\lambda(c, T) \nabla T) - \rho c_p (\mathbf{u}, \nabla T) = c_T \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\mathbf{u} = e\mathbf{v} - \mathbf{K}(c, T) \nabla h + \mathbf{v}(c, T) \nabla c + \mu(c, T) \nabla T, \quad (4)$$

$$(\mathbf{u}, \mathbf{n})|_{\partial \Omega} = (\mathbf{u}, \mathbf{n})|_{L_1 L_2} = 0, \quad h|_{A_1} = h|_{A_2} = H_1, \quad h|_{B_1} = h|_{B_2} = H_2, \quad (5)$$

$$(\mathbf{q}_c, \mathbf{n})|_{A_1 A_2} = (\mathbf{q}_c, \mathbf{n})|_{L_1 L_2} = 0, \quad c|_{A_1} = C_m, \quad c|_{L_2 B} = C_1, \quad (6)$$

$$(\rho c_p \mathbf{u}, T - \lambda(c, T) \nabla T)|_{A_1 A_2} = (\rho c_p \mathbf{u}, T - \lambda(c, T) \nabla T)|_{L_1 L_2} = 0, \quad T|_{A_1} = T_1, \quad T|_{L_2 B} = T_2, \quad (7)$$

$$h(x, y, 0) = h_0(x, y), \quad c(x, y, 0) = c_0(x, y), \quad T(x, y, 0) = T_0(x, y), \quad (8)$$

де $t > 0$, $(x, y) \in \Omega$; C_1 , T_1 , T_2 , H_1 , H_2 , h_0 , c_0 , T_0 - задані функції. Тут використані наступні позначення: $h(x, y, t)$ - надлишковий напір; $c(x, y, t)$ - концентрація порового соляового розчину; $T(x, y, t)$ - температура; $\mathbf{q}_c = \mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D}(c, T) \nabla c - \mathbf{D}_T(c, T) \nabla T$ - вектор потоку розчинених солей; $\mathbf{K}(c, T) = \{k_{ij}(c, T)\}$, $\mathbf{v}(c, T) = \{v_{ij}(c, T)\}$, $\mathbf{D}(c, T) = \{D_{ij}(c, T)\}$, $\mathbf{D}_T(c, T) = \{D_{Tij}(c, T)\}$, $\mu(c, T) = \{\mu_{ij}(c, T)\}$, $\lambda(c, T) = \{\lambda_{ij}(c, T)\}$, $i, j = 1, 2$, - тензори відповідно коефіцієнтів фільтрації, хімічного осмосу, конвективної дифузії, термодифузії та термоосмосу, ефективної теплопровідності вологого ґрунту; $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ - вектор швидкості фільтрації соляового розчину; $\mathbf{n}$ - вектор напрямних косинусів зовнішньої нормалі до межі області фільтраційної консолідації; ρ , c_p - густина та питома теплоємність порового розчину; c_T - питома теплоємність ґрунту при сталому об'ємі; $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ - вектор швидкості руху твердих частинок ґрунту; t - час; $\bar{e}$ - середнє значення коефіцієнта пористості; γ - питома вага соляового розчину; n - пористість ґрунту; ξ , α_1 - коефіцієнти бічного тиску та стисливості ґрунту; γ_m - константа швидкості масообміну; C_m - концентрація граничного насичення; Θ , $\bar{h}$ - сума головних напружень в скелеті ґрунту та надлишковий напір в стані повної стабілізації.

Прийнята наступна залежність коефіцієнта пористості e від суми головних напружень Θ в скелеті ґрунту [8]

$$e = e_0 - \Theta \cdot \delta(t, 0) - \int_0^t \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} \delta(t, \tau) d\tau,$$

де $\delta(t, \tau) = a_0 + a_1(1 - e^{-\gamma(t-\tau)})$; e_0 - коефіцієнт пористості до прикладення навантаження. Величина a_0 характеризує ту частину деформацій, які виникають миттєво в момент прикладення навантаження. Математична модель (1)-(8) виведена в припущенні $a_0 \equiv 0$.

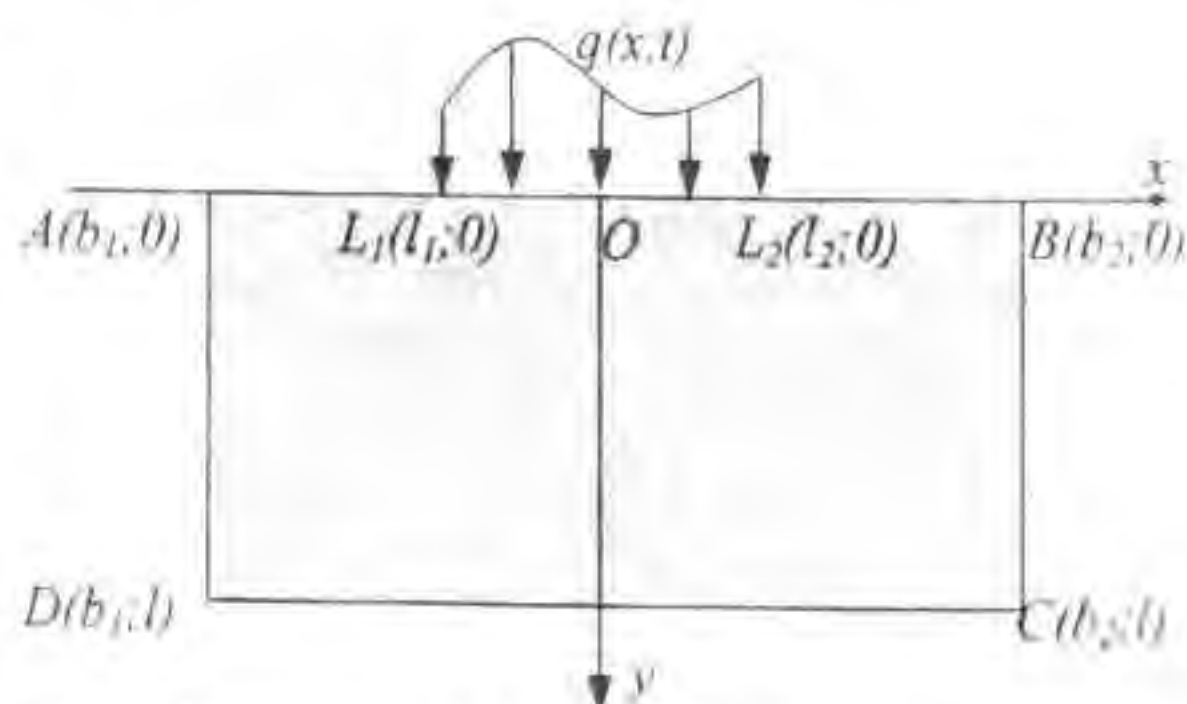


Рис. 1. Консолідація масиву ґрунту

3. Числове розв'язання крайової задачі (1)-(8) методом скінченних різниць. Покриємо область $\bar{Q}_T = \bar{\Omega} \times [0, t_0]$ рівномірною сіткою $\bar{Q}^{(2m_1, m_2, n)} = ([-m_1 h_1, m_1 h_1] \times [0, m_2 h_2]) \times [0, n_1 \tau]$ з кроками h_1 , h_2 та τ відповідно по змінних x , y та часу t , де $2m_1$, m_2 , n_1 - кількість кроків по просторових змінних та часу відповідно.

Для числового розв'язання двовимірної крайової задачі методом скінченних різниць використаємо локально-одновимірну схему Самарського [9]. Для дискретизації рівняння (1) використаємо неявну різницеву схему, а для рівнянь (2), (3) - монотонну різницеву схему Самарського [9]. В результаті отримуємо аналог диференціальних рівнянь (1)-(3) у вигляді системи різницевих рівнянь

$$\begin{aligned}
 \frac{h_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - h_{\eta,j_2}^{(j)}}{\tau} &= \frac{(1+\bar{e})(1+\xi)}{2\gamma_{\alpha_1}} \left[\Lambda_1^{(j)}(h^{(j+0,5)}) + \frac{1}{0,5\tau \cdot \gamma_1} \left\{ \Lambda_1^{(j)}(h^{(j+0,5)}) - \Lambda_1^{(j)}(h^{(j)}) \right\} \right] + f_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}, \\
 \frac{h_{\eta,j_2}^{(j+1)} - h_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{\tau} &= \frac{(1+\bar{e})(1+\xi)}{2\gamma_{\alpha_1}} \left[\Lambda_2^{(j+1)}(h^{(j+1)}) + \frac{1}{\gamma_1 \tau} \left\{ \Lambda_2^{(j+1)}(h^{(j+1)}) - \Lambda_2^{(j)}(h^{(j)}) \right\} \right] + f_{\eta,j_2}^{(j+1)}, \\
 n \frac{c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - c_{\eta,j_2}^{(j)}}{\tau} &= \frac{(\eta_1)_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_1} \left((d_1)_{\eta+1,j_2}^{(j)} \frac{c_{\eta+1,j_2}^{(j+0,5)} - c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} - (d_1)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - c_{\eta-1,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} \right) + \\
 &\quad + \frac{1}{h_1} \left((d_{T_1})_{\eta+1,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta+1,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} - (d_{T_1})_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta-1,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} \right) + \\
 &\quad + \frac{(u_1^+)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(D_1)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (d_1)_{\eta+1,j_2}^{(j)} \frac{c_{\eta+1,j_2}^{(j+0,5)} - c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} + \frac{(u_1^-)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(D_1)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (d_1)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - c_{\eta-1,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} - \frac{\gamma_m}{2} (c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - C_m), \\
 n \frac{c_{\eta,j_2}^{(j+1)} - c_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{\tau} &= \frac{(\eta_2)_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_2} \left((d_2)_{\eta,j_2+1}^{(j)} \frac{c_{\eta,j_2+1}^{(j+1)} - c_{\eta,j_2}^{(j+1)}}{h_2} - (d_2)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{c_{\eta,j_2}^{(j+1)} - c_{\eta,j_2-1}^{(j+1)}}{h_2} \right) + \\
 &\quad + \frac{1}{h_2} \left((d_{T_2})_{\eta,j_2+1}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2+1}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2}^{(j+1)}}{h_2} - (d_{T_2})_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2-1}^{(j+1)}}{h_2} \right) + \\
 &\quad + \frac{(u_2^+)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(D_2)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (d_2)_{\eta,j_2+1}^{(j)} \frac{c_{\eta,j_2+1}^{(j+1)} - c_{\eta,j_2}^{(j+1)}}{h_2} + \frac{(u_2^-)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(D_2)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (d_2)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{c_{\eta,j_2}^{(j+1)} - c_{\eta,j_2-1}^{(j+1)}}{h_2} - \frac{\gamma_m}{2} (c_{\eta,j_2}^{(j+1)} - C_m), \\
 c_T \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta,j_2}^{(j)}}{\tau} &= \frac{(\bar{\eta}_1)_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_1} \left((\bar{\lambda}_1)_{\eta+1,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta+1,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} - (\bar{\lambda}_1)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta-1,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} \right) + \\
 &\quad + \rho c_p \left\{ \frac{(u_1^+)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(\lambda_1)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (\bar{\lambda}_1)_{\eta+1,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta+1,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} + \frac{(u_1^-)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(\lambda_1)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (\bar{\lambda}_1)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)} - T_{\eta-1,j_2}^{(j+0,5)}}{h_1} \right\}, \\
 c_T \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2}^{(j+0,5)}}{\tau} &= \frac{(\bar{\eta}_2)_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_2} \left((\bar{\lambda}_2)_{\eta,j_2+1}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2+1}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2}^{(j+1)}}{h_2} - (\bar{\lambda}_2)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2-1}^{(j+1)}}{h_2} \right) + \\
 &\quad + \rho c_p \left\{ \frac{(u_2^+)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(\lambda_2)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (\bar{\lambda}_2)_{\eta,j_2+1}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2+1}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2}^{(j+1)}}{h_2} + \frac{(u_2^-)_{\eta,j_2}^{(j)}}{(\lambda_2)_{\eta,j_2}^{(j)}} \cdot (\bar{\lambda}_2)_{\eta,j_2}^{(j)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j+1)} - T_{\eta,j_2-1}^{(j+1)}}{h_2} \right\}
 \end{aligned}$$

$$i_1 = \overline{-m_1 + 1, m_1 - 1}, \quad i_2 = \overline{1, m_2 - 1}, \quad j = \overline{0, n_1 - 1},$$

де

$$\begin{aligned}
 \Lambda_1^{(k)}(h^{(j)}) &= \frac{1}{h_1} \left\{ \left((a_1)_{\eta+1,j_2}^{(k)} \frac{h_{\eta+1,j_2}^{(j)} - h_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_1} - (a_1)_{\eta,j_2}^{(k)} \frac{h_{\eta,j_2}^{(j)} - h_{\eta-1,j_2}^{(j)}}{h_1} \right) - \left((b_1)_{\eta+1,j_2}^{(k)} \frac{c_{\eta+1,j_2}^{(j)} - c_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_1} - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - (b_1)_{\eta,j_2}^{(k)} \frac{c_{\eta,j_2}^{(j)} - c_{\eta-1,j_2}^{(j)}}{h_1} \right) - \left((z_1)_{\eta+1,j_2}^{(k)} \frac{T_{\eta+1,j_2}^{(j)} - T_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_1} - (z_1)_{\eta,j_2}^{(k)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j)} - T_{\eta-1,j_2}^{(j)}}{h_1} \right) \right\}, \\
 \Lambda_2^{(k)}(h^{(j)}) &= \frac{1}{h_2} \left\{ \left((a_2)_{\eta,j_2+1}^{(k)} \frac{h_{\eta,j_2+1}^{(j)} - h_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_2} - (a_2)_{\eta,j_2}^{(k)} \frac{h_{\eta,j_2}^{(j)} - h_{\eta,j_2-1}^{(j)}}{h_2} \right) - \left((b_2)_{\eta,j_2+1}^{(k)} \frac{c_{\eta,j_2+1}^{(j)} - c_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_2} - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - (b_2)_{\eta,j_2}^{(k)} \frac{c_{\eta,j_2}^{(j)} - c_{\eta,j_2-1}^{(j)}}{h_2} \right) - \left((z_2)_{\eta,j_2+1}^{(k)} \frac{T_{\eta,j_2+1}^{(j)} - T_{\eta,j_2}^{(j)}}{h_2} - (z_2)_{\eta,j_2}^{(k)} \frac{T_{\eta,j_2}^{(j)} - T_{\eta,j_2-1}^{(j)}}{h_2} \right) \right\}, \\
 (a_1)_{\eta,j_2}^{(j)} &= \frac{1}{2} \left((k_1)_{\eta,j_2}^{(j)} + (k_1)_{\eta-1,j_2}^{(j)} \right), \quad (a_2)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((k_2)_{\eta,j_2}^{(j)} + (k_2)_{\eta,j_2-1}^{(j)} \right), \quad (b_1)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((v_1)_{\eta,j_2}^{(j)} + (v_1)_{\eta-1,j_2}^{(j)} \right), \\
 (b_2)_{\eta,j_2}^{(j)} &= \frac{1}{2} \left((v_2)_{\eta,j_2}^{(j)} + (v_2)_{\eta,j_2-1}^{(j)} \right), \quad (z_1)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((\mu_1)_{\eta,j_2}^{(j)} + (\mu_1)_{\eta-1,j_2}^{(j)} \right), \quad (z_2)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((\mu_2)_{\eta,j_2}^{(j)} + (\mu_2)_{\eta,j_2-1}^{(j)} \right), \\
 (d_1)_{\eta,j_2}^{(j)} &= \frac{1}{2} \left((D_1)_{\eta,j_2}^{(j)} + (D_1)_{\eta-1,j_2}^{(j)} \right), \quad (d_2)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((D_2)_{\eta,j_2}^{(j)} + (D_2)_{\eta,j_2-1}^{(j)} \right), \quad (d_{T_1})_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((D_{T_1})_{\eta,j_2}^{(j)} + (D_{T_1})_{\eta-1,j_2}^{(j)} \right), \\
 (d_{T_2})_{\eta,j_2}^{(j)} &= \frac{1}{2} \left((D_{T_2})_{\eta,j_2}^{(j)} + (D_{T_2})_{\eta,j_2-1}^{(j)} \right), \quad (\bar{\lambda}_1)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((\lambda_1)_{\eta,j_2}^{(j)} + (\lambda_1)_{\eta-1,j_2}^{(j)} \right), \quad (\bar{\lambda}_2)_{\eta,j_2}^{(j)} = \frac{1}{2} \left((\lambda_2)_{\eta,j_2}^{(j)} + (\lambda_2)_{\eta,j_2-1}^{(j)} \right)
 \end{aligned}$$

$$(\pi_{\alpha})_{\eta,2}^{(ii)} = \frac{1}{1 + \frac{h_{\alpha}(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}}{2(D_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}}} = 1 - \frac{h_{\alpha}(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}}{2(D_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}} + O(h_{\alpha}^2), \quad (\bar{\pi}_{\alpha})_{\eta,2}^{(ii)} = \frac{1}{1 + \frac{h_{\alpha}\rho c_p(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}}{2(\lambda_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}}} = 1 - \frac{h_{\alpha}\rho c_p(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}}{2(\lambda_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}} + O(h_{\alpha}^2),$$

$$(u_{\alpha}^*)_{\eta,2}^{(ii)} = -\frac{(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)} + |(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}|}{2} \geq 0, \quad (u_{\alpha}^-)_{\eta,2}^{(ii)} = \frac{-(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)} - |(u_{\alpha})_{\eta,2}^{(i)}|}{2} \leq 0, \quad i_1 = 1, 2, \quad f_{\eta,2}^{(ii)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial h^*}{\partial t} \Big|_{\eta,2} + \frac{1}{2\gamma} \frac{\partial \Theta^*}{\partial t} \Big|_{\eta,2} \right)$$

Для знаходження напору, концентрації солей та температури з вищенаведених різницевих рівнянь застосовувався метод прогонки [9] з відповідною апроксимацією граничних умов.

4. Результати числових експериментів. Вияснення оцінки впливу повзучості скелету ґрунту на процес фільтраційної консолідації в умовах фільтрації сольових розчинів та неізотермічного режиму для даної двовимірної задачі проведено на тестовому прикладі. В зв'язку з цим розглянуто задачу фільтраційної консолідації масиву двухфазного глинистого ґрунту товщиною $l=10\text{ м}$ при $b_1=-20\text{ м}$, $b_2=20\text{ м}$, $l_1=-10\text{ м}$, $l_2=10\text{ м}$ під впливом миттєво прикладеного ємгового навантаження інтенсивністю $q=3,8 \cdot 10^7 \text{ Па}$ з наступними вихідними даними:

$$e=0.55, \quad \xi=0.75, \quad \gamma_1=10^{-2} \text{ доба}^{-1}, \quad n=0.4, \\ D_1=D_2=2 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{доба}, \quad \gamma_m=0 \text{ доба}^{-1}, \quad \rho=1100 \text{ кг/м}^3, \\ D_{\alpha_1}=D_{\alpha_2}=2 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{доба}, \quad \gamma=10^4 \text{ Н/м}^2, \quad C_1=C_m,$$

$$a_1=2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м} \cdot \text{доба}^2}{\text{кг}}, \quad C_{\alpha_1}=350 \text{ г/літр},$$

$$v_1=v_2=2.8 \cdot 10^{-5} \text{ м}^5/\text{кг} \cdot \text{доба}, \quad c_p=4.2 \text{ кДж/кг} \cdot \text{град}^{\circ},$$

$$\lambda_1=\lambda_2=108 \text{ кДж/м} \cdot \text{град} \cdot \text{доба}^{\circ}, \quad H_1=H_2=5 \text{ м},$$

$$c_f=2137 \text{ кДж/м}^2 \cdot \text{град}^{\circ}, \quad T_1=T_2=17+13 \cos\left(\frac{\pi t}{180}\right),$$

$$\mu_1=\mu_2=2.8 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{град} \cdot \text{доба}.$$

В рівнянні (1) $\frac{\partial h^*}{\partial t}=0$, $\frac{\partial \Theta^*}{\partial t}=0$, оскільки зовнішнє навантаження вважається миттєво прикладеним і незмінним у часі. Також в законі (4) знехтувано швидкістю руху твердих частинок ґрунту. Залежність коефіцієнта фільтрації від концентрації сольового розчину $k=k(c)$ взята з роботи [3]. Функції T_1 та T_2 визначаються з умов сезонних коливань температури, причому $T_{\max}=30^{\circ}\text{C}$, $T_{\min}=4^{\circ}\text{C}$. Для початкового розподілу напорів масмо [10]:

$$H_0(x,y)=\frac{1}{2\gamma} \left(\frac{ql_1}{b_2} \frac{1}{1-\nu} + \frac{4q}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin \frac{m\pi l_2}{b_2}}{m} \frac{\text{sh} \frac{m\pi l}{b_2} \text{ch} \frac{m\pi(y-l)}{b_2}}{\text{sh} \frac{2m\pi l}{b_2} + \frac{2m\pi l}{b_2}} \cos \frac{m\pi x}{b_2} \right),$$

де $\nu = \frac{\xi}{1+\xi}$ – коефіцієнт Пуассона в умовах неможливості бічного розширення.

На рис. 2, 3 наведені відповідно графіки розподілу полів надлишкових напорів в умовах тепло-солепереносу з врахуванням та без врахування повзучості скелету ґрунту при $t=720$ діб, а на рис. 4 – графіки різниці між розподілом цих надлишкових напорів. Аналогічні графіки різниці між розподілом надлишкових напорів без врахування та з врахуванням тепло-солепереносу при $t=720$ діб наведені на рис. 5. Графіки розподілу концентрації солей та температури наведені відповідно на рис. 6 та рис. 7.

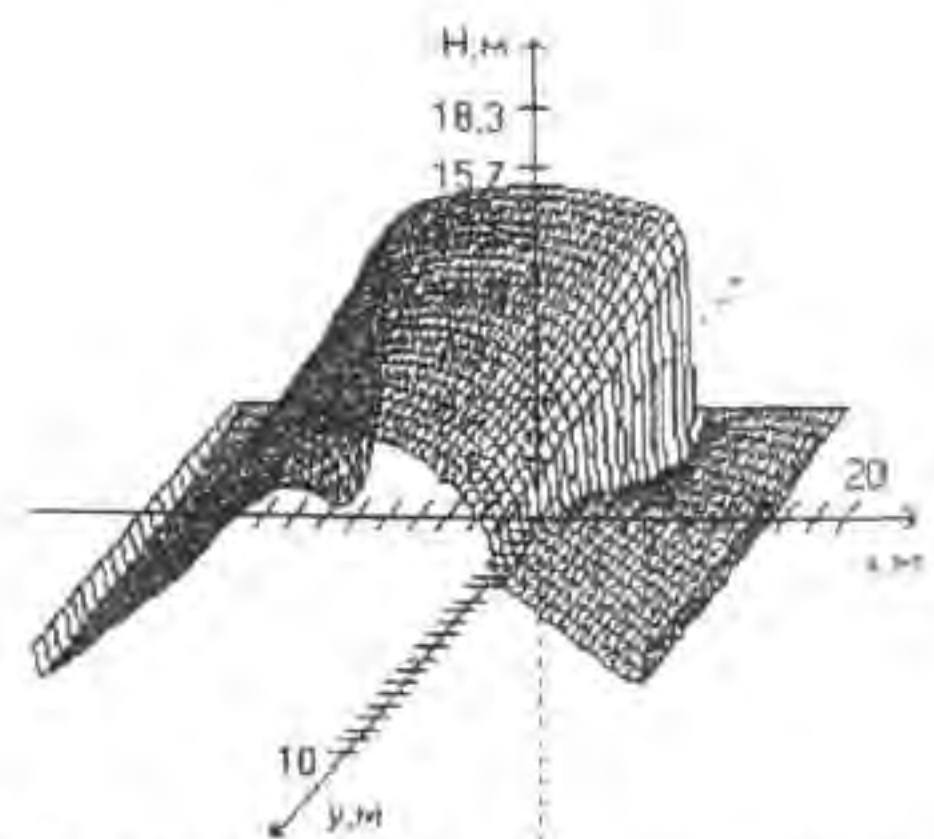


Рис.2. Графік розподілу поля надлишкових напорів в умовах тепло-солепереносу при $t=720$ діб з врахуванням повзучості скелету ґрунту

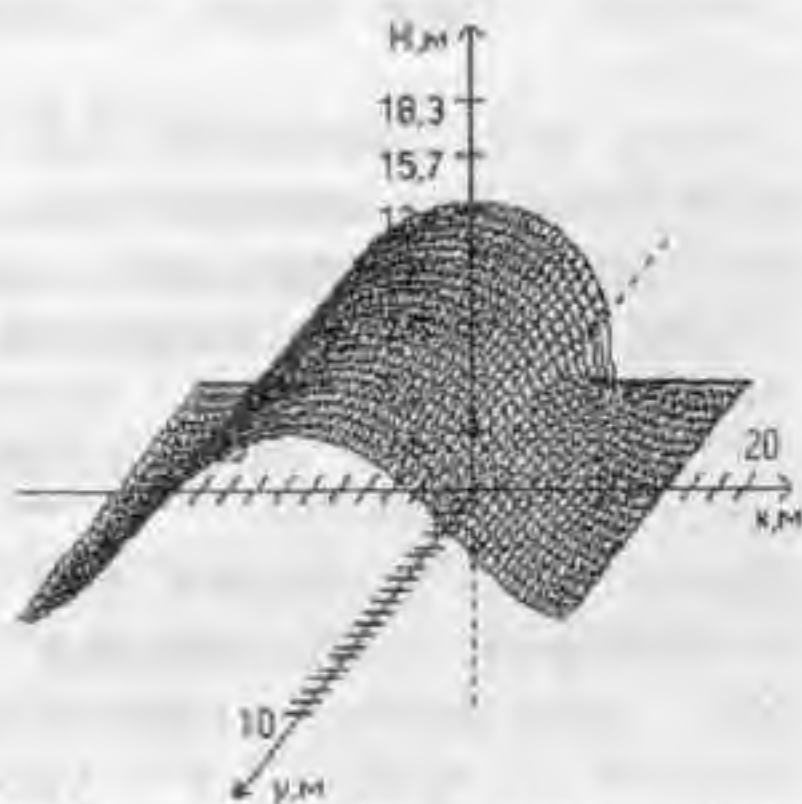


Рис.3. Графік розподілу поля надлишкових напорів в умовах тепло-солепереносу при $t=720$ діб без врахування повзучості скелету ґрунту

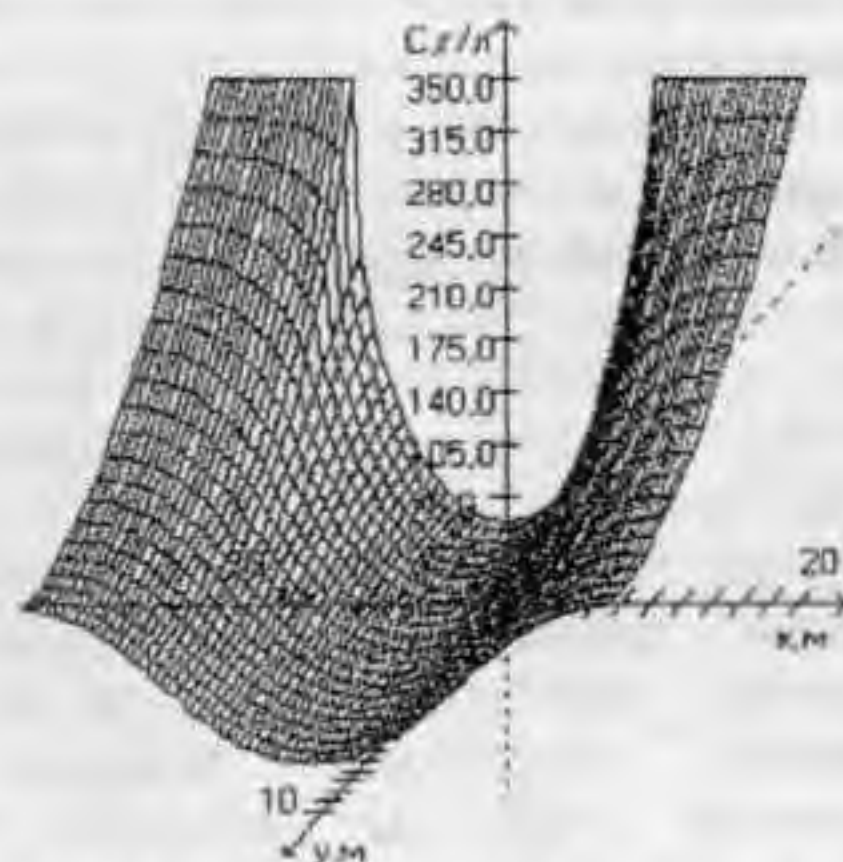


Рис.6. Графік розподілу поля концентрації солей при $t=720$

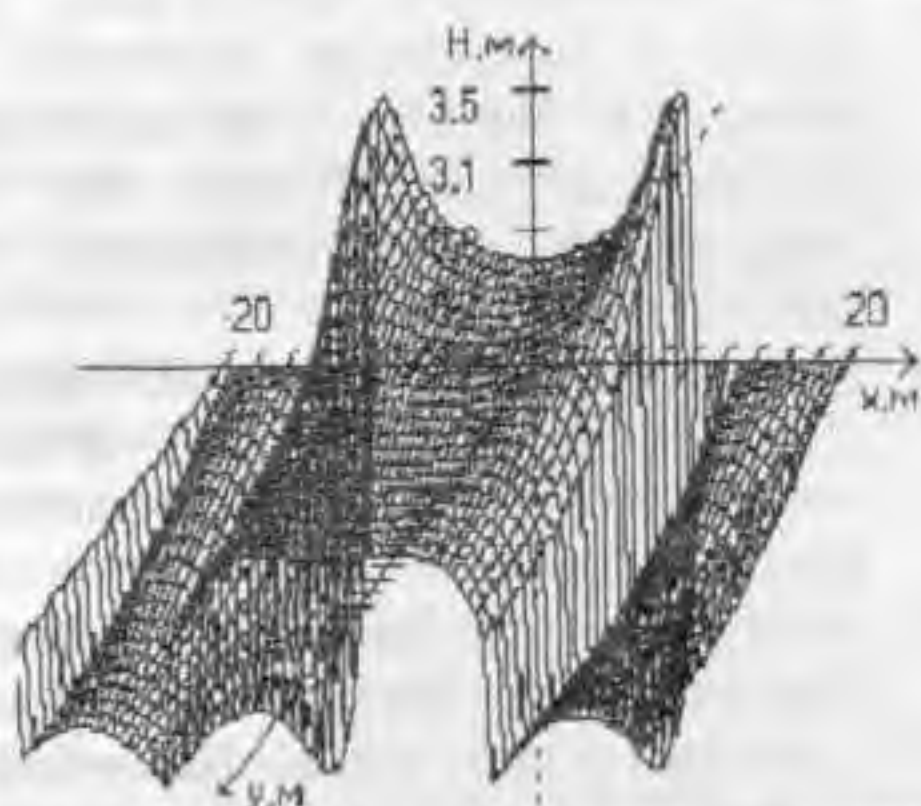


Рис.4. Графік різниці між розподілом надлишкових напорів, зображеними на рис. 2 та рис. 3

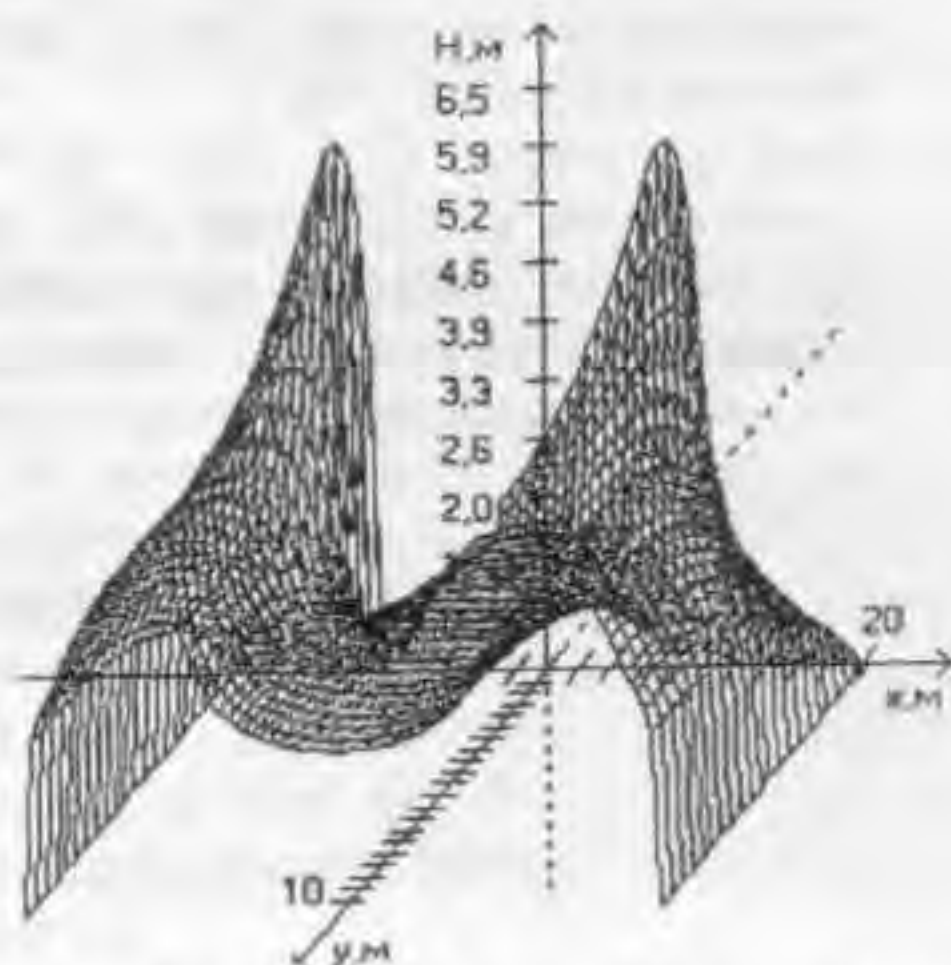


Рис.5. Графік різниці між розподілом надлишкових напорів без врахування та з врахуванням тепло-солепереносу при $t = 720$ діб (в обох випадках враховується повзучість скелету ґрунту)

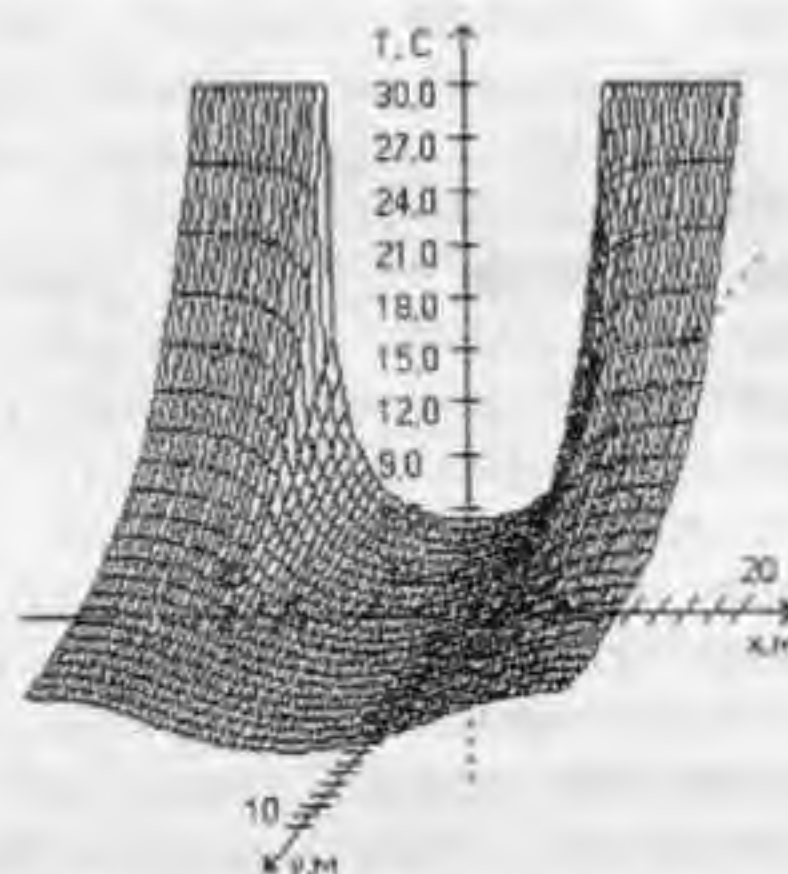


Рис.7. Графік розподілу поля температури при $t=720$ діб

5. Висновки. Аналіз результатів проведених числових експериментів дозволив зробити наступні висновки:

1) в околі дренажних меж ґрунтових масивів (рис. 4) в підобластях, де ґрунт не перейшов в переущільнений стан, надлишкові напори у випадку врахування повзучості скелету ґрунту розсіюються швидше, ніж у випадку без врахування повзучості. При розсіюванні надлишкових напорів в поровій рідині в скелеті ґрунту зростають напруження, що в свою чергу впливає на деформацію скелету ґрунту. Якщо властивість повзучості скелету ґрунту не враховувати, то дані деформації відбуваються миттєво, а при врахуванні – процес деформування скелету ґрунту відбувається поступово в часі. Під впливом цього надлишкові напори за даний проміжок часу встигають розсіятися ще на деяку величину. Це, загалом, і пояснює вищезазначений факт;

2) в околах недренажних меж надлишкові напори при врахуванні повзучості скелету ґрунту розсіюються повільніше, ніж у випадку без

врахування. Дане явище пояснюється затримкою деформаційних процесів в часі та непроникністю даних меж для вільного відтоку порової рідини.

Якісна картина впливу тепло-солепереносу на процес фільтраційної консолідації (див. рис. 5) з урахуванням та без урахування повзучості скелету ґрунту співпадає. Тестовий приклад для відповідної крайової задачі в двовимірному випадку показав, що надлишкові напори в околах дренажних меж розсіюються швидше при врахуванні процесів тепло-солепереносу. Це пояснюється осмотичними явищами, а також залежністю коефіцієнта фільтрації від концентрації солей. На початкових стадіях концентрація порового соляного розчину в околах дренажних меж $\leq 100 \text{ г/л}$. А коефіцієнт фільтрації соляного розчину при даній концентрації більший за коефіцієнт фільтрації чистої води. Це і сприяє більш швидкому розсіюванню надлишкових напорів.

Отже, на підставі [1, 3, 4, 6] сформульовано математичну модель двовимірної задачі фільтраційної консолідації масиву ґрунту з урахуванням повзучості його скелету та впливу явищ тепло-солепереносу. Числовий розв'язок відповідної крайової задачі знайдено методом скінченних різниць. Як приклад, наведено результати та аналіз числових експериментів з дослідження фільтраційної консолідації масиву глинистого ґрунту в області прямокутної форми.

Слід відмітити, що в даній статті ми не торкаємося питання теоретичного встановлення точності отриманих числових розв'язків. Також варто було б порівняти скінченнорізничні розв'язки із розв'язками, отриманими іншим методом, наприклад методом скінченних елементів.

Список використаних джерел

1. Булавацький В.М., Кривонос Ю.Г., Скопечкий В.В. Некласичні математичні моделі процесів тепло- і масопереносу. – Київ: Наук. думка, 2005. – 282с.
2. Скопечкий В.В., Булавацький В.М. Математичне моделювання деяких процесів фільтраційної консолідації масивів, насичених соляними розчинами // Доповіді НАН України. – 2005. – №8. – С.55-61.
3. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів в процесі фільтрації соляних

розчинів. – Рівне: Вид-во УДУВГП, 2004. – 211с.

4. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Числове розв'язання двовимірної задачі фільтраційної консолідації ґрунтового масиву за наявності перенесення солей у неізотермічному режимі // Вісник Львів. ун-ту, Серія: прикл. матем. інформ. – 2006. – Вип. 11. – С. 148-159.
5. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Числове моделювання стабілізованими схемами МСЕ фільтраційної консолідації тіла ґрунтової греблі з урахуванням тепломасопереносу // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2005. – 48, №2. – С. 59–70.
6. Власюк А.П., Мартинюк П.М., Федорчук Н.А. Фільтраційна консолідація масиву ґрунту з урахуванням повзучості його скелету в умовах тепло-масопереносу соляних розчинів // Вісник Нац. ун-ту водн. госп-ва та природокористув. – Вип. 1 (33). – 2006. – С. 245-253.
7. Жеребятська О.В., Власюк А.П., Мартинюк П.М. Порівняльна оцінка результатів математичного моделювання фільтраційної консолідації тіла та основи ґрунтової греблі за наявності масопереносу солей з натурними даними // Світ геотехніки. – 2006. – №3. – С. 4-9.
8. Иванов П.Л. Грунты и основания гидротехнических сооружений. – Москва: Высш. школа, 1991. – 447с.
9. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. – Москва: Научный мир, 2003. – 316 с.
10. Тер-Мартirosян З.Г., Пак Чун Сун. Консолидация и ползучесть слоя ґрунта ограниченной ширины под действием местной нагрузки // Основания, фундаменты, механика ґрунтов. – 1998. – №2. – С. 2–6.

Надійшла до редколегії 05.04.2007

УДК 519.8

Валентин М. Головач

Мінімаксне оцінювання детермінованих даних лінеаризованої задачі Нав'є-Стокса в умовах невизначеності

Одержані системи варіаційних рівнянь, через розв'язки яких виражаються мінімаксні оцінки функціоналів від правих частин рівнянь, що входять до постановки лінеаризованої задачі Нав'є-Стокса.

Ключові слова: мінімаксні оцінки, спостереження, функціонали від правих частин.

E-mail: yourip@mail.ru

Вступ. В роботі вперше досліджена задача мінімаксного оцінювання невідомих правих частин рівнянь, що входять у постановку лінеаризованої задачі Нав'є-Стокса у припущенні, що вони, а також статистичні характеристики шумів в спостереженнях невідомого розв'язку, підпорядковані деяким квадратичним обмеженням. Дано означення мінімаксних оцінок та похибок оцінювання і одержані системи варіаційних рівнянь, через розв'язки яких виражаються такі оцінки. Для цього істотним чином була використана змішана варіаційна задача, що є еквівалентною операторній постановці лінеаризованої задачі Нав'є-Стокса [1].

Позначимо через H гільбертів простір над $\mathbb{R}$ із скалярним добутком $(\cdot, \cdot)_H$ і нормою $\|\cdot\|_H$. Через $J_H \in \mathcal{L}(H, H')$ будемо позначати оператор, що називається ізометричним ізоморфізмом, діючий із H на його спряжений простір H' , і визначаємія рівністю $(u, v)_H = \langle J_H u, v \rangle_{H' \times H} \forall u, v \in H$, де $\langle J_H x, y \rangle_{H' \times H} := f(y)$ для $x \in H, f \in H'$. Цей оператор існує в силу теореми Ріса. Позначимо через $L^2(\Omega, H)$ простір Бохнера, складений із випадкових елементів $\xi = \xi(\omega)$, визначених на деякому імовірнісному просторі $(\Omega, \mathcal{B}, P)$ із значеннями в H таких, що $\|\xi\|_{L^2(\Omega, H)}^2 = \int_{\Omega} \|\xi(\omega)\|_H^2 dP(\omega) < \infty$. В цьому випадку існує інтеграл Бохнера $\int_{\Omega} \xi(\omega) dP(\omega) \in H$, що називається математичним сподіванням або середнім випадкового елемента $\xi(\omega)$.

Введемо також наступні позначення: $x = (x_1, \dots, x_n)$ – просторова змінна, що належить обмеженій відкритій області $D \subset \mathbb{R}^n$ з лінійцевою границею; $dx = dx_1 \cdots dx_n$ – міра Лебега в $\mathbb{R}^n$; $L^2(D)$ – простір функцій, сумовних є квадратом в області D . Далі використовуються стандартні позначення соболевських просторів $H^1(D), H_0^1(D)$

Valentin M. Golovach

Minimax estimation of deterministic data of linearized Navier-Stokes problem under uncertainty conditions.

We obtain systems of variational equations via whose solutions the minimax estimates of functionals from right-hand sides of the equations entering in the statement of the linearized Navier-Stokes problem are expressed.

Key Words: minimax estimates, observations, functionals from right-hand sides.

і $H^{-1}(D)$ з відповідними нормами.

Позначимо через

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{w}) := \int_D \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} \frac{\partial w_i(x)}{\partial x_j} dx \quad (1)$$

$$b(\mathbf{w}, p) := - \int_D p(x) \sum_{i=1}^n \frac{\partial w_i}{\partial x_i} dx \quad (2)$$

обмежені білінійні форми на $H_0^1(D)^n \times H_0^1(D)^n$ і $H_0^1(D)^n \times L^2(D)$ відповідно, перша з яких визначає лінійний неперервний оператор $\Delta : H_0^1(D)^n \rightarrow H^{-1}(D)^n$, а друга – лінійний неперервний оператор $-\text{div} : H_0^1(D)^n \rightarrow L^2(D)$, а також транспонований до нього оператор $\text{grad} : L^2(D) \rightarrow H^{-1}(D)^n$ рівностями

$$\langle \Delta \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle_{H^{-1}(D)^n \times H_0^1(D)^n} = a(\mathbf{v}, \mathbf{w}) \quad (3)$$

для будь-яких $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in H_0^1(D)^n$ і

$$(-\text{div} \mathbf{w}, p)_{L^2(D)} = \langle \mathbf{w}, \text{grad} p \rangle_{H_0^1(D)^n \times H^{-1}(D)^n} = b(\mathbf{w}, p) \quad (4)$$

для будь-яких $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n) \in H_0^1(D)^n, p \in L^2(D)$. (Тут, очевидно, оператор Δ діє за формулою $\Delta \mathbf{v} = (\Delta v_1, \dots, \Delta v_n) \forall \mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n) \in H_0^1(D)^n$, в який оператор Лапласа Δ визначається співвідношенням $\langle \Delta \varphi, \psi \rangle_{H^{-1}(D) \times H_0^1(D)} = \int_D \sum_{j=1}^n \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_j} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_j} dx, \forall \varphi, \psi \in H_0^1(D)$, а оператори div і grad визначається формулами $\text{div} \mathbf{w} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial w_i}{\partial x_i}$ і $\text{grad} p = (\frac{\partial p}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial p}{\partial x_n}) \forall \mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n) \in H_0^1(D)^n$ и $\forall p \in L^2(D)$, в яких похідні слід розуміти в смислі розподілів в D).

Нехай стан системи характеризується функціями $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n) \in H_0^1(D)^n$ і $p \in L^2(D)$, що задовольняють лінеаризованій задачі Нав'є-Стокса:

$$-\nu \Delta \mathbf{v} + \text{grad} p = \mathbf{f} \quad \text{в } D, \quad (5)$$

$$-\operatorname{div} \mathbf{v} = q \quad \text{в } D.$$

$$(6) \quad \text{Тут } \nu = \operatorname{const} > 0, \mathbf{f}(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x)) \text{ і } q(x) \text{ — невідомі функції, що належать множині}$$

$$G_0 := \{(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{q}) \in L^2(D)^n \times L^2(D) : (Q_1(\tilde{\mathbf{f}} - \mathbf{f}_0), \tilde{\mathbf{f}} - \mathbf{f}_0)_{L^2(D)^n} + (Q_2(\tilde{q} - q_0), \tilde{q} - q_0)_{L^2(D)} \leq 1, \int_D \tilde{q}(x) dx = 0\}. \quad (7)$$

а $\mathbf{f}_0 \in L^2(D)^n$ і $q_0 \in L^2(D)$ — задані функції, причому $\int_D q_0(x) dx = 0$, Q_1 і Q_2 — неперервні, додатно визначені, самоспряжені оператори, задані в $L^2(D)^n$ і $L^2(D)$ відповідно, обернені до яких обмежені. (Зазначимо, що якщо $(\mathbf{v}_1, p_1)$ і $(\mathbf{v}_2, p_2)$ — два розв'язки задачі (5), (6), то $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2$ і $p_1 - p_2 = c = \operatorname{const}$.)

Задача полягає в тому, щоб за спостереженнями елементів вигляду

$$y_1(\mathbf{v}; \eta_1) = C_1 \mathbf{v} + \eta_1, \quad y_2(p; \eta_2) = C_2 p + \eta_2, \quad (8)$$

що належать сепарабельним гільбертовим просторам H_1 и H_2 над $\mathbb{R}$ відповідно, оцінити значення лінійного функціоналу

$$l(\mathbf{f}, q) := \int_D (l_1(x), \mathbf{f}(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D l_2(x) q(x) dx \quad (9)$$

в класі оцінок

$$\widehat{l(\mathbf{f}, q)} := (u_1, y_1(\mathbf{v}; \eta_1))_{H_1} + (u_2, y_2(p; \eta_2))_{H_2} + c, \quad (10)$$

$$\pi(u_1, u_2, c) := \sup_{(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{q}) \in G_0, (\tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_2) \in G_1} \sup_{\alpha \in \mathbb{R}} \mathbb{E} |l(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{q}) - (u_1, y_1(\tilde{\mathbf{v}}; \tilde{\eta}_1))_{H_1} - (u_2, y_2(\tilde{p} + \alpha; \tilde{\eta}_2))_{H_2} - c|^2 \rightarrow \inf_{u_1 \in H_1, u_2 \in H_2, c \in \mathbb{R}} \quad (12)$$

де $(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{p})$ — деякий розв'язок задачі (5), (6) при $\mathbf{f}(x) = \tilde{\mathbf{f}}(x)$, $q(x) = \tilde{q}(x)$. Величину $r(\mathbf{f}, q) = \{\mathbb{E} |\widehat{l(\mathbf{f}, q)} - l(\mathbf{f}, q)|^2\}^{1/2}$ будемо називати похибкою мінімаксного оцінювання виразу $l(\mathbf{f}, q)$.

Представлення для мінімаксних оцінок і похибок оцінювання. Введемо до розгляду при фіксуванні $(u_1, u_2) \in U := \{(u_1, u_2) \in H_1 \times H_2 : \int_D C_2^t J_{H_2} u_2(x) dx = 0\}$, пару функцій $(z_1(\cdot; u_1, u_2), z_2(\cdot; u_1, u_2)) \in H_0^1(D)^n \times L^2(D)$ як розв'язок наступної крайової задачі:

$$-\nu \Delta \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2) + \operatorname{grad} z_2(\cdot; u_1, u_2) = -C_1^t J_{H_1} u_1 \quad \text{в } D, \quad (14)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2) = C_2^t J_{H_2} u_2 \quad \text{в } D, \quad (15)$$

де $(\mathbf{v}, p)$ — невідомий розв'язок задачі (5)–(6), l_1 і l_2 — задані елементи з $L^2(D)^n$ і $L^2(D)$, $u_1 \in H_1$, $u_2 \in H_2$, $c \in \mathbb{R}$, $C_1 \in \mathcal{L}(L^2(D)^n, H_1)$ і $C_2 \in \mathcal{L}(L^2(D), H_2)$ — лінійні неперервні оператори, причому обмеження оператора C_2 на підпростір $\operatorname{Ker}(\operatorname{grad}) = \{t : t = \operatorname{const} \text{ в } D\}$ припускається ін'єктивним, $(\eta_1, \eta_2) \in G_1$, а через G_1 позначено множину випадкових елементів $\tilde{\eta}_1 \in L^2(\Omega, H_1)$ і $\tilde{\eta}_2 \in L^2(\Omega, H_2)$ з нульовими середніми, що задовольняють умову

$$\mathbb{E}(\tilde{Q}_1 \tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} + \mathbb{E}(\tilde{Q}_2 \tilde{\eta}_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2} \leq 1, \quad (11)$$

в який $\tilde{Q}_1$ і $\tilde{Q}_2$ — задані в H_1 і H_2 обмежені самоспряжені додатно визначені оператори, що мають обмежені обернені, і символом $\mathbb{E}\xi$ позначено математичне спостереження випадкової величини $\xi = \xi(\omega)$. **Означення.** Оцінку вигляду

$$\widehat{l(\mathbf{f}, q)} = (u_1, y_1(\mathbf{v}; \eta_1))_{H_1} + (u_2, y_2(p; \eta_2))_{H_2} + c \quad (12)$$

будемо називати мінімаксною оцінкою $l(\mathbf{f}, q)$, якщо елементи $u_1 \in H_1$, $u_2 \in H_2$ і число c вибираються із умови

$$\int_D Q_2^{-1}(z_2(x; u_1, u_2) + l_2(x)) dx = 0, \quad (16)$$

де $C_1^t : H_1' \rightarrow L^2(D)^n$ і $C_2^t : H_2' \rightarrow L^2(D)$ — оператори, транспоновані до C_1 та C_2 , які визначаються співвідношеннями $\int_D (C_1^t w(x), v(x))_{\mathbb{R}^n} dx = \langle w, C_1 v \rangle_{H_1' \times H_1}$ для усіх $v \in L^2(D)^n$, $w \in H_1'$, $\int_D C_2^t w(x) v(x) dx = \langle w, C_2 v \rangle_{H_2' \times H_2}$ для усіх $v \in L^2(D)$, $w \in H_2'$, $\tilde{Q}_1 = Q_1 J_{V_1}$ і $\tilde{Q}_2 = Q_2 J_{V_2}$. Легко бачити, що внаслідок припущення про ін'єктивність обмеження оператора C_2 на підпростір $\operatorname{Ker}(\operatorname{grad}) = \{t : t = \operatorname{const} \text{ в } D\}$, множина U непорожня. Функції $z_1(x; u_1, u_2)$, $z_2(x; u_1, u_2)$ визначаються з рівнянь (14)–(16) єдиним чином. Дійсно, умова $(u_1, u_2) \in U$ співпадає з необхідною і достатньою умовою розв'язності крайової задачі

(14) – (15).

Нехай $(\mathbf{z}_1(\cdot; u), z_2^{(0)}(\cdot; u)) \in H^1(D)^n \times L^2(D)$ – деякий розв'язок задачі (14) – (15). Покладемо

$$c = \frac{(Q_2^{-1}(z_2^{(0)}(\cdot; u_1, u_2) + l_2), 1)_{L^2(D)}}{(Q_2^{-1}1, 1)_{L^2(D)}}.$$

Тоді пара $(\mathbf{z}_1(x; u), z_2(x; u))$, де $z_2(x; u) = z_2^{(0)}(x; u) + c$ – єдиний розв'язок задачі (14) – (16).

Використовуючи мішане варіаційне формулювання, еквівалентне операторним рівнянням (5), (6) і (14), (15) (див. [1], с. 42, 202, 203), доведено наступне твердження.

Лема 1. Задача знаходження мінімаксної оцінки виразу $l(\mathbf{f}, q)$ еквівалентна задачі оптимального керування системою, що описується крайовою задачею (14) – (16) з функцією вартості вигляду

$$I(u_1, u_2) =$$

$$\begin{aligned} &= (Q_1^{-1}(\mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2) + \mathbf{l}_1), \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2) + \mathbf{l}_1)_{L^2(D)^n} \\ &+ (Q_2^{-1}(z_2(\cdot; u_1, u_2) + l_2), z_2(\cdot; u_1, u_2) + l_2)_{L^2(D)} \\ &+ (\tilde{Q}_1^{-1}u_1, u_1)_{H_1} + (\tilde{Q}_2^{-1}u_2, u_2)_{H_2} \rightarrow \inf_{(u_1, u_2) \in U}. \end{aligned} \quad (17)$$

Доведення. В силу (8)–(10) имеем при $(u_1, u_2) \in U$

$$\begin{aligned} l(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{q}) - \widehat{l(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{q})} &= \int_D (\mathbf{l}_1(x), \tilde{\mathbf{f}}(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D l_2(x) \tilde{q}(x) dx \\ &\quad - (u_1, y_1(\tilde{\mathbf{v}}; \tilde{\eta}_1))_{H_1} - (u_2, y_2(\tilde{p} + \alpha; \tilde{\eta}_2))_{H_2} - c \\ &= \int_D (\mathbf{l}_1(x), \tilde{\mathbf{f}}(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D l_2(x) \tilde{q}(x) dx - (u_1, C_1 \tilde{\mathbf{v}} + \tilde{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, C_2(\tilde{p} + \alpha) + \tilde{\eta}_2)_{H_2} - c \\ &= (\mathbf{l}_1, \tilde{\mathbf{f}})_{L^2(D)^n} + (l_2, \tilde{q})_{L^2(D)} - \langle J_{H_1} u_1, C_1 \tilde{\mathbf{v}} \rangle_{H_1' \times H_1} - \langle J_{H_2} u_2, C_2(\tilde{p} + \alpha) \rangle_{H_2' \times H_2} \\ &\quad - (u_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2} - c \\ &= (\mathbf{l}_1, \tilde{\mathbf{f}})_{L^2(D)^n} + (l_2, \tilde{q})_{L^2(D)} - (C_1^t J_{H_1} u_1, \tilde{\mathbf{v}})_{L^2(D)^n} - (C_2^t J_{H_2} u_2, \tilde{p})_{L^2(D)} \\ &\quad - \alpha (C_2^t J_{H_2} u_2, 1)_{L^2(D)} - (u_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2} - c \\ &= (\mathbf{l}_1, \tilde{\mathbf{f}})_{L^2(D)^n} + (l_2, \tilde{q})_{L^2(D)} - (C_1^t J_{H_1} u_1, \tilde{\mathbf{v}})_{L^2(D)^n} \\ &\quad - (C_2^t J_{H_2} u_2, \tilde{p})_{L^2(D)} - (u_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2} - c. \end{aligned} \quad (18)$$

Тут враховано той факт, що при $(u_1, u_2) \in U$ величина $(C_2^t J_{H_2} u_2, 1)_{L^2(D)}$ в передостанньої рівності дорівнює нулю. З цієї рівності видно, що без припущення того, що $(u_1, u_2) \in U$, ліва частина (18) змінювалася б від $-\infty$ до $-\infty$ при змінюванні в цих границях числа α , тобто похибка оцінювання була б нескінченною.

Далі враховуючи, що операторні рівняння (14)–(15) і (5), (6) при $\mathbf{f} = \tilde{\mathbf{f}}$ та $q = \tilde{q}$, в силу (1)–(4), еквівалентні відповідно наступним системам варіаційних рівнянь:

$$\begin{aligned} a(\varphi_1, \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2)) + b(\varphi_1, z_2(\cdot; u_1, u_2)) \\ = -(C_1^t J_{H_1} u_1, \varphi_1)_{L^2(D)^n} \quad \forall \varphi_1 \in L^2(D)^n, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} b(\mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2), \varphi_2) &= -(C_2^t J_{H_2} u_2, \varphi_2)_{L^2(D)} \\ &\quad \forall \varphi_2 \in L^2(D). \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} a(\tilde{\mathbf{v}}, \psi_1) + b(\psi_1, \tilde{p}) &= (\tilde{\mathbf{f}}, \psi_1)_{L^2(D)^n} \\ &\quad \forall \psi_1 \in L^2(D)^n. \end{aligned} \quad (21)$$

$$b(\tilde{\mathbf{v}}, \psi_2) = (\tilde{q}, \psi_2)_{L^2(D)} \quad \forall \psi_2 \in L^2(D), \quad (22)$$

перетворимо суму третього і четвертого доданка в правій частині (18). Для цього покладемо в (19) і (20) $\varphi_1 = \tilde{\mathbf{v}}$ і $\varphi_2 = \tilde{p}$. Тоді отримаємо

$$\begin{aligned} a(\tilde{\mathbf{v}}, \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2)) + b(\tilde{\mathbf{v}}, z_2(\cdot; u_1, u_2)) \\ = -(C_1^t J_{H_1} u_1, \tilde{\mathbf{v}})_{L^2(D)^n}. \end{aligned} \quad (23)$$

$$b(\mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2), \tilde{p}) = -(C_2^t J_{H_2} u_2, \tilde{p})_{L^2(D)}. \quad (24)$$

З іншого боку, покладаючи в (21) і (22) $\psi_1 = \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2)$ та $\psi_2 = z_2(\cdot; u_1, u_2)$, знаходимо

$$\begin{aligned} a(\tilde{\mathbf{v}}, \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2)) + b(\mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2), \tilde{p}) \\ = (\tilde{\mathbf{f}}, \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2))_{L^2(D)^n}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$b(\tilde{\mathbf{v}}, z_2(\cdot; u_1, u_2)) = (\tilde{q}, z_2(\cdot; u_1, u_2))_{L^2(D)}. \quad (26)$$

З (23)–(26) одержуємо

$$\begin{aligned} &-(C_1^t J_{H_1} u_1, \tilde{\mathbf{v}})_{L^2(D)^n} - (C_2^t J_{H_2} u_2, \tilde{p})_{L^2(D)} \\ &= a(\tilde{\mathbf{v}}, \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2)) + b(\tilde{\mathbf{v}}, z_2(\cdot; u_1, u_2)) \\ &+ b(\mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2), \tilde{p}) = (\tilde{\mathbf{f}}, \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2))_{L^2(D)^n} \\ &+ (\tilde{q}, z_2(\cdot; u_1, u_2))_{L^2(D)}. \end{aligned}$$

Звідси і з (18) випливає, що

$$\begin{aligned} l(\hat{\mathbf{f}}, \hat{q}) - \widehat{l(\hat{\mathbf{f}}, \hat{q})} &= (\mathbf{I}_1 + \mathbf{z}_1(\cdot; u_1, u_2), \hat{\mathbf{f}})_{L^2(D)^n} \\ &+ (l_2 + z_2(\cdot; u_1, u_2), \hat{q})_{L^2(D)} - (u_1, \hat{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, \hat{\eta}_2)_{H_2} - c. \end{aligned}$$

З останньої рівності і з (7)–(11), використовуючи нерівність Коши-Буняковського, а також співвідношення $\mathbb{D}\xi = \mathbb{E}|\xi - \mathbb{E}\xi|^2 = \mathbb{E}\xi^2 - (\mathbb{E}\xi)^2$ між дисперсією $\mathbb{D}\xi$ випадкової величини ξ і її математичним сподіванням $\mathbb{E}\xi$, знаходимо

$$\inf_{c \in \mathbb{R}} \sigma(u_1, u_2, c) = I(u_1, u_2),$$

при $c = \int_D (\mathbf{z}_1(x; u_1, u_2) + \mathbf{I}_1(x), \mathbf{f}_0(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D (z_2(x; u_1, u_2) + l_1(x)) q_0(x) dx$, а $I(u_1, u_2)$ визначається виразом (17). Лема доведена.

В результаті розв'язання задачі оптимального керування (14)–(17) приходимо до наступного результату.

Теорема 1. Існує єдина мінімаксна оцінка значення $l(\mathbf{f}, q)$, яка має вигляд

$$\begin{aligned} \widehat{l(\mathbf{f}, q)} &= (y_1(\mathbf{v}; \eta_1), \bar{u}_1)_{H_1} + (y_2(p; \eta_2), \bar{u}_2)_{H_2} + \bar{c} \\ \text{де } \bar{c} &= \int_D (\bar{\mathbf{z}}_1(x) + \mathbf{I}_1(x), \mathbf{f}_0(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D (\bar{z}_2(x) + l_1(x)) q_0(x) dx, \quad \bar{u}_1 = \bar{Q}_1 C_1 \bar{\mathbf{p}}_1, \quad \bar{u}_2 = \bar{Q}_2 C_2 \bar{p}_2, \text{ а} \\ \text{функції } \bar{\mathbf{z}}_1, \bar{\mathbf{p}}_1 &\in H_0^1(D)^n \text{ та } \bar{z}_2, \bar{p}_2 \in L^2(D) \text{ зна-} \\ \text{ходяться із розв'язку наступної системи варіа-} \\ \text{ційних рівнянь:} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a(\varphi_1, \bar{\mathbf{z}}_1) &= b(\varphi_1, \bar{z}_2) \\ &= -(C_1^t J_{H_1} \bar{Q}_1 C_1 \bar{\mathbf{p}}_1, \varphi_1)_{L^2(D)^n} \quad \forall \varphi_1 \in L^2(D)^n. \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} a(\varphi_1, \bar{\mathbf{p}}_1(\cdot, \omega)) &= b(\varphi_1, p_2(\cdot, \omega)) \\ &= -(C_1^t J_{H_1} \bar{Q}_1 (y_1(\mathbf{v}, \eta_1(\omega)) - C_1 \bar{\mathbf{v}}(\cdot, \omega)), \varphi_1)_{H^{-1}(D)^n \times H_0^1(D)^n} \quad \forall \varphi_1 \in H_0^1(D)^n, \end{aligned} \quad (33)$$

$$b(\bar{\mathbf{p}}_1(\cdot, \omega), \varphi_2) = (C_2^t J_{H_2} \bar{Q}_2 (y_2(p, \eta_2(\omega)) - C_2 \bar{p}(\cdot, \omega)), \varphi_2)_{L^2(D)} \quad \forall \varphi_2 \in L^2(D), \quad (34)$$

$$(\bar{Q}_2^{-1} \bar{p}_2(\cdot, \omega), 1)_{L^2(D)} = 0, \quad (35)$$

$$a(\bar{\mathbf{v}}(\cdot, \omega), \psi_1) = (C_1 \bar{\mathbf{p}}_1(\cdot, \omega) + f_1^{(0)}, \psi_1)_{H^{-1}(D)^n \times H_0^1(D)^n} \quad \forall \psi_1 \in H_0^1(D)^n, \quad (36)$$

$$b(\bar{\mathbf{v}}(\cdot, \omega), \psi_2) = (\bar{Q}_2 p_2(\cdot, \omega) + f_2^{(0)}, \psi_2)_{L^2(D)} \quad \forall \psi_2 \in L^2(D), \quad (37)$$

$$(C_2^t J_{H_2} \bar{Q}_2 (y_2(p, \eta_2(\omega)) - C_2 \bar{p}(\cdot, \omega)), 1)_{L^2(D)} = 0, \quad (38)$$

а якби рівності (33)–(38) виконуються з ймовірністю 1. Задача (33)–(38) має єдиний розв'язок.

Наслідок 1. Пара $(\hat{\mathbf{f}}, \hat{q})$ може бути взята в якості доброї оцінки невідомих правих частин $(\mathbf{f}, q)$ рівнянь (5)–(6).

Висновки. Одержані результати можуть бути використані при розв'язанні ряду обернених задач механіки рідини.

$$\begin{aligned} b(\bar{\mathbf{z}}_1, \varphi_2) &= -(C_2^t J_{H_2} \bar{Q}_2 C_2 \bar{p}_2, \varphi_2)_{L^2(D)} \\ &\quad \forall \varphi_2 \in L^2(D), \end{aligned} \quad (28)$$

$$(\bar{Q}_2^{-1} (\bar{z}_2 + l_2), 1)_{L^2(D)} = 0, \quad (29)$$

$$\begin{aligned} a(\bar{\mathbf{p}}_1, \psi_1) &+ b(\psi_1, \bar{p}_2) \\ &= (\bar{Q}_1 (\bar{\mathbf{z}}_1 + \mathbf{I}_1), \psi_1)_{L^2(D)^n} \quad \forall \psi_1 \in L^2(D)^n, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} b(\bar{\mathbf{p}}_1, \psi_2) &= (\bar{Q}_2 (\bar{z}_2 + l_2), \psi_2)_{L^2(D)} \\ &\quad \forall \psi_2 \in L^2(D), \end{aligned} \quad (31)$$

$$(C_2^t J_{H_2} \bar{Q}_2 C_2 \bar{p}_2, 1)_{L^2(D)} = 0. \quad (32)$$

Задача (27)–(32) однозначно розв'язна. Помилка мінімаксного оцінювання $r(\mathbf{f}, q)$ задовольняє нерівність

$$r(\mathbf{f}, q) \leq \sigma(u_1, u_2, c) = l(Q_1^{-1}(\mathbf{I}_1 + \mathbf{z}_1), Q_2^{-1}(l_2 + z_2))^{1/2}.$$

Використовуючи теорему 1, одержано представлення для мінімаксної оцінки виразу (9), що не залежить від конкретного вигляду функціонала l .

Теорема 2. Мінімаксна оцінка виразу $l(\mathbf{f}, q)$ має вигляд $\widehat{l(\mathbf{f}, q)} = l(\hat{\mathbf{f}}, \hat{q})$, де $\hat{\mathbf{f}} = Q_1^{-1} \bar{\mathbf{p}}_1$, $\hat{q} = Q_2^{-1} \bar{p}_2$ а випадкові елементи $\bar{\mathbf{p}}_1 \in L^2(\Omega, H_0^1(D)^n)$ и $\bar{p}_2 \in L^2(\Omega, L^2(D))$ знаходяться із розв'язку наступної системи варіаційних рівнянь:

Список використаних джерел

- [1] F. Brezzi, M. Fortin Mixed and hybrid finite element methods. – Springer-Verlag, New York, 1991 – 350 p.

Надійшла до редакції 29.08.06

УДК 519.8

Горбачук В.М., к.ф.-м.н., с.н.с., Гаркуша* Н.І.,
к.е.н.

Рівноважні змішані стратегії кооперації та узагальненого лідерства дуополії

У класичному парадоксі вибору між
кооперацією та конкуренцією запропоновано
стратегію узагальненого лідерства за
Штакельбергом. Показано, що при деяких
значеннях параметра узагальненого лідерства
оптимальна ймовірність кооперації ненульова.

Ключові слова: змішана стратегія, дуополія,
узагальнене лідерство, конкуренція, кооперація,
рівновага, Курно, Неш, Штакельберг.

V. M. Gorbachuk, Ph.D. (Physics and
Mathematics), N.I. Garkusha*, Ph.D. (Economics)

Equilibrium mixed strategies of cooperation and generalized leadership of duopoly

The strategy of generalized Stackelberg
leadership is suggested in the classical paradox of
choice between cooperation and competition. It is
shown that the optimal probability of cooperation is
nonzero under some values of parameter of
generalized leadership.

Key words: mixed strategy, duopoly, generalized
leadership, competition, cooperation, equilibrium,
Cournot, Nash, Stackelberg.

*E-mail: GorbachukWasy1@netscape.net, NGarkusha@unicyb.kiev.ua

Високотехнологічні галузі, що розробляють і
випускають нові продукти чи надають нові
послуги, характеризуються невеликою кількістю
фірм, здатних виробляти подібні продукти або
послуги [9, 11, 13–15]. Ринкам нових продуктів
або послуг притаманна невизначеність попиту чи
випуску [6–8, 10], а також невизначеність
поведінки фірм-виробників. Фірма може
кооперуватися чи конкурувати з іншою фірмою,
бути лідером або послідовником відносно іншої
фірми [1–3]. При цьому будь-яка конкретна
фірма не впевнена в тому, який саме спосіб
поведінки вибирає інша фірма. Водночас, як буде
показано в даній роботі, кожна фірма може
виробити раціональну лінію своєї поведінки.

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

$$Q = q_1 + q_2. \quad (2)$$

У симетричній дуополії

$$c = c_1 = c_2. \quad (3)$$

Якщо обидві фірми кооперуються, щоб
досягнути максимального сумарного прибутку й
розділити його порівну, то ринковий випуск
рівний монопольному $Q^m = 2q^m$.

Теорема 1. За умов (1)–(3),

$$a > c, \quad (4)$$

монопольний випуск рівний

$$Q^m = (a - c)/(2b), \quad (5)$$

а випуск фірми при кооперації становить

$$q^m = (a - c)/(4b). \quad (6)$$

Монополія максимізує по q_1 , q_2 сумарний
прибуток фірм

$$\begin{aligned} \Pi &= (P - c)q_1 + (P - c)q_2 = (P - c)(q_1 + q_2) = \\ &= (a - c)(q_1 + q_2) - b(q_1 + q_2)^2. \end{aligned}$$

звідки

$$0 = \partial \Pi / \partial q_1 = a + 2b(q_1 + q_2) - c = \partial \Pi / \partial q_2,$$

що й треба було довести.

Зазначимо, що випуск q^c фірми за
конкуренції [12] перевищує випуск фірми при
кооперації:

$$q^c = (a - c)/(3b) > (a - c)/(4b) = q^m \quad (7)$$

В силу нерівності (4) ринкова ціна P^m за кооперації вища ринкової ціни за конкуренції [12]:

$$P^m = a - bQ^m = a - (a - c)/2 = (a + c)/2 > (a + 2c)/3 = P^c$$

Теорема 2. Прибуток фірми за кооперації перевищує прибуток фірми за конкуренції.

Дійсно,

$$\pi^m = (P^m - c)q^m = [(a + c)/2 - c](a - c)/(4b) = (a - c)^2/(8b) > (a - c)^2/(9b) = \pi^c \quad (8)$$

Теорема 3. Якщо фірма 1 обирає випуск $q_1 = q^m$, а фірма 2 обирає випуск $q_2 = q^c$, то ринковий випуск рівний

$$P^{mc} = a - bQ^{mc} = a - 7(a - c)/12 = (5a + 7c)/12 \in (P^c, P^m),$$

прибуток фірми 2 рівний

$$\pi^{cm} = (P^{mc} - c)q^m = [5(a - c)/12](a - c)/(3b) = 5(a - c)^2/(36b) > \pi^m \quad (9)$$

а прибуток фірми 1 –

$$\pi^{mc} = (P^{mc} - c)q^m = [5(a - c)/12](a - c)/(4b) = 5(a - c)^2/(48b) < \pi^c \quad (10)$$

Співвідношення (9), (10) свідчать, що фірмі i не вигідно вибирати випуск q^m , коли фірма $j \neq i$ обрала випуск q^c , $i, j = 1, 2$. Іншими словами, у чистих стратегіях фірмам не вигідно кооперуватися. Покажемо, що фірмам не вигідно кооперуватися і в традиційних змішаних стратегіях.

Припустимо, у кожної фірми $i = 1, 2$ є змішана стратегія:

кооперація та незалежний (від фірми $j = 1, 2$, $j \neq i$) вибір випуску q^m з імовірністю $p_i = p$;

конкуренція та незалежний вибір випуску q^c з імовірністю $(1 - p_i) = (1 - p)$.

Співвідношення (9), (10) говорять, що задача вибору змішаної стратегії конкуренції та кооперації зводиться до класичної задачі, що має назву дилеми ув'язненого [4]. Знайдемо

розв'язок цієї задачі для симетричної дуополії, де кожна фірма $i = 1, 2$ максимізує по p_i свій сподіваний прибуток ($j = 1, 2$, $j \neq i$)

$$\begin{aligned} E(\pi_i) &= (a - c)\bar{q}_i - b\bar{q}_i\bar{q}_j - bE[(q_i)^2] = \\ &= (a - c)[p_i q^m + (1 - p_i)q^c] - \\ &- b[p_i q^m + (1 - p_i)q^c][p_i q^m + (1 - p_i)q^c] - \\ &- b[p_i (q^m)^2 + (1 - p_i)(q^c)^2] \quad (11) \end{aligned}$$

Теорема 4. В оптимальній (optimal) змішаній стратегії фірми

$$p^o = 0, \quad (12)$$

тобто в оптимальній змішаній стратегії фірма з імовірністю 1 обирає чисту стратегію конкуренції – випуск q^c .

Передусім, з рівняння (11)

$$\begin{aligned} \partial E(\pi_i) / \partial p_i &= (a - c)(q^m - q^c) - \\ &- b[p_i q^m + (1 - p_i)q^c](q^m - q^c) - \\ &- b[(q^m)^2 - (q^c)^2] = \\ &= (q^m - q^c)[a - c - b\bar{q}_j - b(q^m + q^c)] \end{aligned}$$

Оцінимо знак множника, враховуючи рівності (6) і (7):

$$\begin{aligned} a - c - b\bar{q}_j - b(q^m + q^c) &\geq \\ &\geq a - c - 2bq^c - bq^m > 0. \quad (13) \end{aligned}$$

Тоді в силу співвідношення (7) отримуємо

$$\partial E(\pi_i) / \partial p_i < 0.$$

В силу $p_i \in [0, 1]$ приходимо до рівності (12)

Отже, у даних змішаних стратегіях симетричним фірмам також не вигідно кооперуватися. Водночас поведінкова різноманітність сприяє кооперації та співробітництву [5]. Розглянемо теорему 4 із загальнішого погляду.

Теорема 5. Припустимо, у кожної фірми i є змішана стратегія:

незалежний вибір низького (low) випуску L з імовірністю $p_i = p$.

незалежний вибір високого (high) випуску
 $H > L$ з імовірністю $(1 - p_i) = (1 - p)$.

Якщо

$$2H + L < (a - c)/b, \quad (14)$$

то в оптимальній змішаній стратегії кожної фірми $p^o = 0$.

Сподіваний прибуток фірми i рівний

$$\begin{aligned} E(\pi_i) &= (a - c)\bar{q}_i - b\bar{q}_i\bar{q}_j - bE[(q_i)^2] = \\ &= (a - c)[p_iL + (1 - p_i)H] - \\ &- b[p_iL + (1 - p_i)H][p_iL + (1 - p_i)H] - \\ &- b[p_iL^2 + (1 - p_i)H^2]. \end{aligned}$$

Далі,

$$\begin{aligned} 0 &= \partial E(\pi_i) / \partial p_i = (a - c)(L - H) - \\ &- b(L - H)\bar{q}_j - b(L^2 - H^2) = \\ &= (L - H)(a - c - b\bar{q}_j - bL - bH). \end{aligned}$$

Внаслідок умови (14), використовуючи нерівність, аналогічну нерівності (13), приходимо до твердження теореми 5.

Розглянемо випадок, коли фірма вибирає стратегію узагальненого лідера за Штакельбергом [12]

$$q_1^{GI} = \gamma(a - c)/b, \quad \gamma \in [1/3, 1/2].$$

Теорема 6. Якщо фірма 2 обрала стратегію кооперації

$$q_2 = q^m = (a - c)/(4b), \quad (15)$$

то фірма 1 при виборі стратегії конкуренції

$$q_1 = q^c = (a - c)/(3b)$$

отримує прибуток, не більший ніж за вибору узагальненої стратегії лідера

$$q_1^{GI} = \gamma(a - c)/b, \quad \gamma \in [1/3, 5/12] \subset [1/3, 1/2]. \quad (16)$$

При виборі стратегій (15) і (16) ринковий випуск рівний

$$\begin{aligned} Q^{Gm} &= q^m + q_1^{GI} = (a - c)/(4b) + \gamma(a - c)/b = \\ &= (a - c)(1 + 4\gamma)/(4b), \end{aligned}$$

ринкова ціна становить

$$\begin{aligned} P^{Gm} &= a - bQ^{Gm} = a - (a - c)(1 + 4\gamma)/4 = \\ &= (4a - a - 4a\gamma + c + 4c\gamma)/4 = \\ &= [3a - c - 4\gamma(a - c)]/4. \end{aligned}$$

прибуток фірми 1 рівний

$$\begin{aligned} \pi^{Gm} &= (P^{Gm} - c)q_1^{GI} = \\ &= \{[3a + c - 4\gamma(a - c)]/4 - c\}\gamma(a - c)/b = \\ &= (a - c)^2(3 - 4\gamma)\gamma/(4b). \end{aligned}$$

Враховуючи співвідношення (9), залишається показати нерівність

$$(a - c)^2(3 - 4\gamma)\gamma/(4b) \geq 5(a - c)^2/36,$$

яка забезпечується умовою $\gamma \in [1/3, 5/12]$ із співвідношення (16).

Теорема 6 дозволяє розглядати стратегію конкуренції як окремий випадок стратегії узагальненого лідерства й говорить про раціональність можливого вибору стратегії узагальненого лідерства за Штакельбергом при $\gamma \in [1/3, 5/12]$. Стратегію узагальненого лідерства можна вважати стратегією вибору високого випуску

$$H = \gamma(a - c)/b, \quad \gamma \in [1/3, 5/12]$$

з теореми 5.

Теорема 7. При виборі стратегій (15) і (16), що відповідають L і H , за умови

$$\gamma \in [1/3, 3/8] \subset [1/3, 5/12] \quad (17)$$

в оптимальній змішаній стратегії $p^o = 0$.

Тут

$$\begin{aligned} 2H + L &= 2q^{GI} + q^m = 2\gamma(a - c)/b + (a - c)/(4b) = \\ &= (a - c)(1 + 8\gamma)/(4b). \end{aligned}$$

Тому нерівність (14) теореми 5 задовольняється при умові (17).

Узагальнені стратегії лідерства, що описуються теоремою 7, по суті, узагальнюють відому стратегію конкуренції Курно-Неша. Узагальнені стратегії лідерства розширюють можливості ОПР для конкуренції, призводячи до тієї самої оптимальної змішаної стратегії. Особливий інтерес має випадок $\lambda \in [3/8, 5/12]$,

для якого можна припустити $p'' > 0$ в оптимальній змішаній стратегії: різноманітність стратегій ОПР сприяє розвитку їх співробітництва [5], але не виключає імовірність їх конкуренції.

Теорема 8. При виборі стратегій (15) і (16), що відповідають L і H за умови

$$\gamma \in (3/8, 5/12] \quad (18)$$

в оптимальній змішаній стратегії $p'' = 1/2$.

Список використаних джерел

1. Фон Нейман Дж., Моргенштерн О. Теория игр и экономическое поведение. – М.: Наука, 1970. – 707 с.
2. Жуковский В.И., Чикрий А.А. Линейно-квадратичные дифференциальные игры. – К.: Наук.думка, 1994. – 320 с.
3. Горбачук В.М. Финансові рішення. – К.: Альтерпрес, 2003. – 176 с.
4. Smale S. The prisoner's dilemma and dynamical systems associated to noncooperative games // *Econometrica*. – 1980, November. – P. 1617–1634.
5. McNamara J.B., Barta Z., Houston A.I. Variation in behaviour promotes cooperation in the Prisoner's Dilemma game // *Nature*. – 2004, April 15. – P. 745–748.
6. Горбачук В.М. Поиск равновесий Нэша в условиях нестационарности негладких функций выигрыша // Математические методы анализа и оптимизации сложных систем, функционирующих условиях неопределенности. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1986. – С. 8–12.
7. Горбачук В.М. Устойчивость решений стохастических экстремальных задач // Математические методы анализа сложных стохастических систем. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1988. – С. 41–45.
8. Горбачук В.М. О рациональном поведении в одной стохастической модели рынка // Математические методы принятия решений в условиях неопределенности. –

Має місце нерівність

$$\begin{aligned} \partial E(\pi_i) / \partial p_i &= (L - H)(a - c) \times \\ &\times [3 - 8\gamma + p_i(4\gamma - 1)] / 4 > 0, \end{aligned}$$

якщо $p_i > (8\gamma - 3)/(4\gamma - 1) > 0$. Враховуючи умову (18), отримуємо $p'' = 1/2$.

К.: Ін-т кибернетики ім. В.М.Глушкова АН України, 1990. – С. 33–37.

9. Игнатенко А.П., Чикрий А.А. Задача об убегании двух управляемых объектов от группы преследователей в трехмерном пространстве // Проблемы управления и информатики. – 2002. – № 1. – С. 5–31.
10. Горбачук В.М., Ненахова С.Г. Поведінка конкурентної фірми за невизначеності // Теорія оптимальних рішень. – 2004. – № 3. – С. 74–80.
11. Гончар Н.С., Жохин А.С., Махорт А.Ф. Теория экономических трансформаций // Проблемы управления и информатики. – 2004. – № 2. – С. 107–127.
12. Горбачук В.М. Обобщенное равновесие Курно–Штакельберга–Нэша // Кибернетика и системный анализ. – 2006. – № 1. – С. 3–9.
13. Горбачук В.М. К решению задачи транзита ресурса // Компьютерная математика. – 2006. – № 3. – С. 141–148.
14. 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.
15. Горбачук В.М. Метод розв'язання задачі обчислення плати за транзит ресурсу // Праці III-ї міжнародної школи-семинару "Теорія прийняття рішень" – Ужгород: УжНУ, 2006. – С. 40–41.

Надійшла до редколегії 15.05.07

УДК 330.51:336.748.12

Горіцина І. А.^{*}, канд.ек.наук,
Годовніков М.В.

Аналіз методів визначення базової інфляції

Розглядаються концепція визначення базової інфляції, статистичні методи її оцінки та їх порівняльний аналіз.

Ключові слова: індекс споживчих цін, базова інфляція, оцінювання

^{*}E-mail: goritsyna@unicyb.kiev.ua,

Починаючи з кінця 1970-х років стримування інфляції стало однією з найважливіших проблем для багатьох країн. Політика таргетування інфляції у більшості випадків полягає у досягненні певного рівня річного приросту індексу споживчих цін (ІСЦ). Цей показник є досить поширеним, а його динаміка прозора і зрозуміла. Однак, фахівці вважають, що ІСЦ є досить недосконалим показником для відображення „тренду” зміни інфляції, особливо якщо він вимірюється за короткі періоди: помісячно або поквартально. Місячні та квартальні дані є дуже нестабільними, залежать від сезонних коливань та містять багато шумів. А монетарна влада потребує чіткіших орієнтирів, які сприятимуть формуванню політики, спрямованої на досягнення запланованого рівня інфляції. Найважливішим завданням у короткострокові періоди є визначення стійкої тенденції руху цін з відокремленням тимчасових коливань.

Отже, ідеальний вимір базової інфляції має враховувати довготермінову тенденцію зміни рівня цін, яка відображатиме стан попиту в економіці, усуваючи різні одномоментні шоки з боку пропозиції. Ідея вилучення всіх шоків, що не викликані змінами попиту, походить від поширеної в економіці точки зору, відповідно до якої основним методом монетарної політики є вплив на економіку через вплив на попит¹. Таким чином, монетарна влада відповідає лише за інфляцію, яка є наслідком такого тиску. Обґрунтованість цієї думки підтверджує часто вживаний наочний приклад поганого врожаю, що викликаний несприятливими погодними умовами. Зростання цін на продукцію сільського господарства внаслідок зменшення пропозиції природно призводить до зростання цін на продукти харчування. Таким чином і ІСЦ

I.A. Goritsyna, Ph.D, M.V. Godovnikov

The Analysis of Methods of Core Inflation Estimation

Conception issues of core inflation, statistical methods of core inflation estimation and their analyse are given.

Key Words: consumer prices index, core inflation, estimation.

збільшується на деякий час. Якщо монетарна політика негайно відреагує на ці зміни, то це може підсилити коливання ІСЦ. Таку політику навряд чи можна вважати правильною, оскільки в цьому випадку зростання інфляції не є ознакою нового тренду зростання, а відображає лише тимчасові зміни відносних цін.

В Україні через нестабільність ІСЦ складно вилучити тимчасові короткотривалі коливання та точно передбачити тенденцію розвитку інфляції. Визначення базової² інфляції може потенційно вирішити цю проблему. Цей показник дає владі більш стабільну та надійну оцінку інфляції, що сприятиме прийняттю більш виважених рішень.

Через відсутність широко визнаного теоретичного визначення базової інфляції, методи її обчислення почали поширюватись лише протягом двох останніх десятиліть. Кожен з нових методів розширював „параметризацію” і завдяки великій кількості значень цих параметрів чисельність показників базової інфляції є досить значною. Оскільки різні динамічні ряди, що відображають коливання цін, підбираються на основі різних критеріїв, необхідно знайти статистичний метод, який чітко і ефективно відображатиме зміни базової ціни.

Статистичні методи визначення базової інфляції ґрунтуються на концепції виділення тенденції шляхом зменшення шуму. Найбільш вживані методи поділяють на три групи: метод простого виключення, усічені середні, дисперсійно-зважені середні.

Метод простого виключення полягає у виключенні певних категорій товарів та послуг з індексу цін. До них, як правило, відносять частково або повністю продовольчі товари та енергоносії. Ці елементи вилучаються при обчисленні базової інфляції, оскільки зміни в цінах на них у більшості випадків викликані

¹ Від англійського слова *target* – ціль, мета

² Від англійського слова *core* – центр, ядро, суть

Застосування такої системи ваг забезпечує те, що кожен компонент індексу споживчих цін отримує вагу, пропорційну якості і силі інфляційного сигналу інфляції, який він містить. Таким чином вплив нестабільних елементів на ІСЦ знижується, а для стабільних елементів – посилюється. Остаточним результатом є показник базової інфляції, що відображає тренд інфляції набагато точніше, ніж індекс споживчих цін, який містить багато шумів спричинених нестабільними елементами.

Методи, основані на простому виключенні, зручні за своєю чіткістю, простотою та пропонують привабливу альтернативу традиційному розрахунку індексу споживчих цін. Їх широке використання як показників тенденції інфляції викликає, однак, декілька суттєвих заперечень. Зважаючи на те, що ідеальний показник базової інфляції має використовувати всю наявну інформацію про довготривалу тенденцію інфляції, чи завжди виключення цін на продукти харчування та електроенергію є виправданим? Чи в всіх випадках зміни цих цін не містять жодної „корисної” інформації? Звичайно, що ні, і цілком логічно спробувати створити такий вимірник інфляції, який гнучкіше використовуватиме корисну інформацію про ціни без автоматичного виключення певних категорій. Усічені середні та дисперсійно-зважені середні відповідають умовам ефективного використання наявної інформації щодо цін і меншою мірою спираються на суб’єктивні судження.

Процес оцінки різних „альтернативних” показників базової інфляції проводиться за допомогою трьох критеріїв, що найчастіше зустрічаються в літературі:

- Критерій незміщеності, „тяжіння до тренду”⁵ та екзогенності – *UAE*-критерій.
- Критерій мінімального відхилення від тренду – *DT*-критерій.
- Критерій стабільності – *ST*-критерій.

Комплексний *UAE*-критерій був вперше запропонований Фріманом (1998), а потім розширений групою економістів Центрального банку Португалії. Умови, що покладені в основу цього критерію містять три властивості, яким має відповідати будь-яка якісна оцінка базової інфляції:

- дані по базовій інфляції мають бути незміщеними щодо індексу споживчих цін;
- ІСЦ повинен коливатись навколо базової інфляції, тобто базова інфляція має „притягувати” індекс споживчих цін;

- базова інфляція має бути (сильно) екзогенною по відношенню до індексу споживчих цін.

Ці властивості було формалізовано в сукупність з трьох умов:

1. *Незміщеність*: π^f (базова інфляція) та π (інфляція ІСЦ) є коінтегрованими з одиничними коефіцієнтами, тобто $(\pi^f - \pi)$ – стаціонарна і коефіцієнт α в регресії $\pi_t = \alpha + \beta * \pi_t^f + u_t$ є статистично незначущим.

2. „Тяжіння до тренду”: Існує представлення коригування помилки (error correction representation) для π за допомогою $(\pi_{t-1}^f - \pi_{t-1})$, тобто $\gamma \neq 0$ у рівнянні:

$$\Delta \pi_t = \sum_{j=1}^n \alpha_j \Delta \pi_{t-j} + \sum_{j=1}^m \beta_j \Delta \pi_{t-j}^f + \gamma (\pi_{t-1}^f - \pi_{t-1}) + \varepsilon_t$$

3. *Екзогенність*: π^f має бути слабо (сильно) екзогенним по відношенню до π , тобто λ (так само як θ_j) повинні дорівнювати нулю у рівнянні:

$$\Delta \pi_t^f = \sum_{j=1}^s \delta_j \Delta \pi_{t-j}^f + \sum_{j=1}^s \theta_j \Delta \pi_{t-j} + \lambda (\pi_{t-1}^f - \pi_{t-1}) + \eta_t$$

Різновиди цього критерію можуть відрізняються ступінню врахування кожної з трьох умов. Основна версія передбачає, що показник базової інфляції підпадає під цей критерій за умови виконання всіх трьох умов. Тому критерій має дискретний (нуль – один) характер: дані або підходять (1), або не підходять (0). Ця версія вважається стандартною версією *UAE* критерію (*UAES*).

DT-критерій був сформульований Cecchetti (1996) та найбільш широко використовувався у літературі щодо базової інфляції. Він оснований на мінімізації відхилень від тренду інфляції. При оцінці даних по базовій інфляції з використанням цього критерію найважливішими є два припущення. По-перше, потрібно визначити трендові дані, а, по-друге, функцію, яку потрібно мінімізувати. Трендові дані було умовно визначено як центральну рухому середню ІСЦ, у той час як функція відхилення зазвичай визначається як корінь з середнього значення квадратів похибок (*RMSE*) або середня абсолютного відхилення (*MAD*)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i)^2}; \quad MAD = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |(x_i)|.$$

⁵ Від англійського слова *attractive* – що тяжіє

де x_t – відхилення базової інфляції від визначеного тренду.

Критерій стабільності (*ST*) впливає з основного постулату, що базова інфляція має характеризуватись меншою волатильністю, ніж ІСЦ. Із сукупності „альтернативних” показників базової інфляції найбільш стабільні є водночас і найбільш привабливими для фахівців.

Будемо використовувати два інтуїтивно найзрозуміліші виміри стабільності: стандартне відхилення рівнів та перших різниць даних по базовій інфляції. Кожен з трьох критеріїв незалежно оцінює сукупність показників базової інфляції шляхом надання значень з проміжку $[0;1]$ у випадку *UAE*-критерію або $(0;1]$ у випадку *DT* та *ST* критеріїв. Кінцевий вибір ґрунтується на виборі з суми трьох критеріїв, які надають кожному індикатору значення з проміжку $(0;3]$ та відповідно впорядковують всю сукупність.

Сучасні тенденції розвитку аналізу динамічних рядів великої розмірності. Сьогодні задачі моделювання й прогнозування поведінки систем, що належать до галузі економіки, давно обговорюються на міждисциплінарному рівні. Дослідники все частіше намагаються застосувати методи з галузей фізики й математики для вивчення динамічних рядів великої розмірності (поведінки міжнародних фінансових ринків, різноманітних економічних показників, зрозуміти динаміку цінних рухів).

Ці методи рахуються корисними при аналізі динамічних рядів, коли вони зрозумілі і дають «хороші» результати. На сьогодні існує величезна кількість методів для проведення аналізу поведінки динамічних рядів, кожний з яких має свої «плюси» й недоліки. Наведемо деякі методи, за якими ведуться наукові дослідження аналізу динамічних рядів.

Метод головних компонент (PCA - Principal Component Analysis) – один з сучасних методів, що виділяється простою логічною конструкцією й розумінням, загальною ідеєю й цілями методів факторного аналізу.

Метод дає можливість зменшити розмірність вхідного потоку даних без суттєвої втрати інформації, тобто відкинути так звані «шуми» з динамічного ряду. Для вирішення цього питання треба скористатися одним з критеріїв: критерієм Кайзера (Kaiser) або критерієм “кам’янистого осипу” Кеттелла (Cattell), які в більшості випадків дозволяють раціонально вибрати число компонент. Критерій Кайзера іноді зберігає занадто багато факторів, у той час як критерій

кам’янистого осипу іноді зберігає занадто мало факторів; однак обидва критерії дають гарні результати, коли є відносно невелике число компонент і багато змінних. На практиці приймається той критерій для якого отримане число компонент може бути змістовно інтерпретоване. Тому звичайно досліджується декілька розв’язків із більшим або меншим числом компонент, і потім обирається одне найбільше “підходяще”.

Метод «Опорних Векторів» (SVM - Support Vector Machines). Недоліком більшості методів, є припущення про лінійність моделі часового ряду, що досліджується. Для забезпечення можливості моделювання нелінійних зв’язків у часових рядах при досить малому об’ємі апіорної інформації, є досить ефективні методи, які базуються на ядерних методах (Kernel Methods). Метод «опорних векторів» дозволяє оцінити параметри модельного ряду у вигляді лінійної комбінації ядерних функцій радіально-базисного вигляду.

SVM – це клас алгоритмів, в яких присутня теорія статистичного навчання з різними способами оптимізації й ідеєю відображень, побудованих на ядрах. Розв’язки мають декілька цікавих статистичних властивостей, які дозволяють припустити його гарну властивість до узагальнення. Одна з основних таких властивостей – незалежність розв’язку (з максимальним допуском) від розмірності простору, у якому проводять розділення. Таким чином, можна працювати в просторах з великою розмірністю, наприклад породжених ядрами, без проблеми занадто сильного наближення навчальної вибірки (overfitting).

Список використаних джерел

1. Wozniak P. Inflacja bazowa.-Warszawa, CASE, 2002.- 162 с.
2. Kapetanios G. Factor Analysis using subspace factor models: Some Theoretical results and an Application for UK inflation forecasting.- Working paper no 446,-Queen Mary University of London.
3. Stock J, Watson M. Forecasting Using Principal Components from a Large Number of Predictors.-Journal of the American Statistical Association, 97.

Надійшла до редколегії 03.04.07

УДК 004.4

Горностай М.П. *, аспірантка

Gornostay M.P. *, post graduate student

Про застосування кластерного аналізу до побудови інформаційних систем, здатних навчатися

About cluster analysis usage in development of information systems which are able to learn

У статті досліджуються методи, що дозволяють розробити інформаційну систему, здатну навчатися, базуючись на зібраних статистичних даних про користувачів системи та їх поведінку. Запропоновані алгоритми для забезпечення цих методів. Результат роботи вказаних алгоритмів та методів є динамічна персоніфікація даних (і сторінок) для користувача.

The article is about investigation of methods which allow developing of information system which is able to learn based on gathered statistic data about system's users and their behavior. Author proposes algorithms for the above methods ensuring. Result of these algorithms' and methods' execution is dynamic data (and pages) personification for the user.

Ключові слова: кластерний аналіз, персоніфікація, дані, операції, інформаційні системи, здатні навчатися.

Key Words: cluster analysis, personification, data, transactions, information systems able to learn.

*E-mail: margo@univ.kiev.ua

1. Персоналізація як невід'ємна риса сучасного Інтернету

Під інформаційною системою розуміється інтегрована система, що здатна забезпечувати користувача певною тематичною інформацією та містить цю інформацію у своїх модулях. Як приклад інформаційної системи можна розглянути інтегровану систему, що складається з модулів електронного навчання, обліку успішності студентів та системи електронного портфоліо.

Можливість персоніфікувати навчальні курси та їх масовість сприяли зростанню популярності систем електронного навчання. Глобальна інформатизація та становлення Інтернету масовим явищем сприяли інтеграції різних електронних систем з метою максимізації зручності для користувача.

Персоналізація всесвітньої мережі перетворилась із корисної риси у необхідність. Персоналізація впливає на вигляд сторінок через вказування користувачем його переваг. Дане вказування може бути отримане шляхом вибору у меню – тобто явно, або неявно – через спостереження за поведінкою користувачів у системі. Принципові елементи персоналізації мережі включають моделювання об'єктів мережі (наприклад, сторінок), суб'єктів мережі (користувачів), зіставлення між об'єктами та/чи суб'єктами та визначення набору дій, що потрібні для персоналізації [1]. Процес персоналізації може відбуватись у реальному часі

шляхом виконання алгоритмів, запрограмованих у системі, або ж шляхом проведення аналізу експертом на основі зібраної інформації та реалізації його рекомендацій.

При проектуванні інформаційної системи потрібно розв'язати декілька задач, одна з яких – ефективність розміщення даних, що породжує задачі дискретної оптимізації.

При проектуванні інформаційної системи потрібно враховувати наявність та характер взаємодії між її елементами, оскільки ці параметри визначають архітектуру системи. неправильне проектування якої породжує проблеми продуктивності, трансформації даних, інтеграції даних з іншими джерелами, відсутність історії, чистоти даних, залежність від доступності та структури основної бази даних [2]. Нижче ми розглянемо спосіб аналізу та оптимізації структури даних веб-серверів електронних інформаційних систем.

2. Постановка задачі кластерного аналізу

З ростом об'ємів даних, що зберігаються у мережі і пропонуються користувачу, зростає актуальність проблеми випередження запиту користувача шляхом пропонування йому потенційно цікавої інформації. В цьому полягає основна відмінність алгоритмів, що її розв'язують, від алгоритмів пошуку даних, оскільки останні надають відповідь на запит користувача, а перші пропонують відповідь без явного запиту з боку користувача. Метою даного

розділу є опис методів, що використовуються для побудови системи, здатної самостійно навчатися на основі фіксації сторінок, які користувач відвідує, і часу, що він проводить на кожній сторінці. При цьому у зв'язку з різким зростанням числа користувачів мережі, потреба ринку в подібних інформаційних системах дуже велика.

Інформаційна система, побудована таким чином, надаватиме користувачу відповідь, що буде максимально близькою до запита користувача і максимально корисною для користувача, базуючись на зібраному «досвіді», що надає статистична інформація з сервера. Це дозволить користувачеві знаходити інформацію ефективно, тим самим витрачаючи мінімальний час і зусилля та надаючи можливість сфокусуватись на тематичній роботі, що значно підвищить авторитет системи серед користувачів та приведе до поповнення самої системи актуальними матеріалами. Під користувачами системи, наприклад, розуміються: викладачі, науковці, студенти, компанії, що займаються пошуком електронних курсів чи іншої навчальної інформації.

Прикладом застосовності описаних нижче алгоритмів є пропонування користувачеві цікавої для нього інформації (на відміну від надання відповідей на запити) на основі аналізу сценаріїв його (та інших користувачів) перебування в системі.

Актуальність описаної проблеми зрозуміла, якщо звернутись до статистичних даних [3]:

- концентрація посилань – на 10% файлів доводиться до 90% запитів, які складають 90% потоку даних;

- список файлів без повторів – менше 3% від загального числа переданих файлів, що вказує на повторювальний характер звернень до інформації в Інтернет.

Задачу побудови оптимальної структури баз даних вважаємо вирішеною для електронної інформаційної системи і зупинимось на кластерному аналізі для побудови ефективного розбиття, що дозволить реалізовувати алгоритм пошуку інформації в системі та пропонувати користувачеві потенційно цікаву для нього інформацію (чи, іншими словами, зробить можливим персоніфікацію системи для користувача).

Термін «кластерний аналіз» (вперше введений Трайном (Troup) у 1939 р.) включає в себе набір різних алгоритмів класифікації. Потрібно також відмітити, що кластерний аналіз є не стільки звичайним статистичним методом, скільки набором різних алгоритмів розподілів

об'єктів по кластерам. Потрібно розуміти, що кластерний аналіз визначає найбільш імовірнісне значиме рішення [4], що у випадку пошуку інформації і є метою дослідження.

Отже, для того, щоб зробити ефективно забезпечення клієнта потрібними даними, необхідно розв'язати декілька задач, серед яких – задача вибору типу статистичної інформації для подальшого аналізу, задача збору статистичної інформації та задача вибору алгоритму для забезпечення персоніфікації. Дані задачі базуються на можливості аналізувати статистичну інформацію про діяльність користувачів інформаційної системи всередині інформаційної системи, для чого потрібно спроектувати та реалізувати дану можливість при побудові інформаційної системи. Окремим випадком можна розглянути зовнішні звернення користувачів для аналізу тематичних галузей, що не задовольняють користувача в інформаційній системі та вимагають продовжувати пошук за її межами.

3. Методи кластеризації: аналіз операцій, статистичний аналіз та аналіз схем

Перш за все, зупинимось на підході, що базується на виділенні груп семантично близьких звернень одного користувача, які називатимемо операціями. Для розбиття на операції можуть використовуватися операції розбиття і злиття над сеансами. Таким чином, операція може бути меншою чи більшою ніж один сеанс. Існують три основні підходи до розбиття на операції [5, 7].

Перший підхід – ідентифікація операцій з урахуванням тривалості відвідування сторінки. При цьому по замовчуванню вважається, що час, проведений користувачем на сторінці, прямо пропорційно залежить від важливості цієї сторінки для користувача (статистичні дані показують, що кількість сторінок, де користувач провів певний час, обернено експоненційно залежить від цього часу). Таким чином, якщо вибрати деяку межу часу, то можна відокремити сторінки, які цікаві користувачеві, від інших – нецікавих. Цей метод пропонує формулу для обчислення такого інтервалу залежно від розподілу відвідування сторінок з різними часовими інтервалами. Кінцем операції служить перша із сторінок, час відвідування якої перевищив вибраний поріг, а початком – перша сторінка після кінця попередньої.

Другий підхід – ідентифікація операцій методом максимальної глибини посилань. В цьому випадку нова операція починається з першого посилання вперед (перехід на сторінку,

яку даний користувач ще не відвідував). Кінець операції – досягнення найбільшої глибини, тобто якщо користувач повернувся на вже відвідану сторінку.

Третій підхід – розбиття операцій за часовим принципом – всі відвідування сторінок діляться на частини тривалістю, що не перевищують заданий поріг. Незалежне застосування такого розбиття мало виправдане, оскільки воно представляє повну множину операцій без відсікань. Цей метод можна застосовувати після одного з семантично орієнтованих методів для відсікання вироджених операцій за допомогою злиття операцій, час яких менший значення межі.

Далі застосовуємо кластеризацію операцій, тобто ділимо множину операцій на групи – кластери. Розглянемо наступний підхід: вважаємо, що мережа – ненаправлений, циклічний граф, в якому вузлам відповідають сторінки, а ребрам – переходи користувача по посиланнях. У випадку електронної інформаційної системи розглядаємо зв'язний підграф, множиною вузлів якої V є множина сторінок інформаційної системи, а множина ребер E описує наявні переходи (посилання між сторінками). Тобто кожна операція в такому графі є маршрутом, причому всі маршрути K – скінченні.

Розглянемо найпростіший спосіб застосування кластеризації: побудова ефективного розбиття на множині всіх операцій з врахуванням часу перебування на сторінці та кількості повторів і повернень на сторінку є темою окремої роботи. Для обраної вершини v_0 сформуємо кластер із тих і тільки тих маршрутів, що включають дану вершину. Далі розіб'ємо множину вершин по ступеню суміжності із обраною вершиною (дві вершини вважаємо суміжними, якщо існує маршрут $k_i \in K_{v_0}$, що з'єднує дані вершини; довжину маршруту вважаємо ступенем суміжності; множину вершин нумеруємо натуральними числами), тобто по відстаням між даними вершинами у маршруті. У множину ступеня суміжності 1 U_1 включимо вершини, відстань від яких до v_0 дорівнює 1:

$$U_1 = \{v_i \mid \exists k_j : v_i \in k_j, v_0 \in k_j, k_j \in K_{v_0}, d(v_i, v_0) = 1\}$$

(при цьому відстань вважається невизначеною, якщо вершини не належать одному маршруту).

Множину $U_k, k \in N$ формуємо наступним чином: $U_k = L_k \setminus (U_{k-1} \cup \dots \cup U_1)$, де L_k – множина вершин, відстань між якими до v_0

дорівнює

$$L_k = \{v_i \mid \exists k_j : v_i \in k_j, v_0 \in k_j, k_j \in K_{v_0}, d(v_i, v_0) = k\}$$

Таким чином, отримаємо розбиття кластера на підмножини, що не перетинаються і містять розбиття підмножини вершин на множини суміжності з вершиною v_0 . Даний підхід дозволяє побудувати множину сторінок, які ще не відвідав користувач, що потенційно можуть бути цікавими для нього, якщо він переглядає певну сторінку. Він є найпростішим і не враховує часу перебування на сторінці та кількість повторів і повернень на сторінку. Підхід базується на врахуванні попереднього досвіду користувачів, а отже, система буде створювати різні відповіді у різні моменти часу, якщо база для аналізу інформації – різна, що і характеризує систему як здатну самостійно навчатись.

Більш складну модифікацію даного алгоритму отримуємо при врахуванні, що маршрут є направленим та ваги сторінок у маршруті не є однаковими (як в спрощеному варіанті алгоритму). До опису модифікацій алгоритму автор повернеться у наступному викладенні матеріалу на дану тему.

Відмінним від методу аналізу операцій є статистичний аналіз. Він полягає в тому, що за даними журналу сервера підраховується найпопулярніша сторінка, найбільша кількість відвідувачів за день, тиждень, місяць, також можуть бути виділені сторінки, звернення до яких викликали найбільшу кількість помилок. Можна застосовувати статистичний аналіз до розбитого на операції журналу, в якому видалена несуттєва інформація (наприклад, за критерієм часу перебування на сторінці). В цьому випадку функціональна корисність різко зростає, з'являється можливість підраховувати статистичні дані для тривалості перебування на різних сторінках або довжини операцій. Зазвичай збір статистики не дає потрібної глибини для методів витягання знань, але будь-яка система прийняття рішень надає користувачеві такого роду інформацію як потенційно цікаву і корисну. Для аналізу отриманих даних часто використовується OLAP (OnLine Analytical Processing – підхід для швидкого надання відповідей на аналітичні запити у багатомірному середовищі) через зручність інтерфейсу [5].

Такий аналіз не забезпечує розуміння цілісної картини потреби користувача у інформації, проте його зручно використовувати для розбитої на кластери множини сторінок (розбиття за принципом тематичної приналежності), що дозволить запропонувати

користувачу найбільш популярний ресурс (наприклад, найбільш відвідуваний підручник з програмування серед усіх підручників з програмування).

Окремо від аналізу операцій та статистичного аналізу розглянемо методи пошуку схем, що полягають у знаходженні асоціативних правил, послідовностей зразків і схожих часових послідовностей [5]. Для аналізу шляху використовуються різні види графів, оскільки граф представляє деяке відношення, визначене на сторінці (або іншому об'єкті). Найпоширенішою є побудова графа, що відповідає фізичній структурі сервера – при цьому сторінки є вузлами, а посилання між ними – направленими ребрами. Також можуть бути використані графи, що базуються на типах сторінок, коли ребра представляють наявність переходів між сторінками, або де ребрам відповідають кількості користувачів, що перейшли з однієї сторінки на іншу. Велика частина досліджень, присвячених знаходженню множин шляхів або послідовностей посилань, проведена для графів, що відображають фізичну структуру. За допомогою цієї методики можна визначати найбільш відвідувані шляхи в мережі.

Базуючись на отриманому аналізі, можна коригувати фізичну структуру розташування та подання інформації таким чином, щоб пошук інформації вимагав мінімального часу користувача та мінімального часу обробки сервером запиту. Отже, можлива фізична зміна розташування інформації (наприклад, сторінки з найбільш відвідуваного шляху краще розмістити на одному сервері) та додавання нових шляхів (посилань) у граф системи.

У зв'язку з тим, що подібні бази операцій містять безліч інформації, зазвичай технології пошуку орієнтуються тільки на записи, доступ до яких здійснювався не менш певного числа разів. Для галузі електронної комерції виявлення даних правил може суттєво допомогти в розробці ефективного маркетингу. Також ця інформація допомагає при поліпшенні організації простору мережі [5]. Дії самої системи при застосуванні даного методу аналізу подібні до описаних вище дій при застосуванні аналізу операцій – система самостійно навчається на основі зібраних даних та закладених параметрів кластеризації.

Іншим випадком методу пошуку схем є знаходження послідовностей зразків – тобто виявлення зв'язку між різними операціями, що відбуваються впродовж одного часового інтервалу. У серверних журналах операцій кожне відвідування клієнта записується з деяким

інтервалом часу. Дослідження часових відносин між різними даними може мати, наприклад, наступні результати: 30% клієнтів після відвідування досліджуваного сервера, протягом 10 днів пройшли на ньому реєстрацію. Інший важливий тип зв'язаності даних, що також виявляється за допомогою цієї методики – схожі часові послідовності. Наприклад, можна знайти загальні характеристики у клієнтів, що зверталися до одного файлу в певний період часу, або часовий інтервал, впродовж якого файл, що цікавить нас, найчастіше використовується.

Виявлення класифікаційних правил дозволяє створити опис записів, що належать до певної групи у зв'язку із спільністю атрибутів (кластеризація на основі спільності атрибутів). Цей опис потім використовується для класифікації записів, що знов додаються. При вивченні використання мережі можна розробляти опис для клієнтів, що зверталися до певних файлів, використовуючи демографічну інформацію або схеми доступу, що вже існують для подібних клієнтів.

Кластерний аналіз в даному випадку може виконуватись алгоритмічно чи за допомогою експерта і дозволяє згрупувати клієнтів або дані, які мають схожі характеристики. Залучення експерта важливе для виявлення нетипових закономірностей і для виявлення закономірностей та їх подальшої автоматизації (наприклад, при початковому виборі типу статистичної інформації). Кластеризація інформації про клієнта з даними в журналах може дозволити розробити і здійснити стратегії надання інформації, що найбільш популярна всередині кластера.

4. Приклади та проблеми застосування кластеризації

Узагальнюючи область застосування кластер-аналізу у веб-сервері можна сказати, що це є персоніфікація наповнення сторінок. Користувача відносять в одну з категорій, після чого відповідним чином змінюється інформація, що виводиться для даного користувача [5]. Іншою традиційною для кластеризації областю застосування є підтримка прийняття рішень [6].

Розглянемо ще один приклад використання кластеризації – для автоматичної модифікації сторінок [5]. У роботі [1] автори при виборі об'єкту кластеризації пропонують не проводити розбиття по операціях. Це є відмова від традиційного підходу, що пояснюється труднощами з вибором метрики, а також дуже великою кількістю операцій щодо загального

числа сторінок. Алгоритм, запропонований авторами [1], полягає у наступному: на першому етапі за допомогою алгоритму знаходження асоціативних правил виділяються групи сторінок, до яких часто зверталися впродовж однієї операції. На другому етапі отримані групи проєктуються на ребра графа, і до графа застосовується алгоритм кластеризації. Коли користувач виконує запит, система розміщує поточну операцію в один з наперед створених кластерів. Залежно від властивостей даного кластера формується результуючий список посилань, цікавих користувачеві, який виводиться на сторінці, що проглядається.

При застосуванні кластеризації завжди потрібно вирішувати дві різні проблеми: вибір метрики і вибір алгоритму. Основною проблемою при кластеризації операцій є вибір метрики. З ряду причин класичні евклідові метрики виявляються неефективними [5, 7]. Можна спробувати порівнювати сеанси користувачів таким чином: оскільки кількість сторінок обмежена, представимо всі сесії як вектори однакової довжини, де довжина – загальна кількість аналізованих сторінок, а значеннями елементів буде Істина, якщо така сторінка входить в сесію, або Хибна, якщо не входить. Використовуючи відповідні методи кластеризації, при такому підході можна добитися достатньо точних результатів. Але при цьому втрачається кількість звернень до однієї сторінки за час однієї операції, а також не враховується послідовність відвідування сторінок. Другою проблемою, пов'язаною з вибором метрики, є нормалізація операцій. Достатньо часто доводиться порівнювати між собою операції довжиною у дві-три сторінки, і операції довжиною понад 25 переходів. На даний момент робіт, що повністю розв'язують цю проблему, немає.

Розглянемо застосування кластеризації даних до побудови інформаційної системи, що здатна навчатися. Для цього потрібно вирішити наступні задачі:

- вибір типу статистичної інформації для аналізу;
- забезпечення можливості збору статистичних даних;
- вибір алгоритму кластеризації та його програмну реалізацію.

Властивість системи навчатися забезпечена функціональною залежністю результату роботи алгоритму кластеризації системи від попередньо отриманих статистичних даних. При цьому результат роботи алгоритму

може бути різним при однаковому вхідному наборі операцій та ненульовому часовому проміжку між запусками алгоритму. Дана властивість системи і є її характеристичною властивістю як системи, здатної навчатися. Реалізація першої задачі вимагає побудову відповідної структури даних та забезпечення доступу до даних і повинна бути зроблена на етапі проєктування архітектури системи. Реалізація другої задачі представляє собою додатковий програмний модуль системи.

Кохаві у [8] виділяє 5 властивостей даних, необхідних для успішного їх аналізу:

- дані повинні містити в собі описи, для того щоб зробити можливим пошук зразків за наявності кореляцій між даними;
- необхідні великі об'єми даних для побудови надійних моделей;
- необхідний контрольований та надійний збір даних;
- здатність оцінювати результати;
- легкість інтеграції з існуючими процесами (щоб системи могли ефективно користуватися отриманими знаннями).

Прикладами реалізованої автоматичної персоніфікації є персональні рекомендації на Amazon.com, рекомендовані списки музики для прослуховування на Mystrand.com, а також агенти, що фільтрують новини. На відміну від автоматизованої персоніфікації, приклади явної персоніфікації (яка робиться самим користувачем) – це веб-сайти, такі як MyYahoo (Yahoo.com) чи сайти електронної комерції (наприклад, www.dell.com) [7].

5. Засоби аналізу отриманих даних

Для аналізу отриманих схем, як вже зазначалося, зручно використовувати інструменти, що дозволяють візуалізувати аналіз. Окрім того, потрібно зазначити, що аналіз даних, отриманих з мережі, схожий з аналізом, що проводиться в сховищах даних, а тому інструментом для аналізу можна запропонувати OLAP-технологію [5].

Спочатку журнали записів серверів очищуються, і записи поміщаються в реляційні таблиці. Наступним кроком будується куб даних на підставі вибраних атрибутів. В якості атрибутів можуть бути вибрані: користувач, розташування користувача, тип ресурсу, час, витрачений на перегляд ресурсу, дата, відповідь сервера і т.д. На третьому етапі використовується механізм OLAP (відбувається групування та структурування даних) для вивчення отриманих даних експертами. Експерт отримує готовий зріз

даних у зручному заданому форматі. Наприклад, можна отримати статистику по всіх запитах, чи по запитах від одного домена або від одного типу браузера. Можна отримувати інформацію по різних призначених для користувача сесіях або часових відрізках. Наступним кроком використовуються методи для прогнозу, класифікації і знаходження цікавих закономірностей. Цей етап може надавати інформацію, яку через різні причини не вдалося виявити на попередньому етапі.

Візуалізація є могутнім інструментом для полегшення розуміння різного роду завдань. Ще в 1996 році була розроблена система WebViz для візуалізації зразків доступу в мережі. Система використовує парадигму шляху у Всесвітній мережі, при якій набори записів в журналі використовуються для витягання послідовних наборів проходження етапів мережі. WebViz дозволяє аналітикові обробити частину мережі, відфільтрувавши невідповідну інформацію по різних критеріях, наприклад, по іменах серверів або за локальними адресами сторінок. При цьому мережа представлена як направлений, циклічний граф, в якому вузлам відповідають сторінки, а ребрам – переходи користувачів по посиланнях із сторінки на сторінку [5].

6. Висновки

У статті описані алгоритми кластеризації статистичних даних про користувачів та їх поведінку в системі з метою подальшого використання для персоніфікації інформації, що пропонується користувачу. Інформація може пропонуватись як результат явного пошуку користувача внаслідок аналізу кластерів даних, і як динамічне створення унікального інтерфейсу для даного користувача на основі його приналежності до певного кластеру за певними ознаками, чи на основі аналізу його поведінки. Система є такою, що самостійно навчається, оскільки вона здатна самостійно виконувати описані дії, базуючись на закладених алгоритмах, та здатна відмінно реагувати в подібній ситуації за умови зміни статистичного базису.

Список використаних джерел

1. *Mobasher B., Cooley R., Srivastava J.* Creating adaptive web sites through usage-based clustering of urls // IEEE Knowledge and Data Engineering Workshop (KDEX'99), 1999.
2. *Стулов А.* Особенности построения информационных хранилищ // Открытые системы. – 2003, – №4 / http://www.osp.ru/os/2003/04/182942/_p_2.html
3. *Arlitt M.F., Williamson C.L.* Web Server Workload Characterization: The Search for Invariants // ACM SIGMETRICS '96 Conference, - Philadelphia (PA), 1996.
4. *StatSoft, Inc.* Кластерный анализ // Электронный учебник. – 2001. / <http://www.statsoft.ru/home/textbook/modules/stcluan.html>
5. *Щербина А.* Основы получения знаний из Интернет // Открытые системы. – 2003. – №4 / <http://www.osp.ru/os/2003/04/>
6. *Chen C., Cochinala M., Petrone C., Pucci M., Samtani S., Santa P., Mesiti M.* Internet traffic Warehouse // ACM SIGMOD International Conference on Management of Data. – Dallas (Texas, USA), May 16-18, 2000.
7. *B. Mobasher, Brusilovsky, P., Kobsu A., Nejdl W.* Data mining for Web personalization, The Adaptive Web: Methods and Strategies of Web Personalization // Lecture Notes in Computer Science. – 2006. – Vol. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg New York.
8. *Kohavi, R., Provost, F.* Applications of data mining to electronic commerce // Data Mining and Knowledge Discovery. – 2001. – №5.

Надійшла до редколегії 5.06.2007

УДК 510.5+519.7

Іванов Є.В., Карнаух* Т.О., к. ф.-м. н.

Алгоритмічні властивості області визначення функцій, заданих скінченними R -перетворювачами

Розглядаються алгоритмічні проблеми для області визначення функцій, заданих скінченними R -перетворювачами

Ключові слова: R -перетворювач, автомат Бюхі, щільність.

*E-mail: tkarnaukh@unicyb.kiev.ua

Серед способів задання обчислюваних дійсних функцій можна виділити запропоновану Л.П. Лісовиком модель R -перетворювача [1]. Задання функцій R -перетворювачами тісно пов'язано з заданням множин [2], зокрема деяких об'єктів фрактальної геометрії, які є предметом багатьох досліджень. В даній роботі розглядається розв'язність питань щодо області визначення функцій, заданих скінченними R -перетворювачами.

Надалі скористаємось такими позначеннями.

$\Sigma_p = \{0, 1, \dots, p\}$, $\Sigma_{-p} = \{0, \bar{1}, \dots, \bar{p}\}$, $\Sigma_0 = \Sigma_1 \cup \Sigma_{-1}$,

$D = (\{0\} \cup 1\Sigma_1^* \nabla \Sigma_1^0 \cup (\{0\} \cup 1\Sigma_{-1}^* \nabla \Sigma_{-1}^0)$,

$D'' = (\{0\} \cup 1\Sigma_1^* \nabla \Sigma_2^0 \cup (\{0\} \cup 1\Sigma_{-1}^* \nabla \Sigma_{-2}^0)$,

$G_1 = (\{0\} \cup 1\Sigma_1^* \nabla (\Sigma_1^0 \Sigma_1^* 1^0) \cup$

$\cup (\{0\} \cup 1\Sigma_{-1}^* \nabla (\Sigma_{-1}^0 \Sigma_{-1}^* \bar{1}^0))$,

$G = (\{0\} \cup 1\Sigma_1^* \nabla (\Sigma_1^0 \Sigma_1^* \{0^0, 1^0\}) \cup$

$\cup (\{0\} \cup 1\Sigma_{-1}^* \nabla (\Sigma_{-1}^0 \Sigma_{-1}^* \{0^0, \bar{1}^0\}))$.

Скористаємось поняттями R -перетворювач, $O_1(A)$, $O(A)$, f_A , $\|\cdot\|$, F_0 , K_0 прийнятими в роботі [1]. Нагадаємо, що R -перетворювач A задає дійсну функцію $\tilde{f}_A: \tilde{f}_A(x) = \|f_A(w)\|$, де $x = \|w\|$, $w \in D \setminus K_0$, а $\|u\|$ – дійсне число, що відповідає двійковому запису u . Скінченним є R -перетворювач із скінченною множиною станів. Без обмеження загальності можна вважати, що скінченний R -перетворювач A не має ε -переходів, оскільки вони можуть бути еліміновані із збереженням функції f_A .

За побудовою $G_1 = D \setminus K_0$. Нехай $\|W\| = \{\|w\| \mid w \in A\}$. Тоді $\|G\| = R \setminus R_0$, де R_0 – множина двійково-раціональних чисел.

Зображення дійсних чисел та автомати Бюхі

Автомат Бюхі (детермінований), або B -автомат, — це п'ятірка $M = (Q, \Sigma, \delta, q_0, F)$, елементи якої мають ту саму семантику, що й у випадку звичайних детермінованих скінченних автоматів. Нагадаємо, що автомат розпізнає ті й тільки ті ω -

E.V. Ivanov, T.O. Karnaukh*, Ph.D.

Decision problems for finite R -transducer defined function domains

Decision problems (emptiness, totalness, density in R) for finite R -transducer defined function domains are discussed.

Key Words: R -system R -transducer, Büchi automaton, density.

слова, при роботі над якими зі стану q_0 нескінченно багато раз проходить через заключні стани. Відомо, що для кожного B -автомата існує еквівалентний повний B -автомат.

Теорема 1. Для множин $\Delta_1, \dots, \Delta_m, \Gamma \subseteq \Sigma$ та регулярної мови L в алфавіті $T \setminus \{\#\}$ існує B -автомат, що розпізнає ω -мову $L \# (\Sigma^0 \setminus (\Gamma^* (\Delta_1^0 \cup \dots \cup \Delta_m^0)))$.

Доведення. Для автомату $M = (Q, \Sigma \cup T \cup \{\#\}, \delta_2, q_0, F)$, де

$Q = \{q_i \mid i = \{i \mid a \in \Delta_i, i \in \overline{1, m}\}, a \in \Delta\} \cup \{q_\# \}$,

$\Delta = \Gamma \cup \Delta_1 \cup \dots \cup \Delta_m$, $F = \{q_\#, q_\#\}$,

$\delta(q, a) = q_\#, q \in Q, a \in \Sigma \setminus \Delta$,

$\delta(q_\#, a) = q_i, a \in \Delta, i = \{i \mid a \in \Delta_i, i \in \overline{1, m}\}$,

$\delta(q_j, a) = q_i, q_j \in Q \setminus F, a \in \Delta, i = j \cap \{i \mid a \in \Delta_i, i \in \overline{1, m}\}$,

$L_\omega(M) = \Sigma^0 \setminus (\Gamma^* (\Delta_1^0 \cup \dots \cup \Delta_m^0))$. Нехай мова L розпізнається детермінованим скінченним автоматом $M_1 = (Q_1, \Sigma, \delta_1, q_1, F_1)$, $Q_1 \cap Q = \emptyset$. Шуканий автомат M_2 спочатку запускає M_1 , як тільки M_1 в заключному стані отримує на вхід $\#$, то M_2 переходить в стан $q_\#$ і продовжує роботу як автомат M . Покладемо $M_2 = (Q_1 \cup Q, \Sigma \cup T \cup \{\#\}, \delta_2, q_1, F)$, де $\delta_2 = \delta_1 \cup \delta \cup ((F_1 \times \{\#\}) \times \{q_\#\})$. Теорема доведена.

Зазначимо, що клас ω -мов, що розпізнаються B -автоматами, ефективно замкнений відносно об'єднання та перетину, а також в цьому класі розв'язна проблема пустоти [3]. Тому з урахуванням доведення теореми 1 отримуємо таке.

Наслідок 1. Можна побудувати B -автомати, що розпізнають ω -мови D, D'', G_1, G .

Для подальшого зафіксуємо автомати M_D та $M_{D''}$, що розпізнають ω -мови D та D'' відповідно.

Лема 1. Для довільного B -автомата $M = (Q, \Sigma, \delta, q_0, F)$ та множин Δ, Γ, T , де $\Gamma \subseteq \Delta$, $T = \{a_1, \dots, a_m\} \subseteq \Delta$, $m \geq 0$, розв'язна проблема $\Delta^0 \setminus (\Gamma^* \{a_1^0, \dots, a_m^0\}) \subseteq L_\omega(M)$.

Доведення. Випадок $\text{card } \Delta < 2$ тривіальний. Без обмеження загальності можна вважати, що

$\Sigma = \Delta$ (інакше вилучимо зайві переходи), всі стани досяжні з початкового та з кожного стану досяжний хоча б один заключний. Нехай $L(q)$ – множина слів, за якими автомат переходить зі стану q_0 в q . Мова $L(q)$ регулярна, а тому проблема $L(q) \subseteq a^*$ є розв'язною. Включення $L_\infty(M) \supseteq \Delta^* \Gamma^* \{a_1^w, \dots, a_m^w\}$ виконується тоді й тільки тоді, коли 1) $\forall q \in Q \forall a \in \Delta (q, a) \in \text{Dom } \delta$ та 2) кожен замкнений маршрут діаграми містить заключний стан або всі його дуги відмічено символом $a \in T$, причому $L(q) \subseteq \Gamma^* a^*$ для кожного його стану q . Останню умову достатньо перевірити для простих циклів та переконатись, що довільні два простих цикли без заключних станів з різними відмітками дуг не мають спільних вершин. Лема доведена.

Лема 2. Нехай задано ω -мову W і детермінований скінченний автомат $M_1 = (Q_1, \Sigma, \delta_1, q_1, F_1)$. Якщо для B -автоматів розв'язна проблема $W \subseteq L_\infty(M)$, то розв'язна й проблема $L(M_1)W \subseteq L_\infty(M)$.

Доведення. За B -автоматом M побудуємо автомат M_2 , що паралельно моделює роботу автоматів M та M_1 : $M_2 = (Q \times Q_1, \Sigma, \delta_2, (q_0, q_1), Q \times F_1)$, де $\delta_2((q, p), a) = (\delta(q, a), \delta_1(p, a))$.

Множина K станів автомата M , досяжних з q_0 по словам з мови $L(M_1)$, є множиною перших компонент досяжних заключних станів автомата M_2 , отже може бути ефективно побудована. Тоді $L_\infty(M) \supseteq L(M_1)W \Leftrightarrow \forall q \in K L_\infty(M_q) \supseteq W$, де $M_q = (Q, \Sigma, \delta, q, F)$. Лема доведена.

З лем 1 та 2 маємо таку теорему.

Теорема 2. Для довільного B -автомата $M = (Q, \Sigma, \delta, q_0, F)$, скінченного автомата $M_1 = (Q_1, \Sigma, \delta_1, q_1, F_1)$, множин Δ, Γ, T , де $\Gamma \subseteq \Delta$, $T = \{a_1, \dots, a_m\} \subseteq \Delta$, $m \geq 0$, розв'язна проблема $L(M_1)(\Delta^* \Gamma^* \{a_1^w, \dots, a_m^w\}) \subseteq L_\infty(M)$.

Наслідок 2. Для довільного B -автомата M проблема $X \subseteq L_\infty(M)$, де $X \in \{D, D'', G_1, G\}$ є розв'язною.

Доведення випливає з теореми 2 та того, що $A \cup B \subseteq C \Leftrightarrow A \subseteq C \wedge B \subseteq C$.

Властивості області визначення функцій, заданих скінченими R -перетворювачами

Лема 3. За довільним скінченим R -перетворювачем $A = (K, H, q_0)$ і B -автоматом $M_1 = (Q_1, \Sigma_0, \delta_1, q_1, F_1)$ можна ефективно побудувати B -автомат M_2 такий, що

$$L_\infty(M_2) = \{v \in \Sigma_0^* \mid \exists w \in L_\infty(M_1) (v, w) \in O_1(A)\}.$$

Доведення. Без обмеження загальності можна вважати, що A немає ε -переходів. Шуканий автомат M_2 , отримуючи на вхід деяке ω -слово, моделює роботу A , одночасно перевіряючи належність

виходу множині $L_\infty(M_1)$. Для цього його стан складається зі станів пристроїв A і M_1 та прапорця контролю нескінченності виходу A . Значення і прапорця означає, що після зчитування вхідного символу A дописав на вихід непорожнє слово.

$M_2 = (Q_2, \Sigma_0, \delta_2, q_2, F_2)$, де $Q_2 = K \times Q_1 \times \{0, 1\}$, $q_2 = (q_0, q_1, 1)$, $F_2 = K \times F_1 \times \{1\}$, для всіх $q_A \in K$, $q_M \in Q_1$, $i \in \{0, 1\}$, $a \in \Sigma_0$

$$\delta_2((q_A, q_M, i), a) = (\delta_A(q_A, a), \delta_1(q_M, \lambda_A(q_A, a)), j), \text{ де } j = 1 \text{ при } \lambda_A(q_A, a) \neq \varepsilon \text{ і } j = 0 \text{ при } \lambda_A(q_A, a) = \varepsilon.$$

Теорема 3. За довільним скінченим R -перетворювачем $A = (K, H, q_0)$ можна побудувати B -автомат M_A такий, що $L_\infty(M_A) = \text{Dom } f_A$.

Доведення. Оскільки $D'' = L_\infty(M_E)$, $D = L_\infty(M_D)$, то за лемою 3 побудуємо B -автомат M_1 , для якого $L_\infty(M_1) = \{v \in \Sigma_0^* \mid \exists w \in D'' (v, w) \in O_1(A)\}$.

Тепер $\text{Dom } f_A = L_\infty(M_1) \cap D = L_\infty(M_1) \cap L_\infty(M_D)$, тому шуканий автомат M будується як автомат для перетину. Теорема доведена.

Надалі через M_A позначатимемо B -автомат, для якого $L_\infty(M_A) = \text{Dom } f_A$.

Теорема 4. Для скінченного R -перетворювача A розв'язні проблеми $\text{Dom } f_A = \emptyset$, $\text{Dom } \tilde{f}_A = \emptyset$.

Доведення. $\text{Dom } f_A = \emptyset \Leftrightarrow L_\infty(M_A) = \emptyset$, що розв'язне для B -автоматів.

$\text{Dom } \tilde{f}_A = \emptyset \Leftrightarrow L_\infty(M_A) \cap G_1 = \emptyset$, що теж розв'язне, оскільки для G_1 можна побудувати B -автомат, а клас ω -мов, що розпізнаються B -автоматами, замкнений відносно перетину.

Теорема 5. Для скінченного R -перетворювача A розв'язні проблеми $\text{Dom } f_A = D$ та $\text{Dom } \tilde{f}_A = R$.

Доведення. $\text{Dom } f_A = L_\infty(M_A)$, тому для доведення достатньо зазначити, що

$$\text{Dom } f_A = D \Leftrightarrow D \subseteq \text{Dom } f_A = D,$$

$$\text{Dom } \tilde{f}_A = R \Leftrightarrow G_1 = D \cap K_0 \subseteq \text{Dom } f_A,$$

та скористатись наслідком 2.

Наслідок 4. Для скінченного R -перетворювача A наступні проблеми є розв'язними

$$G_1 \subseteq \text{Dom } f_A, G \subseteq \text{Dom } f_A,$$

$$[0; +\infty) \subseteq \text{Dom } \tilde{f}_A, (-\infty; 0] \subseteq \text{Dom } \tilde{f}_A,$$

$$(0; +\infty) \subseteq \text{Dom } \tilde{f}_A, (-\infty; 0) \subseteq \text{Dom } \tilde{f}_A.$$

Доведення. Перші чотири включення доводяться аналогічно доведенню теореми 5.

$$(0; +\infty) \subseteq \text{Dom } \tilde{f}_A \Leftrightarrow [0; +\infty) \subseteq \{0\} \cup \text{Dom } \tilde{f}_A \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow (\{0\} \cup \{1\} \Sigma_1^*) \cap (\Sigma_1^* \Sigma_1^* 1^*) \subseteq L_\infty(M_A) \cup \emptyset \forall 0^*.$$

далі залишається побудувати автомат для об'єднання та використати теорему 2. Розв'язність $(-\infty; 0) \subseteq \text{Dom } \tilde{f}_A$ встановлюється аналогічно.

Лема 5. Якщо для ω -мови W та B -автомату $M = (Q, \Sigma, \delta, q_0, F)$ розв'язна проблема $W \subseteq L_\infty(M)$, то існує скінченний автомат M' такий, що $L(M') = \{u \mid uW \subseteq L_\infty(M)\}$.

В якості доведення візьмемо $M' = (Q, \Sigma, \delta, q_0, K)$, де $K = \{q \in Q \mid L(M_q) \supseteq W\}$, $M_q = (Q, \Sigma, \delta, q, F)$.

Теорема 6. Для скінченного R -перетворювача A розв'язні проблеми $R_0 \subseteq \|\text{Dom } f_A\|$, $R \setminus R_0 \subseteq \|\text{Dom } f_A\|$, $\|\text{Dom } f_A\| = R$.

Доведення. $0 \in \|\text{Dom } f_A\| \Leftrightarrow 0 \nabla 0^\omega \in L_\infty(M_A)$, що розв'язне за теоремою 2.

$R \setminus R_0 \subseteq \|\text{Dom } f_A\| \Leftrightarrow G \subseteq \|\text{Dom } f_A\|$, що розв'язне за наслідком 2.

Перевірка включення $R_0 \cap (0; +\infty) \subseteq \|\text{Dom } f_A\|$ зводиться до того, що для кожного числа $x \in R_0 \cap (0; +\infty)$ хоча б одне з двох його двійкових зображень розпізнається B -автоматом M_A , який без обмеження загальності можна вважати повним. Нехай M_A має n станів. Мови $X = \{u \mid u10^\omega \in L_\infty(M_A)\}$, $Y = \{u \mid u01^\omega \in L_\infty(M_A)\}$, $X_0 = \{u \mid u1 \nabla 0^\omega \in L_\infty(M_A)\}$, $Y_0 = \{u \mid u0 \nabla 1^\omega \in L_\infty(M_A)\}$, $X_i = \{u \mid u10^i \nabla 0^\omega \in L_\infty(M_A)\}$, $Y_i = \{u \mid u01^i \nabla 1^\omega \in L_\infty(M_A)\}$, $i \in \overline{0, n}$, за теоремою 2 та лемою 5 є регулярними.

$$R_0 \cap (0; +\infty) \subseteq \|\text{Dom } f_A\| \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow X \cup Y = (\{0\} \cup 1\{0, 1\}^*) \nabla \{0, 1\}^* \wedge \\ \wedge \forall i \in \overline{0, n} \ X_i \cup Y_i = 1\{0, 1\}^*,$$

що для регулярних мов є розв'язним.

Остання еквівалентність впливає в тому числі з наступного. Якщо M_A має n станів та не розпізнає ω -слово $a_0 \dots a_m \nabla w$, $m \geq n$, то для послідовності станів $q_0, \dots, q_m$, в які послідовно переходить автомат при роботі над словом $a_0 \dots a_m$, існують i, j такі, що $1 \leq i < j \leq m$, $q_i = q_j$, та всі стани $q_1, \dots, q_i, q_{i+1}, \dots, q_m$ попарно різні. Тоді автомат не розпізнає ω -слово $a_0 a_1 \dots a_i a_{j+1} \dots a_m \nabla w$ з довжиною цілої частини не більше n .

Перевірка $R_0 \cap (-\infty; 0) \subseteq \|\text{Dom } f_A\|$ здійснюється аналогічно, що завершує доведення теореми, оскільки $R_0 = \{0\} \cup (R_0 \cap (0; +\infty)) \cup (R_0 \cap (-\infty; 0))$ та $\|\text{Dom } f_A\| = R \Leftrightarrow R_0 \cup (R \setminus R_0) \subseteq \|\text{Dom } f_A\|$.

Лема 6. Множина $\|A\|$, де $A \subseteq D$, скрізь щільна в R тоді й тільки тоді, коли $\text{Pref}(D) \subseteq \text{Pref}(A)$.

Доведення. Якщо $u \in \text{Pref}(D) \setminus \text{Pref}(A)$, то $\|A\| \cap (\|u010\|; \|u011\|) = \emptyset$ і множина $\|A\|$ не є скрізь щільною в R .

Покажемо, що при $\text{Pref}(D) \subseteq \text{Pref}(A)$ множина $\|A\|$ є скрізь щільною в R . Нехай $k \in \mathbb{N}$, $z \in R$, $z = \|w\|$, $w = u \nabla a_1 \dots a_k \in DK_0$, $a_i \in \{0, 1, 1\}$, $u \nabla a_1 \dots a_{k+2} \in \text{Pref}(A)$, а тому існує таке ω -слово v_k , що $w_k = u \nabla a_1 \dots a_{k+2} v \in A$. Оскільки $\|w\| - \|w_k\| =$

$= 2^{-k-2} \|\|0 \nabla a_{k+3} \dots\| - \|0 \nabla v\|\| \leq 2^{-k-2} \cdot 2 < 2^{-k}$, то множина $\|A\|$ є скрізь щільною в R .

Лема 7. Для B -автомату $M = (Q, \Sigma, \delta, q_0, F)$ існує скінченний автомат M' такий, що $L(M') = \text{Pref}(L_\infty(M))$.

Доведення. Покладемо $M' = (Q, \Sigma, \delta, q_0, K)$, де $K = \{q \in Q \mid L_\infty(M_q) \neq \emptyset\}$, $M_q = (Q, \Sigma, \delta, q, F)$.

Теорема 7. Для скінченного R -перетворювача A розв'язні проблеми

- 1) $\|\text{Dom } f_A\|$ скрізь щільна в R ;
- 2) $\text{Dom } \tilde{f}_A$ скрізь щільна в R .

Доведення. Оскільки $\text{Dom } f_A = L_\infty(M_A)$, $\text{Dom } \tilde{f}_A = \|L_\infty(M_A) \cap G_1\|$, то за лемою 6

$$\|\text{Dom } f_A\| \text{ скрізь щільна в } R \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \text{Pref}(D) \subseteq \text{Pref}(L_\infty(M_A)), \\ \text{Dom } \tilde{f}_A \text{ скрізь щільна в } R \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \text{Pref}(D) \subseteq \text{Pref}(L_\infty(M_A) \cap G_1).$$

За наслідком 1 для ω -мов D, G_1 можна побудувати B -автомати, які їх розпізнають. Оскільки клас ω -мов, що розпізнаються B -автоматами, ефективно замкнений відносно перетину, то за лемою 7 можна побудувати скінченні автомати для $\text{Pref}(D)$, $\text{Pref}(L_\infty(M_A))$, $\text{Pref}(L_\infty(M_A) \cap G_1)$. Отже вище зазначені включення є розв'язними.

Теорема 8. Для скінченного R -перетворювача A розв'язна необмеженість множини $\text{Dom } \tilde{f}_A$.

Доведення. Аналогічно доведенню теореми 7, множина $\text{Dom } \tilde{f}_A = \|L_\infty(M_A) \cap G_1\|$ є необмеженою тоді й тільки тоді, коли регулярна мова $\text{Pref}(L_\infty(M_A) \cap G_1) \cap (\Sigma_0^* \nabla)$, яка задає двійкові зображення цілих частин чисел з $\text{Dom } \tilde{f}_A$, є нескінченною. Для регулярних мов проблема нескінченності розв'язна. Теорема доведена.

Отримані результати корисні для подальшого дослідження скінчених R -перетворювачів як засобу задання множин та функцій.

Список використаних джерел

1. Лисовик Л.П. Алгоритмические вопросы для реальных функций. // Кибернетика. – 1987. – №1. – С. 12-17.
2. Лисовик Л.П. Применения конечных преобразователей для задания фрактальных кривых. // Кибернетика и системный анализ. – 1994. – № 3. – С. 11-22.
3. Siefskes D. Decidable Theories I: Büchi's Monadic Second Order Successor Arithmetic. – Springer-Verlag, 1970. – P. 130.

Надійшла до редколегії 04.06.07

УДК 681.3:004.056

Іванов І. Ю., аспірант

Генерація схеми RSA в умовах обмеженості обчислювальних ресурсів

Розглядається проблема генерації простих чисел в умовах обмеженості обчислювальних ресурсів для їх подальшого використання в якості складових схеми RSA. Запропоновано модифікацію алгоритму Рабіна-Міллера, що дозволяє доручити перевірку числа на простоту пристрою, що володіє необхідними ресурсами, без розкриття чисел, що перевіряються.

Ключові слова: прості числа, RSA, генерація

*E-mail: innokentiy@gmail.com

Останнім часом широкого розповсюдження набули мобільні обчислювальні пристрої. Характерною особливістю таких пристроїв є порівняно мала продуктивність процесору у поєднанні з невеликою кількістю оперативної пам'яті. У той самий час, більшість сучасних криптографічних алгоритмів з відкритим ключем вимагають великої кількості складних обчислень, що ускладнює їх застосування на таких пристроях. Тому досить актуальною є проблема адаптації існуючих криптографічних алгоритмів для забезпечення можливості їх виконання на мобільних пристроях. Зокрема, беручи до уваги широку застосовність схеми RSA [2] в сучасних засобах безпеки, актуальною є задача генерації великих простих чисел для їхнього подальшого використання в якості складових цієї схеми.

Всі існуючі алгоритми генерації простих чисел вимагають дуже великої кількості обчислень. Зокрема, один з найбільш ефективних і часто використовуваних алгоритмів перевірки чисел на простоту, алгоритм Рабіна-Міллера [3, 4], у своїй роботі використовує декілька операцій модульного піднесення до степеня (які є досить повільними), що робить його практично незастосовним у середовищах з обмеженими обчислювальними можливостями.

Поставимо задачу таким чином (мал. 1). Пристрій А, що є обмеженим у обчислювальних ресурсах, має мету сгенерувати для себе два великих простих числа (позначимо їх p та q) для використання їхнього добутку в якості відкритого модуля схеми RSA. А має можливість генерувати великі випадкові числа і виконувати над ними прості арифметичні операції

I. Y. Ivanov

Generation of RSA scheme in resource-constrained environments

The paper considers the problem of generation of prime numbers in resource-constrained environments for further use in RSA scheme. The modification of Rabin-Miller prime verification algorithm that allows to delegate resource-expensive operations to powerful device without disclosing the numbers being tested is proposed.

Key Words: primes, RSA, generation

(додавання, множення, обчислення залишку від ділення), але йому не вистачає продуктивності для перевірки цих чисел на простоту (тобто для виконання операції піднесення до степеня за модулем). В той же час, в нього є доступ до пристрою Б, що має достатньо обчислювальних можливостей для перевірки великих чисел на простоту. А бажає "доручити" Б перевірити два числа, що він сгенерував, на простоту, але таким чином, щоб зберегти ці числа в секреті від Б. Вимога захищеності на канал зв'язку між А та Б не накладається.



Мал. 1

Запропонований далі алгоритм, що розв'язує поставлену задачу, базується на алгоритмі Рабіна-Міллера перевірки числа на простоту. Алгоритм Рабіна-Міллера було взято за основу тому, що він є одним з найбільш ефективних у своєму класі та використовується у багатьох сучасних стандартах та системах безпеки (напр., [5]).

Перед тим, як перейти до безпосереднього викладення алгоритму, нагадаємо оригінальний алгоритм Рабіна-Міллера:

Алгоритм (Рабін-Міллер)

Вхід: p (число, що має бути перевірено на простоту),

Вихід: просте / складене.

1. Обчислити b – кількість ділень $p - 1$ на 2 (тобто 2^b – найбільший степінь числа 2, на який ділиться $p - 1$). Далі, обчислити m таке, що $p = 1 + 2^b m$,
2. Обрати випадкове число $a < p$,
3. Встановити $j = 0$ і $z = a^m \bmod p$,
4. Якщо $z = 1$ або $z = p - 1$, то p проходить тест і може бути простим,
5. Якщо $j > 0$ і $z = 1$, то p не є простим числом,
6. Встановити $j = j + 1$. Якщо $j < b$ і $z \neq p - 1$, встановити $z = z^2 \bmod p$ і повернутися на крок 5. Якщо $z = p - 1$, то p проходить тест і може бути простим числом.
7. Якщо $j = b$ і $z \neq p - 1$, то p не відноситься до простих чисел.

Зауважимо, що ймовірність факту, що складене число пройде тест (тобто, буде ідентифіковано, як просте) складає $1/4$. Тому на практиці звичайно застосовують декілька послідовних незалежних тестів (обираючи різні значення a), зменшуючи ймовірність помилкового результату до $(1/4)^t$, де t – кількість тестів [6].

Модифікуємо вищенаведений алгоритм таким чином, щоб він задовольняв умовам нашої задачі.

Алгоритм (Рабін-Міллер-RSA)

Вхід: p, q (випадкові числа, що були сгенеровані пристроєм А, що мають бути перевірені на простоту).

Вихід: інформація про простоту чисел p та q .

1. (А) Обчислити $n = pq$, а потім b_p, b_q, m_p та m_q аналогічно тому, як це робиться в вищенаведеному алгоритмі, тобто $p = 1 + 2^{b_p} m_p, q = 1 + 2^{b_q} m_q$
2. (А) Обрати великі випадкові числа $l_p < p, l_q < q$ і обчислити $m_p' = m_p l_p, m_q' = m_q l_q$
3. (А) Передати пристроєві Б числа n, m_p' та m_q' ,
4. (Б) Обрати випадкове число a , таке, що $\text{length}(a) < \text{length}(n) / 2$, де length – функція, що повертає довжину числа в бітах,
5. (Б) Встановити $j = 0$ і обчислити $z_p = a^{m_p} \bmod n, z_q = a^{m_q} \bmod n$, після чого відправити значення z_p' та z_q' пристроєві А,
6. (А) Обчислити $z_p = z_p' \bmod p$ та $z_q = z_q' \bmod q$. Якщо $z_p = 1$ або $z_p = p - 1$, то

p проходить тест і може бути простим. Якщо $z_q = 1$ або $z_q = q - 1$, то q проходить тест і може бути простим.

7. (А) Якщо $j > 0$ і $z_p = 1$, то p не є простим числом. Якщо $j > 0$ і $z_q = 1$, то q не є простим числом.
8. (А) Встановити $j = j + 1$. Якщо $j < b_p, j < b_q, z_p \neq p - 1$ і $z_q \neq q - 1$, то (Б) встановити $z_p' = z_p^2 \bmod n$ та $z_q' = z_q^2 \bmod n$, відправити z_p', z_q' пристроєві А, (А) обчислити $z_p = z_p' \bmod p$ та $z_q = z_q' \bmod q$ і повернутися на крок 7,
9. (А) Якщо $z_p = p - 1$, то p проходить тест і може бути простим числом. Якщо $z_q = q - 1$, то q проходить тест і може бути простим числом.
10. (А) Якщо $j = b_p$ і $z_p \neq p - 1$, то p не відноситься до простих чисел. Якщо $j = b_q$ і $z_q \neq q - 1$, то q не відноситься до простих чисел.
11. Алгоритм виконується до тих пір, поки для обох чисел p та q не буде показана їхня простота, або для будь-якого з цих чисел не показано зворотне.

Покажемо, що вищенаведений алгоритм еквівалентний оригінальному алгоритму Рабіна-Міллера. Замість виразу $z = a^{m_p} \bmod p$, Б обчислює $z_p' = a^{m_p} \bmod n = a^{m_p l_p} \bmod(pq)$. Далі А обчислює z_p наступним чином:

$$z_p = z_p' \bmod p = (a^{m_p l_p} \bmod(pq)) \bmod p = a^{m_p l_p} \bmod p = (a^{l_p})^{m_p} \bmod p$$

Оскільки в оригінальному алгоритмі значення a можна обирати випадковим чином, то a^{l_p} можна трактувати як деяке число b , обране А в якості a . Аналогічні викладки можна навести для числа q . Таким чином, ми показали, що спільні кроки А та Б, за допомогою яких обчислюються значення z_p , еквівалентні крокам алгоритму Рабіна-Міллера.

Зауважимо, що в алгоритмі Рабін-Міллер-RSA всі обчислювально важкі процедури (а саме, модульне піднесення до степеню) виконуються пристроєм Б. До операцій, що виконуються пристроєм А, відносяться лише операції множення та знаходження залишку від ділення. Ці операції є швидкими і можуть бути виконані на пристрої, що не володіє великими обчислювальними ресурсами. Також потрібно зауважити, що перевірка ділимості чисел, що перевіряються, на малі прості числа, яка часто рекомендується до застосування у практичних

реалізаціях для підвищення ефективності алгоритму, також може бути виконана пристроєм Б.

Покажемо, що алгоритм Рабін-Міллер-RSA задовольняє іншій умові поставленої задачі, а саме залишає числа p та q в секреті від пристрою Б. В ході виконання алгоритму, Б має доступ до наступних значень: $n (= pq)$, $m_p' (= m_p l_p)$ та $m_q' (= m_q l_q)$. Для розкриття чисел p та q , Б має розкласти на множники хоча б одне з чисел n , m_p' , m_q' . Але задача розкладання великого числа на прості множники є обчислювально нерозв'язною у скінченний час [7], тому відповідною для Б є задача отримання чисел p та q з їх добутку n .

Окремо розглянемо задачу розкладання на множники чисел m_p' та m_q' . При обчисленні цих значень дуже важливо обирати такі значення l_p та l_q , щоб ця задача була обчислювально складною. Тому в якості l_p та l_q мають обиратися саме великі випадкові числа (порівняні за розміром з p та q). Слід відмітити, що m_p та m_q у загальному випадку не є простими числами, тому розкладання m_p' та m_q' на множники є менш складною задачею. Тому має сенс обирати значення l_p та l_q як добутки великої кількості

множників, $l_p = \prod_{i=1}^K l_{p_i}$. Тому, навіть якщо Б

зможе виконати розкладання m_p' , він отримає [щонайменше] $K+1$ множників. Оскільки Б не "знає", які саме з цих множників утворюють m_p (а які – "належать" l_p), йому доведеться відновлювати m_p методом повного перебору усіх комбінацій цих множників. Кількість таких комбінацій дорівнює $\sum_{i=1}^K C'_K = 2^K - 1$. Таким

чином, обравши значення K близьким до довжини чисел p та q (напр., $K=1024$ при $length(p) = 1024$ біт), ми зробимо задачу відновлення m_p з простих множників не простішою за задачу розкладання числа N на множники.

Покажемо, що обмін даними між А та Б може виконуватись по відкритому каналу. Пасивний зломисник (що лише прослуховує дані протоколу) має доступ до всіх тих значень, що доступні пристроєві Б (n , m_p' , m_q' , z_p' , z_q'). Але ми показали, що володіння цими даними не є достатнім для отримання чисел p та q . Для протидії активному зломиснику (що має можливість змінювати дані, які передаються через канал) кожне з повідомлень, що передається по каналу, має бути автентифіковано

за допомогою будь-якої схеми автентифікації (цифровий підпис, MAC чи ін.).

Певним недоліком алгоритму є оперування парами чисел. Якщо хоча б одне з чисел p та q виявиться складеним, А має сгенерувати нову пару (p , q) та повторити виконання алгоритму. Слід зауважити, що навіть якщо одне з чисел p та q виявилось простим (а інше – ні), то А все одно повинен сгенерувати два нових числа. Це слід робити тому, що при повторному використанні числа, що було перевірено на попередньому етапі, Б буде мати можливість легко отримати це число за допомогою алгоритму пошуку НСД з попереднього та поточного добутків.

Список використаних джерел

1. Б. Шнайер. Прикладная криптография. – М.: ТРИУМФ, 2002. – 816 с.
2. R.L.Rivest, A.Shamir, L.M.Adleman. A Method for Obtaining Digital Signatures and Public Key Cryptosystems // Communications of the ACM. – 1978. – 21, № 2. – P.120-126.
3. M.O.Rabin. Probabilistic Algorithm for Testing Primality // Journal of Number Theory. – 1980. – 12, № 1. – P. 128-138.
4. G. Miller. Riemann's Hypothesis and Tests for Primality // J. Comp. Syst. Sci. – 1976. – 13. – P.300-317.
5. NIST FIPS PUB 186-2. Digital Signature Standard (DSS). – National Institute of Standards and Technology, U. S. Department of Commerce, 2007. – 76 p.
6. P. Beauchemin, G. Brassard, C. Crepeau, C. Goutier, C. Pomerance. The generation of Random Numbers that are Probably Prime // Journal of Cryptology. – 1988. – 1, № 1. – P. 53-64.
7. A.K.Lenstra et. al. The Number Field Sieve // Proc. of the 22nd ACM Symposium on the Theory of Computing. – 1990. – P.572-574.
8. I. B. Damgard, P. Landrock. Improved Bounds for the Rabin Primality Test // Cryptography and Coding III. – 1993. – P. 117-128.

Надійшла до редколегії 27.03.07

УДК 519.21

Іксанов О.М., канд. фіз.-мат. наук, доцент

Про інтегро-функціональне рівняння, пов'язане з нерухомими точками зглад- жуючих перетворень

Основний результат роботи стверджує: якщо невід'ємна функція, що не перевищує одиницю, є розв'язком певного інтегро-функціонального рівняння, а її поведінка в нулі є досить регулярною, то ця функція є перетворенням Лапласа-Стілт'єса нерухомої точки деякого згладжуючого перетворення.

Ключові слова: згладжуюче перетворення, нерухома точка, правильна зміна

*E-mail: iksanov@unicyb.kiev.ua

1. Результати.

Нехай $\mathfrak{Z}$ -точковий процес на прямій з точками $\{X_i : i = \overline{1, J}\}$, при цьому величина $J = \mathfrak{Z}(R)$ може бути детермінованою або випадковою, скінченною або нескінченною з додатною ймовірністю. Покладемо $C_i = e^{X_i}$.

Перетворення

$$T : P^+ \rightarrow P^+ \cup \{\delta_x\}; \quad L(U) \mapsto L\left(\sum_{i=1}^J C_i U_i\right),$$

де P^+ позначає множину ймовірнісних розподілів, зосереджених на невід'ємній півосі, $L(\cdot)$ -розподіл випадкової величини у дужках, називається згладжуючим перетворенням. Через $\{T^n : n = 1, 2, \dots\}$ будемо позначати послідовність ітерацій T , тобто $T^1 = T$, $T^n = T(T^{n-1})$, $n = 2, 3, \dots$

Розподіл $\mu \in P^+ \setminus \{\delta_0\}$ називається нерухомою точкою згладжуючого перетворення T , якщо $\mu = T\mu$. Звичайно, δ_0 задовольняє останню рівність.

Нерухомі точки згладжуючих перетворень з $J < \infty$ майже напевно вивчені досить добре (див., наприклад, [1] для огляду результатів). Для

Iksanov O.M., cand. phys.-math. sci., ass. professor

On an integro-functional equation related to fixed points of the smoothing transforms

The main result states that if a non-negative function not exceeding one is a solution to certain integro-functional equation, and its behaviour near zero is sufficiently regular, then it is the Laplace-Stieltjes transform of a fixed point of a smoothing transform.

Key words: smoothing transform, fixed point, regular variation

випадку, коли J не є скінченною величиною, найбільш повні результати були отримані в [2].

Надалі припускається виконаною така умова

$$P\{J = 1\} < 1. \quad (1)$$

Якщо вона не виконується, то, якщо $C_i = 1$ м.н., кожен розподіл є нерухомою точкою, а якщо $C_i \neq 1$ з додатною ймовірністю, нерухомих точок немає.

Нехай розподіл μ є нерухомою точкою з перетворенням Лапласа-Стілт'єса φ , тоді

$$\varphi(s) = E \prod_{i=1}^J \varphi(s C_i), \quad s \geq 0. \quad (2)$$

Сформулюємо основні результати роботи.

Твердження 1. Припустимо, що

$$E \sum_{i=1}^J C_i^\theta \leq 1 \text{ для деякого } \theta > 0 \text{ та } EJ > 1.$$

(а) Нехай невід'ємна функція $f(s)$, про яку апріорі може бути невідомо, що вона є перетворенням Лапласа, задовольняє рівність

$$f(s) = E \prod_{i=1}^J f(s C_i), \quad s > 0. \quad (3)$$

Якщо знайдеться власний ймовірнісний розподіл μ_0 з перетворенням Лапласа-Стілт'єса $\psi(s)$, що задовольняє співвідношення

$$\lim_{s \downarrow 0} \frac{1 - \psi(s)}{1 - f(s)} = 1, \quad (4)$$

то $T^n \mu_0 \Rightarrow \mu$ при $n \rightarrow \infty$, і μ є нерухомою точкою T з перетворенням Лапласа-Стілт'єса $f(s)$.

(б) Якщо φ_1 та φ_2 -перетворення Лапласа-Стілт'єса нерухомих точок, і нерівність $\varphi_1(s) \leq \varphi_2(s)$ виконується для всіх s у деякому правому околі нуля, то вона виконується для всіх $s \geq 0$.

Важливим наслідком до твердження 1 є таке спостереження: якщо нерухомою точкою перетворення з ПЛС f існує, то вона може бути отримана методом послідовних наближень, стартуючи з довільного ймовірнісного розподілу, чий ПЛС φ задовольняє (4).

Наступний результат є суттєвим покращенням леми А.3 [2].

Твердження 2. Припустимо, що $EL > 1$. Якщо невід'ємна функція $f(s)$ задовольняє (3), $1 - f(s)$ правильно змінюється в нулі з показником $\alpha \in (0, 1]$, та $f(s) \leq 1$ при $s > 0$, то $f(s)$ є перетворенням Лапласа-Стілт'єса нерухомою точкою.

Нехай $\alpha \in (0, 1]$ задане. Розподіл називається α -елементарною нерухомою точкою перетворення T , якщо його перетворення Лапласа-Стілт'єса φ_n задовольняє співвідношення $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1 - \varphi_n(s)}{s^\alpha} = m$ для деякого скінченного $m > 0$. Множина елементарних нерухомих точок складається з усіх α -елементарних нерухомих точок, $\alpha \in (0, 1]$.

Останній результат є уточненням твердження 3(c) [2].

Твердження 3. Якщо перетворення T має елементарну нерухому точку, то воно не має неелементарних нерухомих точок з перетвореннями Лапласа-Стілт'єса φ такими, що $1 - \varphi$ правильно змінюється в нулі.

2. Доведення.

Доведення твердження 1. (а) Будемо використовувати термінологію, пов'язану з гіллястими випадковими блуканнями (означення може бути знайдене, наприклад, у [3]). Зокрема, A_n позначає позицію індивідуума n у гіллястому випадковому блуканні, побудованому за точковим процесом $\mathcal{Z}$, $|n|$ - номер покоління, у якому мешкає

індивідуум n , F_n - σ -алгебра, породжену першими n поколіннями.

За теоремою 3 [4] $\limsup_{n \rightarrow \infty} e^{D_n} = 0$ м.н. Тому для довільного фіксованого $s > 0$, довільного $\varepsilon > 0$ та індивідуумів n з n -го покоління, де n достатньо велике

$$1 - \varepsilon \leq \frac{\ln \varphi(se^{-1})}{\ln f(se^{-1})} \leq 1 + \varepsilon \quad (5)$$

Оскільки

$$f(s) = E \prod_{n=1}^{\infty} f(se^{-1}), \quad s > 0, \quad (6)$$

то $\{k_n(s) := \prod_{i=1}^n f(se^{-i}), F_n\}; n = 1, 2, \dots\}$ є невід'ємним обмеженим мартингалом, і, отже, $k_n(s)$ збігається м.н. та в середньому до деякої випадкової величини $k(s)$. При цьому $E k(s) = f(s)$. Покладемо $l_n(s) := \prod_{i=1}^n \varphi(se^{-i})$ та зазначимо, що $El_n(s)$

є ПЛС розподілу $T^n \mu_0$. З (5) випливає $l_n(s) =$

$$= \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\ln \varphi(se^{-1})}{\ln f(se^{-1})} \ln f(se^{-1})\right) \in [k_n^{(1)}(s), k_n^{(2)}(s)].$$

Переходячи у цій подвійній нерівності до границі спочатку при $n \rightarrow \infty$, а потім при $\varepsilon \rightarrow 0$, отримуємо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} l_n(s) = k(s) \text{ м.н.}$$

За теоремою Лебега про обмежену збіжність при $s > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} El_n(s) = E(\lim_{n \rightarrow \infty} l_n(s)) = Ek(s) = f(s).$$

Тому $f(s)$ є цілком монотонною функцією. Оскільки за припущенням $\varphi(0) = 1$, то з співвідношення (4) випливає $f(0) = 1$. Таким чином, $f(s)$ є ПЛС власного ймовірнісного розподілу. Оскільки $f(s)$ задовольняє (3), цей розподіл є нерухомою точкою згладжуючого перетворення.

(б) Доведення подібне попередньому. Внаслідок припущення, для всіх достатньо великих n та довільного фіксованого $s > 0$

$$k_{l,n}(s) := \prod_{i=1}^n \varphi_i(sA_n) \leq \prod_{i=1}^n \varphi_i(sA_n) = k_{n,n}(s)$$

Оскільки $\{k_{n,n}(s); n = 1, 2, \dots\}, l = 1, 2$ - невід'ємні обмежені мартингали з $Ek_{n,n}(s) = \varphi(s)$, то

$\varphi_1(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} Ek_{1,n}(s) \leq \lim_{n \rightarrow \infty} Ek_{2,n}(s) = \varphi_2(s)$ для всіх $s > 0$. Твердження 1 доведене.

Доведення твердження 2 є модифікацією доведення леми А.3 [2] з урахуванням твердження 1(a).

Оскільки $1 - f(s)$ правильно змінюється в нулі, $f(0) = 1$. З (3) отримуємо

$$1 = E \sum_{i=1}^j \frac{1 - f(sC_i)}{1 - f(s)} \prod_{k=1}^{i-1} f(sC_k).$$

Тому за лемою Фату $E \sum_{i=1}^j C_i^\alpha \leq 1$.

Припустимо спочатку, що $\alpha \in (0, 1)$, та покажемо, як побудувати ПЛС ψ , що задовольняє (4). Функція

$$h(s) := \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-us} (1 - f(1/x)) dx du, \quad s > 0,$$

є невід'ємною, має цілком монотонну похідну та задовольняє співвідношення

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{h(s)}{1 - f(s)} = 1.$$

Якщо $\lim_{s \rightarrow 0} h(s) \in (1, \infty]$, то існує скінченне $s_1 > 0$ таке, що $h(s_1) = 1$. Оскільки клас невід'ємних функцій з цілком монотонними похідними замкнений відносно операції суперпозиції, то у цьому випадку функція $\psi(s) := 1 - h(s_1(1 - e^{-s/s_1}))$ є шуканим ПЛС. Якщо $\lim_{s \rightarrow 0} h(s) \in (0, 1]$, оберемо $\psi(s) := 1 - h(s)$. За твердженням 1(a) $f(s)$ є ПЛС нерухомої точки.

Припустимо тепер, що $\alpha = 1$. Для кожного $\gamma \in (0, 1)$ покладемо $f_\gamma(s) := f(s^\gamma)$. Оскільки f_γ задовольняє рівність

$$f_\gamma(s) = E \prod_{i=1}^j f_\gamma(sC_i^{1/\gamma}),$$

а $1 - f_\gamma$ правильно змінюється в нулі з показником $\gamma \in (0, 1)$, то за попередньою частиною доведення кожна функція $f_\gamma(s)$ є ПЛС. З неперервності f_γ випливає неперервність f . Тому $f(s) = \lim_{\gamma \uparrow 1} f_\gamma(s)$, звідки отримуємо те, що $f(s)$ є цілком монотонною. Оскільки $f(0) = 1$, $f(s)$ є ПЛС власного імовірнісного розподілу. Оскільки

$f(s)$ задовольняє (3), вона є ПЛС нерухомої точки згладжуючого перетворення. Твердження 2 доведене.

Для доведення твердження 3 потрібні допоміжні результати. Розпочнемо з елементарного факту, що не потребує доведення.

Лема 1. Якщо розподіл V є нерухомою точкою згладжуючого перетворення, то розподіл cV також для довільного $c > 0$.

Лема 2. Якщо існує нерухома точка μ та виконується (1), то $EJ > 1$.

Доведення. Зрозуміло, що потрібно розглянути лише випадок $EJ < \infty$. Нехай $g(s) := Es^J$ -гвірна функція J . Припустимо, що $1 \geq EJ = g'(1)$. Тоді, враховуючи (1), необхідно $g(0) > 0$, і $s = 1$ є єдиним розв'язком рівняння $g(s) = s$ на $[0, 1]$. Це випливає з елементарних геометричних міркувань. Нехай $\gamma := \mu\{0\} = \lim_{s \rightarrow 0} \varphi(s)$. З (2) отримуємо

$\gamma = E\gamma^J$. Отже, $\gamma = 1$. Тому $\mu = \delta_0$. Суперечність.

Лема 3. Припустимо, що для $\alpha \in (0, 1]$ $E \sum_{i=1}^j C_i^\alpha = 1$

$$\text{та } \lim_{n \rightarrow \infty} B_1^{1/\alpha} B_2^{1/\alpha} \dots B_n^{1/\alpha} = 0 \text{ м.н.}, \quad (7)$$

де $\{B_n^{1/\alpha} : n = 1, 2, \dots\}$ - незалежні копії випадкової величини $B^{1/\alpha}$, чий розподіл задається рівністю

$$Ek(B^{1/\alpha}) = E \sum_{i=1}^j C_i^\alpha k(C_i^\alpha),$$

що припускається виконаною для всіх невід'ємних, обмежених, борелівських функцій $k(\cdot)$. Якщо функція $1 - \varphi$ правильно змінюється в нулі, де φ - перетворення Лапласа-Стілт'єса нерухомої точки відповідного згладжуючого перетворення, то $\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1 - \varphi(s)}{s^\alpha L(s)} = 1$, де $L(s)$ -функція, що повільно змінюється в нулі, може бути вибрана такою, що $\lim_{s \rightarrow 0} L(s) \in (0, \infty]$.

Доведення. Оскільки нерухома точка існує, то за лемою 2 $EJ > 1$. Припустимо, що $1 - \varphi(s)$ правильно змінюється з показником $\beta \in [0, \alpha)$. З (2) отримуємо

$$1 = E \sum_{i=1}^j \frac{1 - \varphi(sC_i)}{1 - \varphi(s)} \prod_{k=1}^{i-1} \varphi(sC_k).$$

Тому за лемою Фату $E \sum_{i=1}^j C_i^\beta \leq 1$. Якщо $\beta = 0$, то

ця нерівність суперечить $EJ > 1$. Якщо $\beta \in (0, \alpha)$, то функція $r(y) := E \sum_{i=1}^l \zeta_i^{y+\beta}$ є лог-опуклою на $[J, \alpha]$. Отже, для довільного $\varepsilon \in (0, \alpha - \beta)$

$$E(B^{(\alpha)})^{y+\alpha} = E \sum_{i=1}^l \zeta_i^{y+\alpha} < 1.$$

Тому за нерівністю Йенсена $E \ln B^{(\alpha)} > 0$, що суперечить (7). Таким чином, $\beta \geq \alpha$. Отже, якщо $\alpha = 1$, то $1 - \varphi(s) = sL(s)$, де $L(s)$ -функція, що повільно змінюється в нулі. Оскільки така L не зростає, границя $\lim_{s \downarrow 0} L(s)$ існує, але може бути нескінченною. Розглянемо тепер випадок $\alpha \in (0, 1)$. Покладемо

$$\Phi_\alpha(s) = s^{-\alpha}(1 - \varphi(s)),$$

$$\Psi_\alpha(s) = s^{-\alpha}(E \prod_{i=1}^l \varphi(s\zeta_i^\alpha) - 1) = \sum_{i=1}^l (1 - \varphi(s\zeta_i^\alpha)).$$

Припустимо, що $1 - \varphi(s)$ правильно змінюється з показником $\beta \in (\alpha, 1]$. Тоді $\lim_{s \downarrow 0} \Phi_\alpha(s) = 0$ і, отже, функція $\Phi_\alpha(s)$ обмежена. З (2) випливає рівність

$$\Phi_\alpha(s) = E\Phi_\alpha(sB_1^{(\alpha)} \dots B_n^{(\alpha)}) = \Psi_\alpha(s),$$

ітеруючи яку n разів, отримуємо

$$\Phi_\alpha(s) = E\Phi_\alpha(sB_1^{(\alpha)} B_2^{(\alpha)} \dots B_n^{(\alpha)}) = \sum_{i=1}^n E\Psi_\alpha(sB_1^{(\alpha)} B_2^{(\alpha)} \dots B_n^{(\alpha)}), \quad n = 1, 2, \dots$$

Покладемо $s = 1$. Згідно з (7) за теоремою Лебега про обмежену збіжність

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E\Phi_\alpha(sB_1^{(\alpha)} B_2^{(\alpha)} \dots B_n^{(\alpha)}) = 0.$$

Оскільки для довільних $u_i \in [0, 1]$ таких, що $\sum (1 - u_i) < \infty$, виконується нерівність

$$\prod u_i = 1 - \sum (1 - u_i) \geq 0, \quad \text{то } \Psi_\alpha(s) \geq 0. \quad \text{Тому гра-}$$

ница $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n E\Psi_\alpha(B_1^{(\alpha)} B_2^{(\alpha)} \dots B_n^{(\alpha)})$ є додатною (можливо нескінченною). Це суперечить тому, що $\Phi_\alpha(1) > 0$. Таким чином, $1 - \varphi(s)$ правильно змінюється в нулі з показником α . Функція $\varphi_\alpha(s) := 1 - \varphi(s^{1/\alpha})$ задовольняє рівність

$$\varphi_\alpha(s) = E \prod_{i=1}^l \varphi_\alpha(s\zeta_i^\alpha)$$

$1 - \varphi_\alpha(s) = sL_\alpha(s)$, де $L_\alpha(s)$ -функція, що повільно змінюється в нулі. За твердженням 2 $\varphi_\alpha(s)$ -ПІС. Тому $L_\alpha(s)$ не зростає. Тому $L(s) = s^{-\alpha}(1 - \varphi(s)) = L_\alpha(s^\alpha)$ також не зростає, отже, $\lim_{s \downarrow 0} L(s)$ існує.

Доведення твердження 3. Якщо існує α -елементарна точка, то за теоремою 2 [2] $E \sum_{i=1}^l \zeta_i^\alpha = 1$ та виконується (7). Згідно з лемою 1 для кожного $m > 0$ існує нерухома точка з ПІС $\varphi^{(m)}(s)$ таким, що $\lim_{s \downarrow 0} s^{-\alpha}(1 - \varphi^{(m)}(s)) = m$. Нехай ψ -ПІС неелементарної нерухомої точки. Згідно з лемою 3 для кожного $m > 0$ $1 - \varphi^{(m)}(s) \leq 1 - \psi(s)$ в деякому околі нуля, що не залежить від m . За твердженням 1(б) ця нерівність виконується для всіх $s > 0$. Оскільки $\lim_{m \rightarrow \infty} \varphi^{(m)}(s) = 0$, $\psi(s) = 0$ при $s > 0$. Суперечність.

Список використаних джерел

1. Liu Q. Fixed points of a generalized smoothing transformation and applications to the branching random walk // Adv. Appl. Prob. --1998. --V. 30, n. 1 -- p. 85-112.
2. Iksanov A.M. Elementary fixed points of the BRW smoothing transforms with infinite number of summands // Stoch. Proc. Appl. --2004. --V. 114, n. 1. -- p. 27-50.
3. Іксанов О.М. Про швидкість збіжності регулярного мартингала, пов'язаного з галлястим випадковим блуканням // Укр. мат. журн. --2006. --Т. 58, № 3. -- с. 326-342.
4. Biggins J.D. Lindley-type equations in the branching random walk // Stoch. Proc. Appl. --1998. --V. 75, n. 1. --p. 105-133.

Надійшла до редакції 05.01.2007

Касьянюк В.С., кандидат фіз.-мат. наук,
Польща М.В., інженер

Застосування теорії можливостей в задачах кластеризації даних

В ході розв'язку прикладних задач розбиття певної множини даних на класи еквівалентності за допомогою алгоритмів кластеризації часто виникає проблема адекватного вибору параметрів алгоритму кластеризації. При невдалому виборі параметрів розбиття не буде відповідати вимогам експериментаторів, але навіть при вдалому виборі таких параметрів виникають питання щодо вірного віднесення певних підмножин множини даних до того чи іншого кластера. В роботі пропонується підхід до кластеризації, що базується на теорії можливостей та дозволяє врахувати неоднозначність вибору параметрів алгоритму кластеризації.

Ключові слова: кластеризація, теорія можливостей.

Veda S. Kasyanyuk, Ph.D.(Physics and Mathematics), Maxim V. Polshcha, engineer

Theory of possibilities in data clusterization

While solving a task of splitting of certain dataset with the help of clusterization algorithms sometimes occurs the problem of proper selection of clusterization parameters. Wrong parameter's selection willn't satisfy experimentator's expectations. But even if parameter's selection is right it can occur uncertainty with some subsets of original dataset while bulding clusters. This article is devoted to theory of possibilities approach to the clusterization. Theory of possibilities lets take into account an parameter's selection ambiguity.

Keywords: clusterization, theory of possibilities.

Нечіткі розбиття

Нехай $(X, 2^X, P)$ — деякий можливісний простір [1]-[2], D — певна скінчена множина даних. Позначимо через $\mathcal{D} \subset 2^D$ множину допустимих розбиттів на класи еквівалентності D , тобто

$$\forall A \in \mathcal{D} : \bigcup_{i=1}^n A_i = D, A_i \in \mathcal{A}, n = |A|, \\ \forall i, j A_i \cap A_j = \emptyset, i \neq j, 1 \leq i \leq n,$$

Означення 1. Нечітким розбиттям на класи еквівалентності (скорочено нечітким розбиттям) будемо називати нечітку множину [3]

$$R : X \rightarrow \mathcal{D}. \quad (1)$$

З іншого боку нечітке розбиття можна визначити через канонічний нечіткий елемент [4] можливісного простору $(X, 2^X, P)$.

Нехай ξ — канонічний нечіткий елемент можливісного простору $(X, 2^X, P)$ з розподілом $\phi^\xi(x)$. Також припустимо, що $\alpha : X \rightarrow \mathcal{D}$ деякий параметризований алгоритм (алгоритм кластеризації), що будує певне розбиття D на класи еквівалентності в залежності від значення

вектора параметрів $x \in X$. Тоді нечітким розбиттям D можна назвати нечітку множину $\alpha(\xi)$.

Очевидно, таке визначення нечіткого розбиття еквівалентно (1), та завдяки такому визначенню ми отримуємо інтерпретацію X як множини допустимих значень вектора параметрів x алгоритма α , а $\phi^\xi(x)$ — як розподілу вектора параметрів.

Окремо зазначимо, що при різних значеннях x ми можемо отримати не тільки різні варіанти розбиття $\alpha(x)$, а навіть різну кількість множин в розбитті.

Належність точок кластерів

Практичний інтерес має питання належності точки до деякої множини — елемента отриманого розбиття, тобто належності точки до того чи іншого кластера. При зазначеному підході ми не можемо однозначно відповісти у всіх випадках чи належить точка до кластера, оскільки в загальному випадку кожен кластер є нечіткою підмножиною D , тобто кожен кластер

C є відображенням $C: X \rightarrow D$. Але ми можемо визначити можливість належності точки до певної підмножини D .

Нехай $\mathbb{C}$ — множина всіх можливих кластерів, що утворюються алгоритмом α при всіх допустимих значеннях вектора параметрів x :

$$\mathbb{C} = \bigcup_{x \in X} \alpha(x).$$

Тоді можливість події $d \in C$, $C \in \mathbb{C}$ дорівнює:

$$\begin{aligned} P(d \in C) &= P\left(\bigcup_{x \in X} \{\alpha(x) \cap C \ni d\}\right) = \\ &= \sup_{\{x \in X, \alpha(x) \cap C \ni d\}} \phi^{\xi}(x) = \\ &= \sup_{\{x \in X, \alpha(x) \ni d\}} \phi^{\xi}(x) \chi_C(d). \end{aligned} \quad (2)$$

Тут $\chi_C(d)$ — характеристична функція множини C :

$$\chi_C(d) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } d \in C, \\ 1, & \text{якщо } d \notin C. \end{cases}$$

Аналогічним чином можна визначити необхідність події $d \in C$, $C \in \mathbb{C}$:

$$\begin{aligned} N(d \in C) &= N\left(\bigcup_{x \in X} \{\alpha(x) \cap C \ni d\}\right) = \\ &= \theta\left(P\left(D \setminus \bigcup_{x \in X} \{\alpha(x) \cap C \ni d\}\right)\right) = \\ &= \theta\left(\sup_{\{D \setminus \bigcup_{x \in X} \{\alpha(x) \cap C \ni d\}}} \phi^{\xi}(x)\right) = \\ &= \inf_{\{x \in X, d \notin \alpha(x) \cup C\}} \phi^{\xi}(x) = \\ &= \inf_{\{x \in X, d \notin \alpha(x)\}} \phi^{\xi}(x) \chi_{D \setminus C}(d). \end{aligned} \quad (3)$$

Тут $\theta: [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ — довільна строгомонотонно спадна бієкція, причому $\theta(0) = 1$, $\theta(1) = 0$.

Вищеотриманий результат добре узгоджується з поняттями можливості та необхідності, що розглядає модальна логіка: подія A вважається необхідною, якщо протилежна до нього подія $D \setminus A$ є неможливою. Тобто найбільші значення необхідності попадання до кластера C будуть мати такі точки, можливість попадання яких до $D \setminus C$ найменша.

Сформулюємо отриманий результат у вигляді теореми:

Теорема 1. Можливість та необхідність попадання точки d в кластер C дорівнюють відповідно:

$$\begin{aligned} P(d \in C) &= \sup_{\{x \in X, \alpha(x) \ni d\}} \phi^{\xi}(x) \chi_C(d), \\ N(d \in C) &= \inf_{\{x \in X, d \notin \alpha(x)\}} \phi^{\xi}(x) \chi_{D \setminus C}(d). \end{aligned}$$

Нечіткі кластери

Кластери C , що розглядалися вище, є елементами множини всіх можливих кластерів $\mathbb{C}$. Така точка зору на кластер має той суттєвий недолік, що не враховує поведінки кожного конкретного робиття при зміні вектора параметрів $x \in X$. Для того, щоб врахувати це, введемо поняття нечіткого кластера.

Означення 2. Нечітким кластером будемо називати будь-яку нечітку множину з системи відображень

$$C_i: X \rightarrow D, i = 1, \dots, n,$$

що має наступні властивості:

- 1) $\forall x \in X C_i(x) \in \alpha(x), i = 1, \dots, n$
- 2) $\forall x \in X \bigcup_{i=1}^n C_i(x) = D$
- 3) $\forall x \in X C_i(x) \cap C_j(x) = \emptyset, i \neq j.$

а саму систему відображень $\{C_i\}_{i=1}^n$ будемо називати нечітким розбиттям.

Неважко бачити, що означення 1 та 2 є еквівалентними.

З іншого боку нечіткий кластер C_i можна розглядати як нечітку величину на множині D , що породжується ξ — канонічним нечітким елементом простору $(X, 2^X, P)$, а саме $C_i(\xi)$. При цьому розподіл C_i має вигляд:

$$\begin{aligned} \phi^{C_i}: \mathbb{C} &\rightarrow [0, 1], \\ \phi^{C_i}(C) &= \sup_{\{x \in X, C_i(x) = C\}} \phi^{\xi}(x). \end{aligned}$$

Належність точок до нечітких кластерів

Розглянемо подію попадання точки d до нечіткого кластера C_i та визначимо її основні характеристики: можливість та необхідність.

Подія $d \in C_i(\xi)$ може бути представлена як об'єднання подій:

$$d \in C_i(\xi) = \bigcup_{x \in X} \{d \in C_i(x)\},$$

а отже $P(d \in C_i(\xi))$ може бути визначена як

$$\begin{aligned} P(d \in C_i(\xi)) &= P\left(\bigcup_{x \in X} \{d \in C_i(x)\}\right) = \\ &= \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} P(d \in C) = \\ &= \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} \sup_{\{x|x \in X, \alpha(x) \ni d\}} \phi^\xi(x) \chi_C(d), \end{aligned}$$

що безпосередньо впливає з теореми 1 та співвідношення (2).

В такий самий спосіб отримаємо значення необхідності події $d \in C_i(\xi)$.

$$\begin{aligned} N(d \in C_i(\xi)) &= N\left(\bigcup_{x \in X} \{d \in C_i(x)\}\right) \geq \\ &\geq \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} N(d \in C) = \\ &= \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} \inf_{\{x|x \in X, d \notin \alpha(x)\}} \phi^\xi(x) \chi_{D \setminus C}(d), \end{aligned} \quad (4)$$

що також безпосередньо впливає з теореми 1 та співвідношення (3). А у випадку, коли для будь-яких $x_1, x_2 \in X$ події $d \in C_i(x_1)$ та $d \in C_i(x_2)$ є N -незалежними [5], нерівність (4) набуває вигляду строгої рівності.

Сформулюємо отриманий результат у вигляді теореми.

Теорема 2. Можливість попадання точки d в нечіткий кластер C_i дорівнює

$$\begin{aligned} P(d \in C_i(\xi)) &= \\ &= \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} \sup_{\{x|x \in X, \alpha(x) \ni d\}} \phi^\xi(x) \chi_C(d), \end{aligned}$$

а необхідність, за умови N -незалежності подій $d \in C_i(x_1)$ та $d \in C_i(x_2)$, дорівнює

$$\begin{aligned} N(d \in C_i(\xi)) &= \\ &= \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} \inf_{\{x|x \in X, d \notin \alpha(x)\}} \phi^\xi(x) \chi_{D \setminus C}(d). \end{aligned}$$

Розглянемо подію перетину нечіткого кластера з деякою множиною D , а саме подію $\hat{D} \cap C_i(\xi) \neq \emptyset$. $\hat{D} \subset D$, та виразимо

можливість та необхідність цієї події. Ця подія може бути виражена як об'єднання подій

$$\hat{D} \cap C_i(\xi) \neq \emptyset = \bigcup_{d \in \hat{D}} \{d \in C_i(\xi)\},$$

а отже можливість може бути виражена як

$$\begin{aligned} P(\hat{D} \cap C_i(\xi) \neq \emptyset) &= \sup_{d \in \hat{D}} P(d \in C_i(\xi)) = \\ &= \sup_{d \in \hat{D}} \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} \sup_{\{x|x \in X, \alpha(x) \ni d\}} \phi^\xi(x) \chi_C(d), \end{aligned}$$

а необхідність за дотримання умови теореми 2 як

$$\begin{aligned} N(\hat{D} \cap C_i(\xi) \neq \emptyset) &= \sup_{d \in \hat{D}} N(d \in C_i(\xi)) = \\ &= \sup_{d \in \hat{D}} \sup_{\{C|C=C_i(x), x \in X\}} \inf_{\{x|x \in X, d \notin \alpha(x)\}} \phi^\xi(x) \chi_{D \setminus C}(d). \end{aligned}$$

Оцінювання точок

Розглянемо задачу вибору таких точок заданої підмножини $D' \subset D$, які є «найбільш гарантованими» представниками деякого кластера C_i .

Міри можливості та необхідності події $d \in C_i(\xi)$ з виразів (2)-(3) та теореми 2 можуть бути використані для отримання відповіді на запитання, яка з точок $d_1 \in D$ або $d_2 \in D$ скоріше за все попаде до кластера C_i .

Міра можливості (2) породжує на D відношення часткового порядку $\preceq$:

$$d_1 \preceq d_2 \Leftrightarrow P(d_1 \in C_i(\xi)) \leq P(d_2 \in C_i(\xi)).$$

Аналогічно міра необхідності (3) породжує на D відношення часткового порядку $\preceq'$:

$$d_1 \preceq' d_2 \Leftrightarrow N(d_1 \in C_i(\xi)) \leq N(d_2 \in C_i(\xi)).$$

Визначимо P -оптимальну (оптимальну за можливістю) та N -оптимальну (оптимальну за необхідністю) стратегії вибору точок наступним чином:

$$\begin{aligned} D_P &= \sup_{\preceq} D', \\ D_N &= \sup_{\preceq'} D'. \end{aligned} \quad (5)$$

Інакше кажучи, множину D_P можна отримати як розв'язок задачі оптимізації

$$P(d \in C_i(\xi)) \rightarrow \max_{d \in D'}.$$

а множину D_N , при дотриманні умов теореми 2, як розв'язок задачі оптимізації

$$N(d \in C_i(\xi)) \rightarrow \max_{d \in D'}$$

Також може бути зручно розглядати двокритеріальну парето-оптимальну стратегію вибору точок, в якій будуть враховані обидві характеристики: як можливість, так і необхідність. Для її визначення введемо ще одне відношення часткового порядку на D :

$$d_1 \leq d_2 \Leftrightarrow d_1 \preceq d_2 \wedge d_1 \preceq' d_2. \quad (6)$$

Тоді множина парето-оптимальних розв'язків виглядатиме як

$$D_{PN} = \{d | d \in D', \neg \exists d' \in D' : d \leq d'\}. \quad (7)$$

Нечітке відношення еквівалентності

Алгоритм $\alpha(x)$ породжує на D відношення еквівалентності. Отже, має сенс розглянути питання, чи попадуть дві різні точки d_1, d_2 до одного кластера, тобто чи будуть вони еквівалентними відносно отриманого розбиття. У випадку нечітких кластерів однозначної відповіді на це питання не існує, але ми можемо визначити можливість та необхідність події $d_1 = d_2$ за допомогою теорем 1-2. Для цього виразимо подію $d_1 = d_2$ через ті події, можливість і необхідність яких ми вже вміємо визначати:

$$d_1 = d_2 \triangleq \bigcup_{i=1}^n (\{d_1 \in C_i(\xi)\} \cap \{d_2 \in C_i(\xi)\})$$

Розглянемо наступні співвідношення для отримання значення можливості події $d_1 = d_2$:

$$\begin{aligned} P(d_1 = d_2) &= \\ &= P\left(\bigcup_{i=1}^n (\{d_1 \in C_i(\xi)\} \cap \{d_2 \in C_i(\xi)\})\right) = \\ &= \sup_{i=1, \dots, n} P(\{d_1 \in C_i(\xi)\} \cap \{d_2 \in C_i(\xi)\}) \leq \\ &\leq \sup_{i=1, \dots, n} \min(P(d_1 \in C_i(\xi)), P(d_2 \in C_i(\xi))). \end{aligned} \quad (8)$$

За умови P -незалежності [5] подій $d_1 \in C_i(\xi)$ та $d_2 \in C_i(\xi)$ співвідношення (8) набуває вигляд строгої рівності.

Розглянемо наступні співвідношення для отримання значення необхідності події $d_1 = d_2$:

$$\begin{aligned} N(d_1 = d_2) &= \\ &= N\left(\bigcup_{i=1}^n (\{d_1 \in C_i(\xi)\} \cap \{d_2 \in C_i(\xi)\})\right) = \\ &= \sup_{i=1, \dots, n} N(\{d_1 \in C_i(\xi)\} \cap \{d_2 \in C_i(\xi)\}) = \\ &= \sup_{i=1, \dots, n} \min(N(d_1 \in C_i(\xi)), N(d_2 \in C_i(\xi))). \end{aligned} \quad (9)$$

За умови N -незалежності подій $d_1 \in C_i(\xi)$ та $d_2 \in C_i(\xi)$ співвідношення (9) набуває вигляд строгої рівності.

Сформулюємо отриманий результат у вигляді теореми.

Теорема 3. Припустимо, що події $d_1 \in C_i(\xi)$ та $d_2 \in C_i(\xi)$ є повністю незалежними (тобто є P - та N -незалежними). Тоді значення можливості та необхідності події $d_1 = d_2$ визначаються як

$$\begin{aligned} P(d_1 = d_2) &= \\ &= \sup_{i=1, \dots, n} \min(P(d_1 \in C_i(\xi)), P(d_2 \in C_i(\xi))), \\ N(d_1 = d_2) &= \\ &= \sup_{i=1, \dots, n} \min(N(d_1 \in C_i(\xi)), N(d_2 \in C_i(\xi))). \end{aligned}$$

Оцінювання еквівалентності точок

Розглянемо задачу вибору таких пар точок заданої підмножини $D' \subset D$, які «найбільш гарантовано» будуть рівними, тобто попадуть до одного кластера.

Міри можливості та необхідності події $d_1 = d_2$ за допомогою виразів (8)-(9) та теореми 3 можуть бути використані для отримання відповіді на запитання: яка з пар точок (d_1, d_2) або (d'_1, d'_2) скоріше за все попаде до одного кластера.

Міра можливості (8) породжує відношення часткового порядку $\preceq$ на множині $D \times D$:

$$(d_1, d_2) \preceq (d'_1, d'_2) \Leftrightarrow P(d_1 = d_2) \leq P(d'_1 = d'_2).$$

Аналогічно міра необхідності (9) породжує на $D \times D$ відношення часткового порядку $\preceq'$:

$$(d_1, d_2) \preceq' (d'_1, d'_2) \Leftrightarrow N(d_1 = d_2) \leq N(d'_1 = d'_2).$$

Визначимо P -оптимальну (оптимальну за можливістю) та N -оптимальну (оптимальну

за необхідністю) стратегії вибору пар точок аналогічно тому, як це було зроблено раніше (див. формулу (5)):

$$D_P^2 = \sup_{\preceq} D' \times D',$$

$$D_N^2 = \sup_{\preceq'} D' \times D'.$$

Інакше кажучи, множину D_P^2 можна отримати як рішення задачі оптимізації

$$P(d_1 = d_1) \rightarrow \max_{(d_1, d_2) \in D' \times D'},$$

а множину D_N^2 при дотриманні умов теореми 2 — як рішення задачі оптимізації

$$N(d_1 = d_2) \rightarrow \max_{(d_1, d_2) \in D' \times D'}.$$

Визначимо двокритеріальну парето-оптимальну стратегію вибору пар точок аналогічно тому, як це робили раніше (див. формули (6)-(7)). Для її визначення введемо ще одне відношення часткового порядку на $D \times D$:

$$(d_1, d_2) \leq (d'_1, d'_2) \Leftrightarrow$$

$$(d_1, d_2) \preceq (d'_1, d'_2) \wedge (d'_1, d'_2) \preceq' (d_1, d_2).$$

Тоді множина парето-оптимальних рішень виглядатиме як

$$D_{PN}^2 = \{(d_1, d_2) | (d_1, d_2) \in D' \times D',$$

$$\neg \exists (d'_1, d'_2) \in D' \times D' :$$

$$(d_1, d_2) \leq (d'_1, d'_2)\}.$$

Така стратегія вибору пар точок враховує обидві характеристики: як можливість так і необхідність.

Висновки

В роботі запропоновано підхід до розв'язку задачі кластеризації у випадку, коли параметри алгоритму кластеризації представлені у вигляді нечіткої величини або вектора нечітких величин. Побудована математична модель базується на поняттях нечіткого кластера та нечіткого розбиття, що введені в роботі. В рамках наведеної моделі запропоновано методи оцінювання основних теоретико-можливісних характеристик (можливості та необхідності) ряду тверджень відносно точок та нечітких кластерів. А саме: належності точки до

нечіткого кластера, непорожнього перетину нечіткого кластера з певною множиною та еквівалентності двох точок відносно отриманого нечіткого розбиття. Розглянуто задачі вибору «найкращих» точок та пар точок заданої множини.

Список використаних джерел

1. *Пытьев Ю.П.* Основы теории возможностей. Методы оптимального оценивания и принятия решений. Мера возможности определение и свойства. // Вестник московского университета, Серия 3, Физика. Астрономия. — 1997. — №3.
2. *Пытьев Ю.П.* Основы теории возможностей. Методы оптимального оценивания и принятия решений. Мера необходимости: определение, свойства интегрирование по возможности и по необходимости. // Вестник московского университета, Серия 3, Физика. Астрономия. — 1997. — №4.
3. *Пытьев Ю.П.* Возможность. Элементы теории и применения. — М.: Едиториал УРСС, 2000.
4. *Пытьев Ю.П.* Основы теории возможностей. Методы оптимального оценивания и принятия решений. нечёткие элементы, независимость, условные распределения. // Вестник московского университета, Серия 3, Физика. Астрономия. — 1998. — №2.
5. *Пытьев Ю.П.* Основы теории возможностей. Методы оптимального оценивания и принятия решений. Независимость, условные возможность и необходимость. Условный относительно σ -алгебры интеграл. // Вестник московского университета, Серия 3, Физика. Астрономия. — 1997. — №6.

Надійшла до редколегії 30.05.2007 р.

УДК 519.852:519.876

Кудін В.І., к.т.н., ст.н.с., Оноцький В.В., ас.¹

Про точний алгоритм методу базисних матриць

В роботі запропоновано алгоритм та комп'ютерну реалізацію методу базисних матриць в середовищі Microsoft Visual C++ з використанням технології точного представлення обчислень. Наведено результати обчислювального експерименту, в якому тестові моделі систем лінійних алгебраїчних рівнянь генерувалися на основі матриць Гільберта великої розмірності.

Ключові слова: лінійна система, базисна матриця.

¹ E-mail: onotsky@univ.kiev.ua

Для аналізу властивостей лінійних систем рівнянь (СЛАР) та нерівностей (СЛАН) з квадратною матрицею обмежень розроблено ряд точних методів [2-4]. Відомо, що за своїми структурними властивостями моделі належать до некоректних. Однією з проявів некоректності є властивість поганої обумовленості [2,4]. Для тестування відомих схем розв'язання даного класу задач є розроблено ряд бібліотек моделей систем з поганообумовленими матрицями обмежень. Зокрема, до таких матриць належить матриця Гільберта.

В даному дослідженні авторами розроблено алгоритмічну схему проведення обчислень за схемою методу базисних матриць (МБМ) [3] з використанням технології довгої арифметики для моделей з раціональними елементами, яку реалізовано у вигляді бібліотеки "Longnum" на мові C++.

В сучасних ЕОМ, як правило, використовуються стандартні типи цілих чисел, розмір яких не перевищує 64 байта. Подолання такого апаратного обмеження можна вирішити програмним шляхом, а саме, розробкою власного типу даних. Прикладом є клас Large [1]. Бібліотека "Longnum" розроблена мовою C++ з використанням стандартної бібліотеки шаблонів STL (Standard Template Library), оптимізованої для роботи з динамічними списками та іншими структурними даними.

V.I. Kudin, V.V. Onotsky¹

About exact algorithm of base matrices' method

The base matrices' algorithm and its computer implementation in Microsoft Visual C++ environment with technology of exact presentation of computation are proposed in the paper. Results of computation experiment where test models of systems of linear algebraic equations were generated with using Gilbert matrices in high dimension.

Key Words: linear system, base matrix.

Постановка задачі аналізу СЛАР

Розглянемо СЛАР виду

$$A^T u^T = C, \quad (1)$$

де матриця A розмірності (n, m) , $m = n$ та допоміжну СЛАР виду:

$$Iu^T = K, \quad (2)$$

де I - одинична матриця (m, m) , $K = (1, 1, \dots, 1)^T$ - вектор розмірності m , $C^T = (c_1, c_2, \dots, c_m)^T$, $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$, $a_j = (a_{j1}, a_{j2}, \dots, a_{jm})$, $j = \overline{1, n}$ - рядки матриці A^T , T - знак транспонування.

Основою запропонованого МБМ є ідея порядкової базисної матриці. Базисні матриці в ході ітерацій послідовно змінюються вводом-виводом із неї рядків-нормалей обмежень задачі.

Означення 1. Підматрицю A_b матриці A^T , складену із m лінійно незалежних рядків-нормалей $(i_1, i_2, \dots, i_m)$ обмежень (1), будемо називати штучною базисною, а розв'язок u_b відповідної їм системи рівнянь $A_b u^T = C^0$, де $C^0 = (c_{i_1}, c_{i_2}, \dots, c_{i_m})$ штучним базисним.

В роботі [3] встановлено формули взаємозв'язків: поміж коефіцієнтами розвинення нормалей обмежень (1) за рядками штучної базисної матриці, елементами обернених матриць, базисними розв'язками, нев'язками обмежень в двох суміжних базисних матрицях.

Особливості МБМ: СЛАР (1) та (2) розглядаються сумісно, обернена матриця та розв'язок (2) є початковими, проводяться заміщення нормальними обмежень (1), рядків штучної базисної матриці (2), максимальна кількість ітерацій по знаходженню рангу системи (при невиродженості) обмежена числом m .

Теорема 1. Для існування єдиного розв'язку (1) необхідно і достатньо, щоб

$\alpha_{ik}^{(i)} \neq 0, i=1, m$, де $\alpha_{ik}^{(i)}$ ведучі елементи симплексної ітерації МБМ по заміщенню рядків базисної матриці (2) нормальними обмежень (1).

Наслідок 1. Ранг системи (1) визначається кількістю коректних заміщень рядків матриці обмежень (2) векторами нормальними (1).

Концепція представлення цілих чисел

Для реалізації довгих цілих чисел довільного розміру та відповідних раціональних чисел в C++ був використаний об'єктно-орієнтований підхід (ООП), який полягає у співставленні реальному об'єкту предметної області так званий об'єктний тип або клас об'єктів, що є узагальненням структурного типу [5].

Означення 2. Клас в C++ - це програмна конструкція, яка складається з даних (елементів даних або полів) та підпрограм, що оперують над цими полями та описують властивості відповідного об'єкту предметної області, що моделюється.

В даній роботі ціле число довільного розміру запрограмовано у вигляді класу `longint`. Раціональне число як пара (чисельник класу `longint`, знаменник класу `longint`) запрограмоване у вигляді класу `longrat`. Ціле число зберігається як вектор-контейнер `deque` із стандартної бібліотеки шаблонів STL, довжина якого може автоматично (динамічно) змінюватися в залежності від величини числа, яке треба зберігати. Елементами вектора є 32-бітні беззнакові числа стандартного типу C++ `unsigned int32`.

Означення 3. Шаблоном будемо називати спеціальний опис параметризованого класу або сімейства класів, в якому інформація про типи даних, що використовуються в реалізації навмисно залишається незаданою.

Означення 4. Контейнер - це клас, який використовується як структура даних, що містить набір елементів певного типу.

Так, наприклад, ціле число з діапазону від 2^{64} до $2^{128}-1$ буде зберігатися у векторі розміру 3.

Вектор, знак числа та операції над числами такої структури оформлені у вигляді класу `longint`.

```
class longint
{
public:
    int8 sign;
    std::deque<unsigned __int32> v;
    ..
}
```

Крім того, в даному класі реалізовані такі операції з цілими числами: додавання, віднімання, множення та ділення з остачею, порівняння, конвертація у рядок символів типу `char`.

Операції '+', '-', '*', '/' реалізовані за класичними алгоритмами додавання, віднімання, множення, ділення в стовпчик і не виключають можливість оптимізації як за часом, так і за використаними ресурсами ЕОМ.

Представлення раціональних чисел

Раціональне число представляється як пара: чисельник та знаменник типу `longint` і оформлено у вигляді класу `longrat`.

```
class longrat
{
public:
    longint num;
    longint denom;
    ..
}
```

Даний клас також оснащується стандартними операціями додавання, віднімання, множення, ділення, скорочення, порівняння, представлення у вигляді десяткового числа заданої точності, конвертація у тип `double`, конвертація у рядок символів типу `char`. Операції '+', '-', '*', '/' побудовані з використанням відповідних операцій над числами типу `longint`. Пошук найбільшого спільного дільника для операції скорочення здійснюється алгоритмом Евкліда.

Таблиця 1

Точний розв'язок СЛАР методом базисних матриць з матрицею Гільберта, $m = 50$

Компоненти розв'язку в точному вигляді	Компоненти розв'язку з плаваючою крапкою
-50	-50
124950	124950
-77968800	-7.79688e+007
21580031200	2.158e+010
-3350299843800	-3.3503e+012
331679684536200	3.3168e+014
-22701631741588800	-2.27016e+016
1135544885686411200	1.13554e+018
-43221677211439026300	-4.32217e+019
1290780705857666723700	1.29078e+021
-30978736940584001368800	-3.09787e+022
609077811418589580631200	6.09078e+023
-9965189747931923971993800	-9.96519e+024
137448859777688253128506200	1.37449e+026
-1615725372080580281673868800	-1.61573e+027
16336778762148089514702451200	1.63368e+028
-143202076336954347152313673800	-1.43202e+029
1095570210314899866968046826200	1.09557e+030
-7357903634707475649760709548800	-7.3579e+030
43597107685981413891518442451200	4.35971e+031
-228884815351402422930471822868800	-2.28885e+032
1068648151493282514317100869131200	1.06865e+033
-4451228664071193282775362297868800	-4.45123e+033
16584823623599852477032588070131200	1.65848e+034
-55397917798274507232310242095368800	-5.53979e+034
166193753394823521696930726286106400	1.66194e+035
-448428115668872934282842669742393600	-4.48428e+035
1089391211041939597551322864353606400	1.08939e+036
-2384432803760163710966926065345393600	-2.38443e+036
4703655197905007843631546185978606400	4.70366e+036
-8362053685164458388678304330628633600	-8.36205e+036
13391467868333092050131020150715366400	1.33915e+037
-19302545482089495962884165764117071100	-1.93025e+037
25010001538317978699384350682432678900	2.501e+037
-29077372030708791844266926744973633600	-2.90774e+037
30264203542166293552196189061095006400	3.02642e+037
-28115818722814982590157570701819743600	-2.81158e+037
23227896987219682475871594202891256400	2.32279e+037
-16986606106997219317534905455853993600	-1.69866e+037
10933522273997552736270001605050006400	1.09335e+037
-6150106279123623414151875902840628600	-6.15011e+036
2996393243665822472451151912210871400	2.99639e+036
-1250195820486420260614539573348753600	-1.2502e+036
440171703156657430859959579367246400	4.40172e+035
-128231839142745243287715497295003600	-1.28232e+035
30079073379162464474896227760556400	3.00791e+034
-5458584204914171246862075359193600	-5.45858e+033
719080128397475705222663616806400	7.1908e+032
-61171747033813037423455759068600	-6.11717e+031
2522283613639104833370312431400	2.52228e+030

Данні класи були відкомпільовані у вигляді динамічної бібліотеки `longnum.dll` та протестовані для точного розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

Приведемо основні стадії алгоритмічної схеми знаходження величини рангу, початкової базисної матриці та розв'язку невиродженої системи (1) з раціональними елементами, що ґрунтується на технології точних обчислень.

Алгоритм МБМ

На вході: матриця коефіцієнтів A розмірності $m \times m$, вектор правих частин СЛАР C розмірності m та одинична базисна матриця I розмірності $m \times m$, що представляють собою динамічно створені масиви елементів типу `longrat`. Надалі наступні кроки виконуємо з використанням операцій порівняння, додавання, віднімання, множення та ділення класу `longrat`.

Крок 1. Проводимо симплексні ітерації по заміщенню рядків базисної матриці I системи (2) нормальними обмежень системи (1), згідно положень МБМ [3].

Знаходимо відповідні елементи методу: розвинення за рядками базисних матриць обмежень (2), оберненої базисну матрицю, штучні базисні розв'язки $u_0^{(k)}$, де k - номер ітерації.

Крок 2. Перевіряємо кількість ітерацій r заміщення рядків допоміжної системи рядками основної системи для яких виконуються умови невиродженості, тобто $\alpha_{rk} \neq 0$ - число визначає ранг основної системи.

Крок 3. Якщо кількість ітерацій, для яких $\alpha_{rk} \neq 0$, рівна m , то переходимо на наступний крок. В супротивному на передостанній крок.

Крок 4. Знаходимо єдиний розв'язок згідно співвідношення: $A_k^{-1} \cdot c^0 = u^0$.

Крок 5. Виконання умови $r < m$ означає порушення умови єдиності розв'язку і потребує подальшого аналізу розв'язності задачі.

Останній крок. Формування вихідної інформації за результатами аналізу (1) у вигляді масиву елементів типу `longrat`.

Розв'язування СЛАР МБМ з використанням бібліотеки `longnum`

Розглянемо варіант поганобумовленої СЛАР з матрицею Гільберта A_1 , в якій елементи $a_{ij}^{(1)} = 1/(i+j-1)$, $i = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, m}$, $b_i = 1$, $i = \overline{1, m}$ [6].

В результаті експериментів для СЛАР з матрицею Гільберта A_1 розмірності $m = 50$ отримано точні розв'язки. При цьому час виконання на ЕОМ (з процесором Athlon 1700+ з частотою 1400 МГц, оперативною пам'яттю 256 Мбайт) складав 507.9 секунд. Мінімальний ведучий елемент дорівнював $5.56135311E-59$.

Висновки

Застосування симплексної ідеології на основі МБМ дає змогу: досліджувати властивості розв'язків як СЛАР так і СЛАН; проводити построзрахунковий аналіз властивостей системи при зміні значень окремих елементів та її компонент; розробляти механізм поетапного перетворення виродженої матриці обмежень в невироджену направленою корекцією елементів; знаходити розв'язок "квадратної" системи рівнянь та нерівностей за фіксовану кількість кроків; будувати початкові розв'язки задач на основі тривіальних базисних матриць, що виключає трудомісткі початкові обчислення.

Література

1. Аммераль Леен. STL для програмистів на C++. - Пер. с англ. - Москва: ДМК. - 1999. - 240 с.
2. Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. Гл. ред. физико-математической литературы. - М: "Наука". - 1977. - 303 с.
3. Волкович В.Л., Войналович В.М., Кудин В.И. Релаксационная схема строчного симплекс метода // Автоматика. - 1987. - №4. - с. 79-86.
4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. Гл. ред. физико-математической литературы. - М: "Наука". - 1989. - 432 с.
5. Страуструп Б. Язык программирования C++. Специальное издание. Бинум. Лаборатория знаний. Невский диалект, 2006. - 1104 с.
6. Форсайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. - Пер. с англ. - Москва: Мир, 1969. - 168 с.

Надійшла до редакції
19.03.2007

УДК 517.977.1

Кудін Г.І., канд. фіз. - мат. наук,¹

Бублик С.Б., асп.,

Синтез лінійних дискретних систем керування з крайовими умовами засобами псевдообернення. II

На визначеному наборі векторів системи керування розв'язана задача синтезу лінійної дискретної системи керування з крайовими умовами згідно критеріїв мінімуму нев'язки та норми головного розв'язку задачі.

Ключові слова: лінійна дискретна система керування, синтез, псевдообернення

¹ E-mail: kuding@univ.kiev.ua

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 в роботі [1], система лінійних алгебраїчних рівнянь

$$A_1 x_u = d, \quad d^T = (d_1^T, d_2^T), \quad (4)$$

де

$$A_1 = (X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(N)) \in R^{s \times n}, \quad (5)$$

$$X_{(c)} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 X(N+1, 0) \end{pmatrix} \in R^{s \times n}, \quad (6)$$

$$s = s_1 + s_2, \quad n_1 = n + (N+1),$$

$$W_{(c)}(k) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(k)} b(k) \end{pmatrix} \in R^{s \times 1}, \quad k = \overline{0, N}, \quad (7)$$

$$0 \in R^{s_1 \times 1}, \quad A_{(c)}^{(k)} = C_2 A^{(k)} \in R^{s_2 \times n}, \quad A_{(c)}^{(0)} = C_2, \quad (8)$$

$$A^{(k)} = A(N-1)A(N-2) \dots A(k+1) \in R^{n \times n} \quad (9)$$

$$X(N+1, 0) = A(N)A(N-1) \dots A(0) \in R^{n \times n}, \quad (10)$$

Kudin, G.I., cand. phys. - math. nauk,¹

Bublik S.B., asp.

Synthesis of the linear discrete systems control with regional terms facilities of pseudo-inversion. II

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 sets of vector.

Keywords: linear discrete system, management synthesis, pseudoinversion

а невідомий вектор

$$x_u^T = (x^T(0); u^T) \in R^{n_1} \quad (11)$$

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).

I. Мінімізація нев'язки розв'язку задачі керування на множині невизначених векторів системи

Якщо система лінійних алгебраїчних 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 та проєкційних операторів [2] це означає, що

$$\|d - A_1 x_u\|^2 = d^T Z(A_1^T) d > 0, \quad (13)$$

$$\text{де } x_u = A_1^T (A_1 A_1^T)^+ d + Z(A_1) v, \quad v \in R^{n_1}, \quad (14)$$

$$Z(A_1^T) = I_s - A_1 A_1^+, \quad Z(A_1) = I_{n_1} - A_1^+ A_1,$$

$Z(A_1^T)$, $Z(A_1)$ - проєкційні оператори на ортогональні доповнення до лінійної оболонки стовпців та рядків матриці A_1 відповідно.

При умові, що невизначені вектори системи керування $b(k) \in R^{n \times 1}$, $k = \overline{0, N}$ можна вибирати з множини векторів

$$\Omega(k) = \{ b(k); b(k) = b^{(l)}(k), \quad l = \overline{1, l(k)} \}, \quad (15)$$

згідно формул (7) вводяться до розгляду множини вибору векторів $W_{(c)}(k)$, $k = \overline{0, N}$

$$\Omega_W(k) = \{W_{(c)}(k)\};$$

$$W_{(c)}^{(i)}(k) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(k)} b^{(i)}(k) \end{pmatrix}, i = \overline{1, I(k)} \quad (16)$$

і ставиться задача знайти серед них оптимальні вектори, а саме

$$W_{(c)opt}(k) = \arg \min_{W_{(c)}(k) \in \Omega_W(k)} d^T Z(A_1^T) d, \quad k = \overline{0, N}. \quad (17)$$

При побудові алгоритму розв'язання задачі будуть використані прямі та обернені формули Гревіля [2], які тут подаються в позначеннях розв'язуваної задачі.

Для випадку, коли з матриці A_1 видаляється вектор-стовпчик $W_{(c)}(k)$, $k = \overline{0, N}$ припускається, що

1) $A_1 \equiv (A_{1(k)} \uparrow W_{(c)}(k))$, тобто $A_{1(k)} \in R^{s \times (n+N)}$ - це матриця A_1 , з якої видалено $(k+1)$ -ий вектор-стовпчик, тобто $W_{(c)}(k)$, а знак $\uparrow$ означає вставку після k -го вектора-стовпчика матриці $A_{1(k)}$ вектор-стовпчика $W_{(c)}(k)$.

$$2) \text{ відомі } A_1^+ \equiv (A_{1(k)} \uparrow W_{(c)}(k))^+ = \begin{pmatrix} P_k \\ \rightarrow \\ q_k^T \end{pmatrix},$$

$$P_k \in R^{(n+N) \times s}, \quad q_k \in R^{s \times 1}, \quad Z(A_1^T),$$

де матриця $P_k \in R^{(n+N) \times s}$ - це матриця A_1^+ , з якої видалено $(k+1)$ -ий вектор-рядок q_k^T , а знак $\rightarrow$ означає вставку після k -го вектор-рядка матриці P_k вектор-рядка q_k^T .

Використовуючи результати [2], можна стверджувати, що при видаленні з матриці A_1 $(k+1)$ -го вектор-стовпчика $W_{(c)}(k)$ очікувані зміни, як і раніше, визначаються властивістю лінійної залежності чи незалежності з іншими вектор-стовпчиками матриці A_1 вектор-стовпчика $W_{(c)}(k)$, що видаляється:

а) вектор-стовпчик $W_{(c)}(k)$ лінійно незалежний з вектор-стовпчиками матриці A_1 , тобто має місце співвідношення

$$W_{(c)}^T(k) Z(A_1^T) W_{(c)}(k) > 0 \quad \text{або} \quad q_k^T W_{(c)}(k) = 1,$$

тоді має місце формула

$$Z(P_k^T) = Z(A_1^T) + \frac{q_k \cdot q_k^T}{\|q_k\|^2}; \quad (18)$$

б) вектор-стовпчик $W_{(c)}(k)$ лінійно залежний з вектор-стовпчиками матриці A_1 , тобто має місце співвідношення

$$W_{(c)}^T(k) Z(A_1^T) W_{(c)}(k) = 0 \quad \text{або} \quad q_k^T W_{(c)}(k) \neq 1,$$

тоді має місце формула

$$Z(P_k^T) = Z(A_1^T). \quad (19)$$

При поповненні матриці $A_{1(k)} \in R^{s \times (n+N)}$ після k -го вектора-стовпчика вектор-стовпчиком $W_{(c)}(k)$ для матриці A_1 справедливо:

$$\text{а) при } W_{(c)}^T(k) Z(A_{1(k)}^T) W_{(c)}(k) > 0$$

$$Z(A_1^T) \equiv Z((A_{1(k)} \uparrow W_{(c)}(k))^T) = \quad (20)$$

$$= Z(A_{1(k)}^T) - \frac{Z(A_{1(k)}^T) W_{(c)}(k) W_{(c)}^T(k) Z(A_{1(k)}^T)}{W_{(c)}^T(k) Z(A_{1(k)}^T) W_{(c)}(k)},$$

$$\text{б) при } W_{(c)}^T(k) Z(A_{1(k)}^T) W_{(c)}(k) = 0$$

$$Z(A_1^T) \equiv Z((A_{1(k)} \uparrow W_{(c)}(k))^T) = Z(A_{1(k)}^T). \quad (21)$$

З погляду на формули (18), (21) очевидно, що проекційний оператор на лінійну оболонку вектор-стовпців матриці не змінюється при поповненні її вектор-стовпцем, чи видаленні з матриці вектора-стовпця, якщо означені вектори належать лінійній оболонці стовпців матриці. Ця властивість проекційного оператора на лінійну оболонку вектор-стовпців матриці очевидним чином визначить і аналогічну властивість для функції

$$D(X_{(c)}; W_{(c)}(0); W_{(c)}(1); \dots; W_{(c)}(N)) = \quad (22)$$

$$= d^T Z(A_1^T) d$$

яка характеризує нев'язку розв'язку системи лінійних рівнянь (4).

Зміна функції (22) при заміні вектора $W_{(c)}(k)$ на вектор $W_{(c)opt}(k)$, який виділяється з множини $\Omega_W(k)$ по критерію максимального зменшення функції (22), визначається так

$$\Delta D(k) \equiv D(X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(k); \dots; W_{(c)}(N)) -$$

$$- D(X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)opt}(k); \dots; W_{(c)}(N)) =$$

$$= d^T (Z((X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(k); \dots; W_{(c)}(N))^T) -$$

$$- Z((X_{(c)}; \dots; W_{(c)opt}(k); \dots; W_{(c)}(N))^T)) d,$$

для якої, виходячи з виразів (18) - (19), неважко привести відповідні аналітичні вирази.

Зокрема, при

$$W_{(c)}^T(k) Z(A_{1(k)}^T) W_{(c)}(k) > 0$$

$$\Delta D(k) = -(l_{(c)opt}^T(0) d)^2 + (l_{(c)}^T(0) d)^2, \quad (23)$$

а при $W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) = 0$

$$\Delta D(k) = -(l_{(c)opt}^T(0)d)^2 \quad (24)$$

Тут використані позначення

$$l_{(c)opt}^T(0) = \frac{Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)opt}^T(0)}{\|Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)opt}^T(0)\|},$$

$$l_{(c)}^T(0) = \frac{Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}^T(0)}{\|Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}^T(0)\|} \quad (25)$$

Формули (23) - (24) дають явний вираз приросту функції, яка характеризує нев'язку розв'язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь (14) на множині вектор-стовпців матриці системи, при заміні вектор-стовпця $W_{(c)}(0)$ на вектор-стовпчик $W_{(c)opt}(0)$ (заміна вектор-стовпця $W_{(c)}(0)$ на вектор-стовпчик $W_{(c)opt}(0)$ здійснюється за умови $\Delta D(k) > 0$).

Отже, виходячи з припущення постановки задачі про відсутність розв'язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь (14), процес мінімізації лівої частини нерівності (28) можна організувати по схемі, яка використовується при реалізації методу покоординатного спуску в задачі мінімізації функції багатьох змінних, з врахуванням покрокової реалізації керування дискретною системою типу (1):

1. Обчислити

$$d^T Z((X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(N)))d > 0; \quad (26)$$

2. Створити підмножину $\Omega_{W>}(0)$ множини

$$\Omega_W(0) = \{W_{(c)}(0);$$

$$W_{(c)}^{(i)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(0)}b^{(i)}(0) \end{pmatrix}, \quad i = \overline{1, I(0)} \quad (27)$$

згідно виконання умови

$$W_{(c)}^T(0)Z(A_{1(0)}^T)W_{(c)}(0) > 0, \quad (28)$$

тобто

$$\Omega_{W>}(0) = \{W_{(c)}(0); W_{(c)}(0) \in \Omega_W(0), W_{(c)}^T(0)Z(A_{1(0)}^T)W_{(c)}(0) > 0\}; \quad (29)$$

3. Розв'язати задачу

$$W_{(c)z}^0(0) = \arg \min_{W_{(c)}(0) \in \Omega_{W>}(0)} d^T Z(A_{1(0)}^T \uparrow W_{(c)}(0))^T d; \quad (30)$$

4. Якщо виконується умова

$$D(0) = d^T Z(A_{1(0)}^T \uparrow W_{(c)z}^0(0))^T d = 0; \quad (31)$$

то послідовно розв'язуються задачі по формуванню підмножин $\Omega_{W=}(k)$ множин $\Omega_W(k)$ $k = \overline{1, N}$ згідно виконання умов

$$W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) = 0, \quad (32)$$

$$W_{(c)}(k) \in \Omega_{W=}(k), W_{(c)}(k) \in \Omega_W(k), k = \overline{1, N}. \quad (33)$$

тобто

$$\Omega_{W=}(k) = \{W_{(c)}(k); W_{(c)}(k) \in \Omega_W(k), W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) = 0, k = \overline{1, N}\}. \quad (34)$$

Отримані підмножини $\Omega_{W=}(k)$ множин $\Omega_W(k)$ $k = \overline{1, N}$ можуть бути використані (за умови їх непустоти) в подальших доповненнях до постановки вихідної задачі керування.

За умови невиконання на розглянутому першому кроці процедури рівності (31), тобто засобами керування в точці $x(0)$ вектором

$$W_{(c)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(k)}b(0) \end{pmatrix} \in R^{3 \times m},$$

досягнути розв'язності системи рівнянь (14), процедура пошуку структури системи керування продовжується на множині

$$\Omega_W(1) = \{W_{(c)}(1);$$

$$W_{(c)}^{(i)}(1) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(1)}b^{(i)}(1) \end{pmatrix}, \quad i = \overline{1, I(1)} \quad (35)$$

Так як вважається, що

$$D(1) = d^T Z(A_{1(1)}^T \uparrow W_{(c)}(1))^T d > 0, \quad (36)$$

то наступні кроки такі:

2.1. Створити підмножину $\Omega_{W>}(1)$ множини

$$\Omega_W(1);$$

$$\Omega_{W>}(1) = \{W_{(c)}(1);$$

$$W_{(c)}(1) \in \Omega_W(1), W_{(c)}^T(1)Z(A_{1(1)}^T)W_{(c)}(1) > 0\}; \quad (37)$$

3.1. Розв'язати задачу

$$W_{(c)z}^0(1) = \arg \min_{W_{(c)}(1) \in \Omega_{W>}(1)} d^T Z(A_{1(1)}^T \uparrow W_{(c)}(1))^T d; \quad (38)$$

4.1. Якщо виконується умова

$$D(1) = d^T Z(A_{1(1)}^T \uparrow W_{(c)z}^0(1))^T d = 0, \quad (39)$$

то послідовно розв'язуються задачі по формуванню підмножин $\Omega_{W=}(k)$ множин $\Omega_W(k)$:

$$\Omega_{W=}(k) = \{W_{(c)}(k);$$

$$W_{(c)}(k) \in \Omega_W(k), W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) = 0, k = \overline{2, N}\};$$

5.1. Якщо виконується умова

$$D(1) = d^T Z(A_{1(1)}^T \uparrow W_{(c)}(1))^T d > 0, \quad (41)$$

то створити підмножину $\Omega_{W>}(2)$ множини $\Omega_W(2)$, а, отже, продовжити процедуру мінімізації критерія (26) – кроки 1.(к), 2.(к), ...

Якщо при $k = N$ залишається

$$W_{(c)}^T(N)Z(A_{1(N)}^T)W_{(c)}(N) > 0, \quad (42)$$

то пошук оптимальної структури продовжується циклічно, вибором вектора керування при $k=0$. Обчислювальний процес завершується умовою

$$d^T Z(A_{1(j)} \uparrow W_{(c)}^0(j))^T d = 0, \quad j \in \overline{0, N}, \quad (43)$$

або умовою

$$d^T Z(A_{1(j)} \uparrow W_{(c)}^0(j))^T d = D_{\min} > 0, \quad \forall j \in \overline{0, N}. \quad (44)$$

2. Мінімізація норми головного розв'язку задачі на множині невизначених векторів системи

При виконанні умови існування розв'язків - єдиного чи множини системи (4) - ставиться задача знайти на множині $\Omega(k)$ векторів системи керування $b(k)$ (формула (15)) оптимальні вектори, а саме:

$$b^{(0)}(k) = \arg \min_{b(k) \in \Omega(k)} d^T R(A_1^T) d, \quad k = \overline{0, N}, \quad (45)$$

де $R(A_1^T) = (A_1^T)^+ A_1^T$ - проекційний оператор.

В теорії псевдообернених та проекційних операторів означено, що в розв'язку (14) доданок

$$x_u = A_1^T (A_1 A_1^T)^+ d - \text{головний розв'язок.} \quad (46)$$

При побудові алгоритму розв'язання задачі будуть використані прямі та обернені формули Гревіля [2], які тут подаються для $R(A_1^T)$ в позначеннях розв'язуваної задачі:

а) вектор-стовпчик $W_{(c)}(k)$ лінійно незалежний з вектор-стовпчиками матриці A_1 , тобто виконуються співвідношення

$$W_{(c)}^T(k)Z(A_1^T)W_{(c)}(k) > 0, \quad (47)$$

тоді мають місце формули:

$$R(A_{1(k)}^T) = (I_s - \frac{q_k \cdot q_k^T}{\|q_k\|^2})(R(A_1^T) - \frac{q_k \cdot q_k^T}{\|q_k\|^2}), \quad (48)$$

$$(I_s - \frac{q_k \cdot q_k^T}{\|q_k\|^2});$$

б) вектор-стовпчик $W_{(c)}(k)$ лінійно залежний з вектор-стовпчиками матриці A_1 , тобто виконується співвідношення

$$W_{(c)}^T(k)Z(A_1^T)W_{(c)}(k) = 0 \text{ або } q_k^T W_{(c)}(k) \neq 1,$$

тоді мають місце формули

$$R(A_{1(k)}^T) = R(A_1^T) - \frac{q_k \cdot q_k^T}{1 - q_k^T q_k}. \quad (49)$$

Поповнення матриці $A_{1(k)}$ після k -го вектора-стовпчика вектор-стовпчиком $W_{(c)}(k)$ для результуючої матриці A_1 дає:

$$\begin{aligned} \text{а) при } W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) > 0 \\ R(A_1^T) &= R(A_{1(k)} \uparrow W_{(c)}(k))^T = \\ &= R(A_{1(k)}^T) - \frac{Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)W_{(c)}^T(k)R(A_{1(k)}^T)}{W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)} - \\ &\quad \frac{R(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)}{W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)} + \\ &\quad + \frac{Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)W_{(c)}^T(k)R(A_{1(k)}^T)}{(W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k))^2} \\ &\quad (1 + W_{(c)}^T(k)R(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)); \end{aligned} \quad (50)$$

б) при $W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) = 0$

$$R(A_1^T) = R(A_{1(k)} \uparrow W_{(c)}(k))^T = R(A_{1(k)}^T) - \frac{R(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k)W_{(c)}^T(k)R(A_{1(k)}^T)}{(1 + W_{(c)}^T(k)R(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k))}.$$

Властивості функції

$$DN(X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(N)) = d^T R(A_1^T) d \quad (51)$$

при заміні в матриці A_1 вектора $W_{(c)}(k)$ вектором $W_{(c)0}(k)$ визначаються очевидним чином

$$\begin{aligned} \Delta DN(k) &= \\ &= d^T (R(X_{(c)}; \dots; W_{(c)}(k); \dots; W_{(c)}(N))^T - \\ &\quad - R(X_{(c)}; \dots; W_{(c)0}(k); \dots; W_{(c)}(N))^T) d. \end{aligned} \quad (52)$$

Для $\Delta DN(k)$, виходячи з виразів (48)-(50), неважко привести відповідні аналітичні вирази для всіх чотирьох випадків

$$\begin{aligned} W_{(c)}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)}(k) &> 0, > 0, = 0, = 0, \\ W_{(c)0}^T(k)Z(A_{1(k)}^T)W_{(c)0}(k) &> 0, = 0, > 0, = 0. \end{aligned}$$

Властивості функції $\Delta DN(k)$ можна використати для побудови алгоритму мінімізації головного розв'язку системи рівнянь (14) на допустимих множинах (15) векторів системи керування, які використовуються для побудови множин векторів $W_{(c)}(k)$, $k = \overline{0, N}$ матриці A_1

системи рівнянь (14) (формула (5))

$$\Omega_W(k) = \{W_{(c)}(k)\};$$

$$W_{(c)}^{(i)}(k) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(k)} b^{(i)}(k) \end{pmatrix}, \quad i = (1, \bar{I}(k)) \quad (53)$$

Виходячи з припущення постановки задачі про існування розв'язку системи рівнянь (14)

$$d^T Z((X_{(c)}; W_{(c)}(0); \dots; W_{(c)}(N))^T) d = 0, \quad (54)$$

процес мінімізації функції $d^T R(A_1^T) d$ можна організувати по такій схемі:

1. Створити підмножину $\Omega_{D=0}(0)$ множини

$$\Omega_W(0) = \{W_{(c)}(0)\};$$

$$W_{(c)}^{(i)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(0)} b^{(i)}(0) \end{pmatrix}, \quad i = (1, \bar{I}(0)) \quad (55)$$

згідно виконання умови (54), тобто

$$\Omega_{D=0}(0) = \{W_{(c)D=0}(0); W_{(c)D=0}(0) \in \Omega_W(0), d^T Z((X_{(c)}; W_{(c)D=0}(0); \dots; W_{(c)}(N))^T) d = 0\}. \quad (56)$$

2. Якщо підмножина $\Omega_{D=0}(0)$ виявилася пустою, то створити підмножину $\Omega_{D=0}(1)$ множини

$$\Omega_W(1) = \{W_{(c)}(1)\};$$

$$W_{(c)}^{(i)}(1) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(1)} b^{(i)}(1) \end{pmatrix}, \quad i = (1, \bar{I}(1)) \quad (57)$$

за виконання умови (54), а вектор $W_{(c)}^0(0)$ визначити згідно рівності

$$W_{(c)}^0(0) = \arg \min_{W_{(c)}(0) \in \Omega_W(0)} \quad (58)$$

$$d^T Z((X_{(c)}; W_{(c)}(0); W_{(c)D=0}(1); \dots; W_{(c)}(N))^T) d.$$

3. Якщо підмножина $\Omega_{D=0}(1)$ виявилася пустою, то створити підмножину $\Omega_{D=0}(2)$ множини

$$\Omega_W(2) = \{W_{(c)}(2)\};$$

$$W_{(c)}^{(i)}(2) = \begin{pmatrix} 0 \\ A_{(c)}^{(2)} b^{(i)}(2) \end{pmatrix}, \quad i = (1, \bar{I}(2)) \quad (59)$$

за виконання умови типу (54), а $W_{(c)}^0(1)$ знайти аналогічно (58).

При певному $k < N$ підмножина $\Omega_{D=0}(k)$ виявиться не пустою.

4. Створити підмножину $\Omega_{D=0}(k)$ множини $\Omega_W(k)$. Розв'язати задачу

$$W_{(c)}^{opt}(k) = \arg \min_{W_{(c)}(k) \in \Omega_{D=0}(k)} \quad (60)$$

$$d^T R((X_{(c)}; W_{(c)D=0}(0); \dots; W_{(c)D=0}(k-1); W_{(c)}(k); \dots; W_{(c)}(N))^T) d$$

та оптимізувати значення функції $\Delta DN(k)$.

6. Створити підмножину $\Omega_{D=0}(k+1)$ множини $\Omega_W(k+1)$ і подальші кроки схеми обчислень здійснити циклічно до завершення процесу перебору векторів $W_{(c)}(k)$, $k = \overline{0, N}$.

Таким чином, для поставленої вихідної задачі виявлено умови, які гарантують за скінчене число кроків при відсутності розв'язку задачі мінімізувати функцію нев'язки, а за умов існування множини розв'язків мінімізувати норму головного розв'язку на заданих множинах вектор-стовпців системи керування.

Література

1. Бублик С.Б., Кудін Г.Л. 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., Лелеха Н.П. Применение псевдообратных и проекционных матриц к исследованию задач управления, наблюдения и идентификации //Кибернетика и системный анализ. – 2002. – №4. – С. 107-124.
3. Кириченко Н.Ф., Матвиенко В.Т. Оптимальный синтез структур для линейных систем управления. //Проблемы управления и информатики. – 1996. – №1-2. – С. 162-171.

Надійшла до редколегії 26.03.2007р.

УДК 519.21

Лебедев¹ Є.О., доктор фіз.-мат. наук, проф.,
Прищеп² О.В., аспірант

Стохастичні системи із повторними викликами та нетерплячими вимогами

Предметом дослідження в даній роботі є стохастичні системи з одним приладом та нетерплячими вимогами. Для процесу обслуговування вимог в таких системах досліджено стаціонарний режим і побудовано явні формули для характеристик ефективності обслуговування.

Ключові слова: стохастична система з повторними викликами, нетерплячі вимоги, процес обслуговування, стаціонарні ймовірності.

¹E-mail: leb@unicyb.kiev.ua

²E-mail: oksa_pr@ua.fm

Головною особливістю стохастичних систем з повторними викликами є те, що вимоги, які надійшли до системи при зайнятості всіх каналів обслуговування, можуть повертатися для обслуговування після деякого періоду часу. Сфера можливого застосування таких систем досить широка. Це комп'ютерні мережі (локальні та глобальні), системи керування посадкою повітряних суден, системи мобільного зв'язку.

Базову модель можна описати наступним чином. На вхід системи ззовні надходять вимоги для обслуговування. Якщо у момент надходження є хоча б один вільний прилад, то вимога відразу ж починає обслуговуватися і після завершення цього процесу залишає систему. Якщо всі прилади зайняті, то вимога стає джерелом повторних викликів. Це означає, що через деякий час повторюється спроба зайняти вільний прилад та отримати обслуговування. Вимоги, що надходять до обслуговуючих приладів з джерел повторних викликів, називаються вторинними на відміну від первинних, що надходять ззовні. При умові, що кількість повторних звернень обмежена, відповідну систему називають системою з нетерплячими вимогами.

E.A. Lebedev¹, the doctor of physical and mathematical sciences, the professor,
O.V. Prischepa², the post-graduate student

Retrial queues with impatient calls

The subject examined in the paper is an one-channel stochastic system with impatient calls. For service process of calls in the systems stationary regime is investigated and for characteristics of service efficiency explicit formulas are found.

Key Words: retrial queue, impatient calls, service process, stationary probabilities.

Постановка задачі. В даній роботі розглядається частковий випадок базової моделі – стохастична система типу $M|M|1$ з повторними викликами та нетерплячими вимогами.

На вхід системи (рис. 1), що має один прилад, надходить пуассонівський потік вимог з інтенсивністю λ . Час обслуговування має показниковий розподіл з параметром μ . Прилад може перебувати в двох станах: зайнятий або вільний. Якщо при надходженні вимоги прилад є вільним, то вимога обслуговується та залишає систему. У протилежному випадку – вимога утворює джерело повторного виклику, з якого вона ще раз може опитати прилад для отримання обслуговування. Час між послдовними повторними опитуваннями системи є показниково розподіленою величиною із параметром ν . Якщо при повторному зверненні прилад був вільним, то вимога з джерела повторного виклику надходить на обслуговування. В іншому випадку – назавжди залишає систему.

Відносно параметрів моделі будемо вимагати тільки те, що вони не вироджені: $\lambda, \mu, \nu \neq 0$.

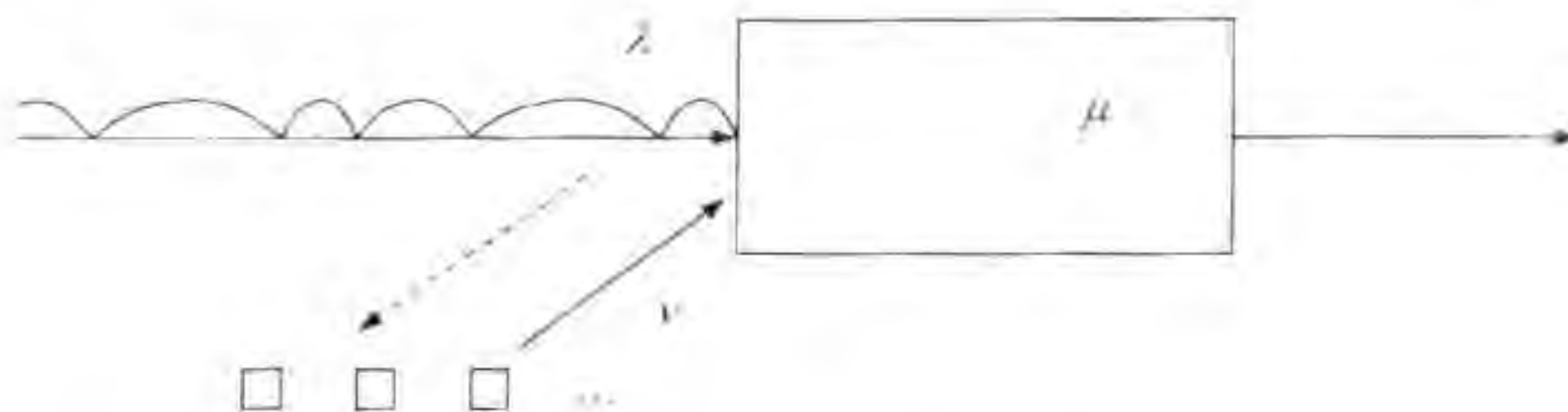


Рис. 1. Структура стохастичної системи з повторними викликами

Процесом обслуговування вимог в системі, що розглядається, будемо називати двовимірний процес $Q(t) = (Q_1(t), Q_2(t))$, де $Q_1(t)$ – кількість зайнятих приладів, $Q_2(t)$ – кількість джерел повторних викликів. Головна мета даної роботи – дослідження стаціонарного режиму для процесу обслуговування

В силу зроблених припущень процес $Q(t)$ є ланцюгом Маркова з неперервним часом у фазовому просторі $S = I \times J$, $I = \{0, 1\}$, $J = \{0, 1, \dots\}$. Інфінітезимальні характеристики $Q(t)$ визначаються наступним чином:

1) якщо $i = 0$, $j \in J$, то

$$a_{(i,j)|(i',j')} = \begin{cases} \lambda, & \text{при } (i', j') = (1, j), \\ jv, & \text{при } (i', j') = (1, j-1), \\ -(\lambda + jv), & \text{при } (i', j') = (i, j), \\ 0, & \text{в іншому випадку.} \end{cases}$$

2) якщо $i \geq 1$, $j \in J$, то

$$a_{(i,j)|(i',j')} = \begin{cases} \lambda, & \text{при } (i', j') = (1, j+1), \\ \mu, & \text{при } (i', j') = (0, j), \\ jv, & \text{при } (i', j') = (1, j-1), \\ -(\lambda + jv + \mu), & \text{при } (i', j') = (i, j), \\ 0, & \text{в іншому випадку.} \end{cases}$$

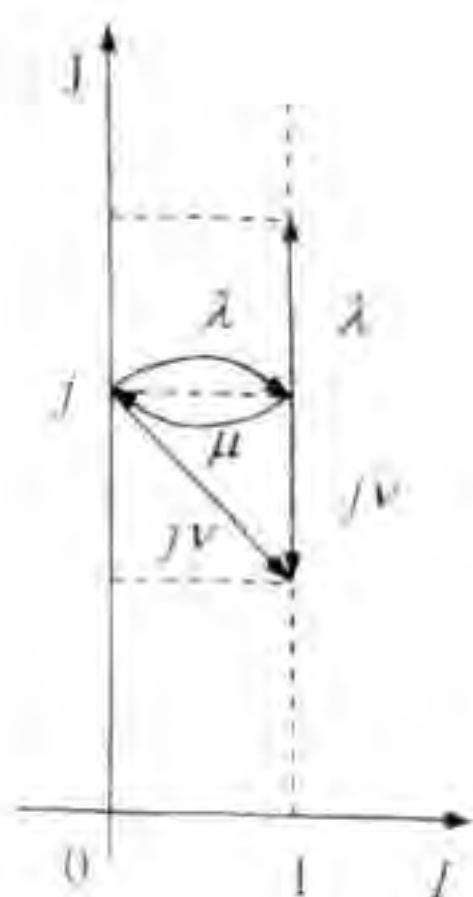


Рис. 2. Граф інтенсивностей переходів для ланцюга $Q(t)$

Основним результатом дослідження стаціонарного режиму для $Q(t)$, $t \geq 0$ є наступне твердження.

Теорема. Якщо параметри $M | M | 1$ – моделі з повторними викликами та нетерплячими вимогами невироджені, то для процесу обслуговування $Q(t)$, $t \geq 0$ існує стаціонарний режим і стаціонарні ймовірності можна подати у вигляді:

$$\pi_{0j} = \frac{\lambda^j}{j!v^j} \prod_{i=0}^{j-1} \frac{\lambda + (i-1)v}{\lambda + iv + \mu} \pi_{00}, \quad (1)$$

$$\pi_{1j} = \rho \frac{\lambda^j}{j!v^j} \prod_{i=0}^{j-1} \frac{\lambda + iv}{\lambda + iv + \mu} \pi_{00}, \quad (2)$$

де

$$\pi_{00}^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{j! \nu^j} \prod_{i=1}^j \frac{\lambda + (i-1)\nu}{\lambda + i\nu + \mu} +$$

$$+ \rho \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{j! \nu^j} \prod_{i=1}^j \frac{\lambda + i\nu}{\lambda + i\nu + \mu}, \quad (3)$$

$$\rho = \frac{\lambda}{\mu}.$$

Доведення. З'ясуємо спочатку питання існування стаціонарного режиму для процесу $Q(t)$, $t \geq 0$. Візьмемо функції

$$\varphi(i, j) = \varphi(j) = j, \quad (i, j) \in S, \quad (4)$$

в якості тест-функції Ляпунова. Тоді середній перенос y_{ij} , що визначається як

$$\sum_{(i', j') \neq (i, j)} a_{(i, j)(i', j')} (\varphi(i', j') - \varphi(i, j)),$$

дорівнює

$$y_{ij} = \begin{cases} -j\nu, & \text{при } i=0, \\ \lambda - j\nu, & \text{при } i=1. \end{cases}$$

Враховуючи явний вигляд y_{ij} не важко переконатись, що для тест-функції (4) виконуються умови теореми Твіді ([1], стор. 97).

Таким чином для будь-яких $\lambda, \mu, \nu \neq 0$ процес обслуговування $Q(t) = (Q_1(t), Q_2(t))$ є регулярним, ергодичним і його граничний розподіл співпадає з єдиним стаціонарним розподілом.

Стаціонарні ймовірності задовольняють наступну алгебраїчну систему

$$(\lambda + j\nu)\pi_{0j} = \mu\pi_{1j} \quad (5)$$

$$(\lambda + j\nu + \mu)\pi_{1j} = \lambda\pi_{0j} + (j+1)\nu\pi_{1,j+1} +$$

$$+ \lambda\pi_{1,j-1} + (j+1)\nu\pi_{0,j+1}, \quad j=0,1,\dots \quad (6)$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} (\pi_{0j} + \pi_{1j}) = 1. \quad (7)$$

За домовленістю $\pi_{1,0-1} = 0$.

Для розв'язку системи (5)-(7) застосуємо метод генератрис. Нехай

$$\pi_0(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \pi_{0j},$$

$$\pi_1(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \pi_{1j}, \quad |z| \leq 1$$

генератрис послідовностей $\{\pi_{0j}\}_{j=0}^{\infty}$ і $\{\pi_{1j}\}_{j=0}^{\infty}$ відповідно. Тоді в термінах генератрис рівняння (5), (6) мають наступний вигляд:

$$\lambda\pi_0(z) + \nu z\pi_0'(z) = \mu\pi_1(z),$$

$$[\mu + \lambda(1-z)]\pi_1(z) =$$

$$= \lambda\pi_0(z) + \nu\pi_0'(z) + \nu(1-z)\pi_1'(z), \quad (8)$$

Рівняння (8) можна спростити. У зв'язку з цим для кожного $j=0,1,\dots$ побудуємо розбиття фазового простору $S = S_j \cup \overline{S_j}$, де $S = \{(n, m) : m \leq j\}$. Використовуючи тепер теорему про рівність потоку ймовірностей через границю області S_j в стаціонарному режимі ([2], стор. 49), знаходимо

$$\lambda\pi_{1j} = (j+1)\nu\pi_{1,j+1} + (j+1)\nu\pi_{0,j+1}, \quad j=0,1,\dots \quad (9)$$

В термінах генератрис співвідношення (9) має вид

$$\lambda\pi_1(z) = \nu\pi_1'(z) + \nu\pi_0'(z).$$

Враховуючи це, рівняння (8) можна скоротити до наступного

$$\nu z\pi_1'(z) = \lambda\pi_0(z) + (\lambda z - \mu)\pi_1(z)$$

Отже, для пошуку функцій $\pi_0(z)$ та $\pi_1(z)$ маємо систему диференціальних рівнянь:

$$\pi_1(z) = \frac{\nu}{\mu} z\pi_0'(z) + \frac{\lambda}{\mu} \pi_0(z), \quad (10)$$

$$\pi_0(z) = \frac{\nu}{\lambda} z\pi_1'(z) + \left(\frac{\mu}{\lambda} - z\right)\pi_1(z). \quad (11)$$

З рівняння (10) маємо

$$\pi_1'(z) = \frac{\nu}{\mu} z\pi_0''(z) + \left(\frac{\nu}{\mu} + \frac{\lambda}{\mu}\right)\pi_0'(z)$$

Підставляючи цей вираз в (11), приходимо до диференціального рівняння другого порядку для функції $\pi_0(z)$:

$$z\pi_0''(z) + \left(1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu} - \frac{\lambda}{\nu}z\right)\pi_0'(z) - \left(\frac{\lambda}{\nu}\right)^2 \pi_0(z) = 0. \quad (12)$$

Аналогічно для $\pi_1(z)$ маємо:

$$z\pi_1''(z) + \left(1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu} - \frac{\lambda}{\nu}z\right)\pi_1'(z) - \frac{\lambda}{\nu}\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}\right)\pi_1(z) = 0$$

Розглянемо спочатку рівняння (12), яке можна подати у вигляді

$$zu''(z) + (\gamma - \beta z)u'(z) - \alpha u(z) = 0, \quad (13)$$

де

$$u(z) = \pi_0(z),$$

$$\alpha = \left(\frac{\lambda}{\nu}\right)^2,$$

$$\beta = \frac{\lambda}{\nu},$$

$$\gamma = 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}$$

Зробимо заміну

$$t = \beta z,$$

$$u(z) = u(\beta^{-1}t) = v(t).$$

Тоді $u(z) = v(\beta z)$, а функція $v(t)$ задовольняє рівнянню

$$tv''(t) + (\gamma - t)v'(t) - \frac{\alpha}{\beta}v(t) = 0, \quad (14)$$

яке є виродженим гіпергеометричним рівнянням.

Якщо γ не ціле число, то його загальний розв'язок (див., наприклад, [3], стор.295) представляє собою лінійну комбінацію двох функцій

$$v(t) = C_1 F\left(\frac{\alpha}{\beta}, \gamma, t\right) + C_2 t^{1-\gamma} F\left(\frac{\alpha}{\beta} - \gamma + 1, 2 - \gamma, t\right),$$

де $F(a, b, t)$ – функція Куммера (вироджена гіпергеометрична функція)

$$F(a, b, t) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a(a+1) \dots (a+k-1)}{b(b+1) \dots (b+k-1)} \frac{t^k}{k!}$$

Якщо $\gamma = n$ – натуральне число, то $n \geq 2$ (за

визначенням $\gamma = 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu} > 1$), і загальний

розв'язок рівняння (14) має вигляд:

$$v(t) = C_1 F\left(\frac{\alpha}{\beta}, n, t\right) + C_2 \left\{ \sum_{k=0}^{n-2} (-1)^{n-k} (n-k-2)! C_{\frac{\alpha}{\beta}, n-k} t^{k(n-1)+n} + C_{\frac{\alpha}{\beta}, n-1} \left[F\left(\frac{\alpha}{\beta}, n, t\right) \ln t + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{s=1}^n \frac{\alpha/\beta(\alpha/\beta+1) \dots (\alpha/\beta+k-1)}{n(n+1) \dots (n+k-1)} \frac{t^k}{k!} \sum_{s=0}^{k-1} \left(\frac{1}{\alpha/\beta+s} - \frac{1}{n+s} - \frac{1}{1+s} \right) \right] \right\}$$

Оскільки $\lim_{z \rightarrow 0} \pi_0(z) = \pi_{(0)} < \infty$, то в обох випадках $C_2 = 0$ і ми визначили $\pi_0(z)$ з точністю до мультиплікативного множника $C(0)$

$$\pi_0(z) = C(0) \left\{ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} z^i \left(\frac{\lambda}{\nu} \right)^i \frac{1}{i!} \prod_{i=1}^i \frac{\lambda + (i-1)\nu}{\lambda + i\nu + \mu} \right\}$$

$$\pi_0(z) = C(0) F\left(\frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}z\right). \quad (15)$$

$$\pi_1(z) = C(1) \left\{ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} z^i \left(\frac{\lambda}{\nu} \right)^i \frac{1}{i!} \prod_{i=1}^i \frac{\lambda + i\nu}{\lambda + i\nu + \mu} \right\}$$

Аналогічно $\pi_1(z)$ задовольняє рівнянню (13)

Звідси знаходимо

$$\text{для } \alpha = \frac{\lambda}{\nu} \left(1 + \frac{\lambda}{\nu} \right), \beta = \frac{\lambda}{\nu}, \gamma = 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}$$

$$\pi_{0j} = C(0) \left(\frac{\lambda}{\nu} \right)^j \frac{1}{j!} \prod_{i=1}^j \frac{\lambda + (i-1)\nu}{\lambda + i\nu + \mu} \quad (17)$$

Отже,

$$\pi_j(z) = C(1) F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}z\right). \quad (16)$$

$$\pi_{1j} = C(1) \left(\frac{\lambda}{\nu} \right)^j \frac{1}{j!} \prod_{i=1}^j \frac{\lambda + i\nu}{\lambda + i\nu + \mu}, \quad j = 0, 1. \quad (18)$$

У розгорнутому вигляді (15), (16) означають:

Підставляючи π_{0j} , π_{1j} у вигляді (17), (18) у співвідношення (5), отримаємо

$$\rho C(0) = C(1). \quad (19)$$

Тепер з умови нормування

$$\sum_{j=0}^{\infty} (\pi_{0j} + \pi_{1j}) = \pi_0(1) + \pi_1(1) = 1.$$

знаходимо константу $C(0)$:

$$C^{-1}(0) = F\left(\frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right) + \rho F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right). \quad (20)$$

Рівності (17)-(20) визначають стаціонарні ймовірності в замкненому вигляді через параметри моделі. Теорему доведено.

Формули (1)-(3) представляють собою алгоритм підрахунку стаціонарних ймовірностей. На їх основі можна знаходити важливі для практики показники ефективності роботи системи. Так, наприклад:

1) блокуюча ймовірність для первинних викликів

$$P_1 = \pi_1(1) = \rho F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right) C(0);$$

2) ймовірність того, що прилад вільний

$$P_0 = \pi_0(1) = F\left(\frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right) C(0);$$

3) середня кількість джерел для повторних викликів при умові, що прилад вільний

$$\begin{aligned} N_0 = \pi'_0(1)/P_0 &= P_0^{-1} \left(\frac{\mu}{\nu} \pi_1(1) - \frac{\lambda}{\nu} \pi_0(1) \right) = \\ &= \frac{\lambda}{\nu} P_0^{-1} \left(F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right) - \right. \\ &\quad \left. - F\left(\frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right) \right) C(0) = \\ &= \frac{\lambda}{\nu} \left[\frac{F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right)}{F\left(\frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right)} - 1 \right]. \end{aligned}$$

4) середня кількість джерел для повторних викликів при умові, що прилад зайнятий

$$N_1 = \pi'_1(1)/P_1 = \frac{\lambda}{\nu} P_1^{-1} \left[\pi_0(1) + \left(1 - \frac{\mu}{\lambda}\right) \pi_1(1) \right] =$$

$$= \frac{\mu}{\nu} \left[\frac{F\left(\frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right)}{F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right)} - 1 \right] + \frac{\lambda}{\nu};$$

5) середня кількість джерел для повторних викликів

$$\begin{aligned} N &= \pi'_0(1) + \pi'_1(1) = \frac{\lambda}{\nu} \pi_1(1) = \\ &= \frac{\lambda}{\nu} \rho C(0) F\left(1 + \frac{\lambda}{\nu}, 1 + \frac{\mu}{\nu} + \frac{\lambda}{\nu}, \frac{\lambda}{\nu}\right) \end{aligned}$$

Список використаних джерел

1. Falin G. I. and Templeton J. G. C. Retrial queues. – London: Chapman & Hall, 1997. – 328 p.
2. Уолэнд Дж. Введение в теорию сетей массового обслуживания. – М. Мир, 1993. – 336.
3. Самоїленко А.М., Кривошея С.А., Перестюк М.О. Диференціальні рівняння в задачах. Навчальний посібник. – К: Либідь, 2003. – 504 с.

Надійшла до редколегії 16.04.2007

УДК 519.8

Маляр М.М., канд. техн. наук, доц.,
Баранник В.Ф., канд. фіз.-мат. наук, доц.

Спосіб згортки цільових функцій для задач вибору

Розглядається підхід до побудови функції згортки цільових функцій для багатокритеріальних задач

Ключові слова: вибір, багатокритеріальна оптимізація, цільова функція, згортка

*E-mail: cyber@mail.uzhgorod.ua

Вступ. При розв'язуванні ряду практично-важливих соціально-економічних проблем виникають задачі вибору при багатьох критеріях. Методи вибору (прийняття рішень) при декількох критеріях перетворились у самостійну область наукових досліджень в 70-их роках ХХ століття. В залежності від математичного апарату, за допомогою якого моделюються відповідні проблеми, розрізняються різні класи задач вибору:

- множина альтернатив дискретна і значення критеріїв ефективності задаються на даній множині числовими оцінками;

- множина альтернатив континуальна і критерії ефективності задаються цільовими функціями в аналітичному вигляді.

Для знаходження оптимального рішення у таких задачах розробляються спеціальні методи, які базуються на різних підходах. Одним із таких підходів є принцип згортки, що полягає у спробі за допомогою деякого правила замінити декілька критеріїв одним інтегрованим, який може зовсім не нести (мати) змісту.

Постановка задачі вибору. Розглядається наступна модель задачі вибору. Нехай критерії, за допомогою яких оцінюються альтернативи, описуються лінійними цільовими функціями наступного виду:

$$\varphi_i(x) = \sum_{j=1}^n c_{ij} \cdot x_j, i = \overline{1, m}, \quad (1)$$

де m – кількість критеріїв.

Припустимо, що множину допустимих альтернатив можна описати за допомогою континуальної множини $D \subset R^n$, яка задається сукупністю лінійних нерівностей, тобто

$$D = \{x = (x_1, \dots, x_n) \mid Ax \geq b\} \quad (2)$$

M. M. Malyar*, V. F. Barannyk.

The target functions convolution method used for the choice tasks

Approach to the convolution function of target functions building for the multicriteria tasks of choice is observed

Key Words: choice, multicriteria optimization, convolution, target function

Таким чином, модель задачі вибору можна записати у вигляді багатокритеріальної задачі лінійного програмування:

Знайти

$$\text{extr } \varphi_i(x), i = \overline{1, m}, \quad x \in D \quad (3)$$

Теоретичні результати. Нехай множина цільових функцій розбита на деякі підмножини за допомогою методів і алгоритмів, які описані у роботах [1-4]. Розглянемо будь-яку із цих підмножин.

Припустимо, що маємо деяку сукупність k цільових функцій $\varphi_k(x) = c_{k1}x_1 + \dots + c_{kn}x_n$ ($k \geq 1$). Позначимо через $M_k(x_1^k, \dots, x_n^k)$ точку, яка належить області D , значення функції $\varphi_k(x)$ в цій точці може задовольнити особу, що робить вибір. Нехай $\varphi_k(M_k) = A_k$ – значення функції $\varphi_k(x)$ в точці M_k .

Назвемо лінійні функції $\varphi_1(x), \dots, \varphi_s(x)$ лінійно незалежними, якщо рівність $k_1\varphi_1(x) + \dots + k_s\varphi_s(x) = 0$ для будь-якого x із D виконується тільки при $k_1 = \dots = k_s = 0$.

Лема. Нехай $\varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x)$ ($k \leq n$) – лінійно незалежні цільові функції. Тоді функція

$$f(x) = \sum_{i=1}^k (\varphi_i(x) - A_i)^2 \quad (4)$$

мінімізується у всіх точках деякої $(n-k)$ -вимірної площини, приймаючи в цих точках одне й теж мінімальне значення.

Доведення. Нехай $f(x) = \sum_{i=1}^k (\varphi_i(x) - A_i)^2$.

Виконаємо наступні перетворення невідомих:

$$\begin{cases} \varphi_1(x) - A_1 = y_1, \\ \dots\dots\dots \\ \varphi_k(x) - A_k = y_k, \\ x_{k+1} = y_{k+1}, \\ \dots\dots\dots \\ x_n = y_n, \end{cases}$$

де індекси $k+1, \dots, n$ не співпадають з номерами стовпців мінору, складеного з коефіцієнтів цільових функцій $\varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x)$, відмінного від нуля. Змінні з цими індексами введені у систему для збереження кількості невідомих, що забезпечує невиродженість перетворення. Тоді $f(x) = y_1^2 + \dots + y_k^2$.

Нехай D_r - проекція області D на підпростір R^k простору R^n . Знайдемо у підпросторі R^k точку, яка належить області D_r і мінімально віддалену від початку системи координат. Тоді, очевидно, функція $f(x)$ мінімізується у всіх точках $(n-k)$ -вимірної площини

$$\begin{cases} \varphi_1(x) - A_1 = y_1, \\ \dots\dots\dots \\ \varphi_k(x) - A_k = y_k. \end{cases}$$

Лема доведена.

Теорема. Нехай $\varphi_1(x), \dots, \varphi_s(x)$ - довільна сукупність цільових функцій, серед яких $\varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x)$ - максимальна сукупність лінійно незалежних функцій ($s \geq k$). Тоді функція

$$f(x) = \sum_{i=1}^k (\varphi_i(x) - A_i)^2$$

приймає найменше одне й те ж саме значення у всіх точках деякої $(n-k)$ -вимірної площини.

Доведення. Очевидно, будь-яку цільову функцію $\varphi_i(x)$ ($i = \overline{k+1, s}$) можна представити у вигляді лінійної комбінації цільових функцій $\varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x)$:

$$\varphi_i(x) = l_1^{(i)} \varphi_1(x) + \dots + l_s^{(i)} \varphi_s(x).$$

Отже,

$$f(x) = \sum_{i=1}^k (\varphi_i(x) - A_i)^2 + \sum_{i=k+1}^s \left(\sum_{j=1}^k l_j \varphi_j(x) - A_i \right)^2.$$

Очевидно, функцію $f(x)$ можна представити у вигляді:

$$f(x) = \sum_{i,j=1}^k a_{ij} \varphi_i(x) \varphi_j(x) + 2 \sum_{i=1}^k a_i \varphi_i(x) + d.$$

Нехай $\varphi_i(x) = z_i$ ($i = \overline{1, k}$). Тоді

$$f(x) = \sum_{i,j=1}^k a_{ij} z_i z_j + 2 \sum_{i=1}^k a_i z_i + d. \quad \text{Квадратичну}$$

форму $\sum_{i,j=1}^k a_{ij} z_i z_j$ невиродженим лінійним

перетворенням можна звести до канонічного вигляду $\lambda_1 \mu_1^2 + \dots + \lambda_k \mu_k^2$.

$$\text{Тоді } f(x) = \lambda_1 \mu_1^2 + \dots + \lambda_k \mu_k^2 + 2 \sum_{i=1}^k a_i' \mu_i + d.$$

Якщо припустити, що деяке λ_i від'ємне, то при $\mu_1 = \dots = \mu_{i-1} = \mu_{i+1} = \dots = \mu_k = 0$

одержимо $f(x) = \lambda_i \mu_i^2 + 2a_i' \mu_i + d$.

Але $f(x) > 0$ при всіх $x \in D$, а квадратний тричлен $\lambda_i \mu_i^2 + 2a_i' \mu_i + d$ при $\lambda_i < 0$ може приймати і від'ємні значення. Отже, всі λ_i додатні.

Нехай $\sqrt{\lambda_1} \mu_1 = \xi_1, \dots, \sqrt{\lambda_k} \mu_k = \xi_k$. Тоді

$$f(x) = \xi_1^2 + \dots + \xi_k^2 + 2 \sum_{i=1}^k b_i \xi_i + d \quad \text{або}$$

$$f(x) = (\xi_1 + b_1)^2 + \dots + (\xi_k + b_k)^2 + d'.$$

Виконаємо перетворення змінних:

$$\xi_i + b_i = \eta_i, \dots, \xi_k + b_k = \eta_k.$$

$$\text{Тоді } f(x) = \eta_1^2 + \dots + \eta_k^2 + d'.$$

Знайдемо в області D точку $(\eta_1^0, \dots, \eta_k^0)$, мінімально віддалену від початку системи координат, тобто точку, яка мінімізує функцію $f(x)$.

Тоді в області D функція мінімізується в точках $(n-k)$ -вимірної площини

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = \psi^{-1}(\eta_1^0), \\ \dots\dots\dots \\ \varphi_k(x) = \psi^{-1}(\eta_k^0), \end{cases}$$

де ψ - невироджене перетворення невідомих, яке переводить змінні $z_1, \dots, z_k$ в змінні $\eta_1, \dots, \eta_k$.

Теорема доведена.

Наслідок 1. Функція $f(x)$ досягає мінімального значення в одній точці області D тоді і тільки тоді, коли $k = n$.

Наслідок 2. При $n = 2$ функція $f(x) = (\varphi_1(x) - A_1)^2 + (\varphi_2(x) - A_2)^2$, де $\varphi_1(x) \neq k \varphi_2(x)$, мінімізується в одній точці області D .

УДК 519.9

Россохата Н.О., к. ф.-м. н.

Россохатий В. К., к. ф.-м. н.

Різницеві схеми для моделювання біосенсорних систем

В роботі розглядається математична модель ферментного біосенсора з зарядженою мембраною, яка містить принаймні один шар вбудованого електричного поля з однорідно розподіленим зарядом. За допомогою запропонованого чисельного алгоритма на основі різницевої схем досліджена модель ферментного біосенсора для вимірювання глюкози в крові.

Ключові слова: ферментний біосенсор, дифузійно-дрейфовий перенос, різницева схема.

Вступ

Біосенсорні системи, які комбінують основні принципи мікроелектроніки, хімії та біотехнологій, широко застосовуються в таких важливих галузях, як медицина, охорона навколишнього середовища, фармакологія і т.д. Одним з перспективних напрямків створення недорогих, але надійних приладів є використання багатопарових заряджених мембран [1,2]. Однак експерименти з біосенсорами такого типу виявили деякі несподівані аспекти в поведінці сенсорів. Тому задача математичного моделювання і теоретичного дослідження таких сенсорів стає актуальною.

В даній роботі розглядається математична модель ферментного біосенсора з зарядженою мембраною. Оскільки така модель схожа на моделі напівпровідників, то для її чисельної реалізації були використані принципи побудови різницевої схем для моделей процесів в напівпровідниках. Результати чисельних розрахунків показали суттєвий вплив зарядженого шару мембрани на вихідний сигнал біосенсорного приладу, вивчення якого дозволяє оптимізувати роботу приладу шляхом цілеспрямованого підбору фізичних та біохімічних параметрів приладу.

1. Модель

Ферментний біосенсор складається з

Nataliia O. Rossokhata, k. ph.-m. n.

Rossokhaty V. K., k. ph.-m. n.

Finite-difference schemes for modelling of biosensor systems

The paper is devoted to a mathematical model of an enzyme biosensor with multilayer charged membrane which includes at least one layer with a built-in uniformly distributed charge. The numerical algorithm is developed and applied to the model performances of the enzyme biosensor for express measurement of glucose concentration in human blood.

Key words: enzyme biosensor, drift-diffusion transfer, difference scheme.

твердотільного перетворювача (транзистора), який лінійно перетворює концентрацію протонів поблизу поверхні мембрана-трансдюсер в електричний сигнал. Тришарова мембрана містить шар однорідно розподілених молекул ферменту заданої концентрації. Два інші шари включають, відповідно, позитивно та негативно заряджені частинки постійної густини. Тестовий розчин містить речовину, концентрацію якої треба виміряти. До його складу також входять такі компоненти, як основи, кислоти, протони, нейтральний буфер з відомою концентрацією pH .

Подібно напівпровідникам математична модель включає рівняння Пуассона для заряду

$$\varepsilon^i \frac{\partial^2 \varphi^i}{\partial x^2} = -\frac{4\pi}{\varepsilon_0} \sum_s e z_s C_s^i + Q^i, \quad (1)$$

$$x \in (x^{(i-1)}, x^{(i)}), \quad i = \overline{1,3},$$

та рівняння неперервності для компонент реакції

$$\frac{\partial C_s^i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J_s^i - U_s^i, \quad (2)$$

де $J_s^i = C_s^i \frac{e z_s D_s^i}{kT} \frac{\partial \varphi^i}{\partial x} - D_s^i \frac{\partial C_s^i}{\partial x}$. Тут e - заряд протона; φ - електростатичний потенціал; T - абсолютна температура; k - постійна Больцмана; ε_0 та ε - абсолютна і відносна діелектричні постійні; Q - густина вбудованого заряду; J_s , D_s , C_s , U_s , z_s - потік, коефіцієнт дифузії, концентрація, швидкість генерації-рекомбінації і заряд компонент; $s = G, O, H^+, WH, AH, W^-, A$

(G - субстрат (глюкоза), O - кисень, H^+ - протони, WH - нейтральний буфер (наприклад, кров), AH - кислота, W^- - буферна основа, A^- - основа. Заряд $z_s = 0$ для компонент G, O, WH, AH , $z_H = +1$, $z_W = -1$).

Для $s = G, O$ швидкість рекомбінації задовольняє закону Міхаеліса-Ментена і не залежить від концентрації водню C_H :

$$U_G^i = 2U_O^i = \\ = V_{max} \frac{C_G^i C_O^i}{K_G^M C_G^i + K_O^M C_O^i + C_G^i C_O^i},$$

а для інших компонент

$$U_H^i = -U_G^i = k_b(K_W C_{WH}^i - C_W^i C_H^i); \\ U_W^i = -U_{WH}^i = -k_b(K_W C_{WH}^i - C_W^i C_H^i); \quad (4) \\ U_{AH}^i = -U_A^i, \quad U_A^i = 0,$$

де $K_s^M (s = G, O)$ - постійні Міхаеліса, V_{max} - максимальна швидкість каталітичної реакції, K_W , k_b - постійні реакції.

До складу моделі також входять граничні умови

$$\varphi^1(0, t) = 0, \quad \varphi^3(d, t) = -\frac{\varepsilon^3}{\varepsilon_T} d_T \frac{\partial \varphi^3(d, t)}{\partial x}; \quad (5)$$

$$C_s^1(0, t) = C_{s0}^B + (C_s^B - C_{s0}^B)(1 - e^{-t/T}) + \\ R_s^{01} \frac{\partial C_s^1(0, t)}{\partial x}, \quad J_s^3(d, t) = 0;$$

та умови зшивки

$$\left[\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right]_{x^l} = 0, \quad [\varphi(x^l, t)] = 0, \quad l = 1, 2, \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_s^{n+1}(x^{(l)}, t)}{\partial x} = \frac{1}{R_s^{n+1}} [C_s(x^{(l)}, t)],$$

$$[J_s(x^{(l)}, t)] = 0, [J_s(x^{(l)}, t)] = 0, l = 1, 2. \quad (8)$$

Тут ε_T , d_T - відносна діелектрична постійна і товщина матеріалу трансдюзера; C_{s0}^B , C_s^B - концентрації компонент в тестовому розчині при $t = 0$ і $t > 0$, відповідно, R_s^{mn} - коефіцієнт передачі мас для компоненти s між шарами m і n ; τ - постійна часу.

2. Дискретна модель

Для знаходження наближеного розв'язку задачі (1)-(8) застосуємо широко відомий в чисельному моделюванні напівпровідників метод

Шарфеттера-Гуммеля [3,4]: побудуємо явну схему, в якій в рівнянні Пуассона концентрації C_s на $l+1$ -му часовому шарі виражаються через концентрації на l -му шарі і потоки J_s з рівнянь нерозривності. Нелінійні члени в рівняннях нерозривності лінеаризуються відносно шуканої концентрації, а значення інших концентрацій беруться з попереднього кроку [5,6].

Оскільки профілі концентрацій біля лівої границі змінюються значно швидше, то використовуватимемо нерівномірну сітку:

$$\bar{\omega} = \{x = x_i | i = \overline{1, N}, x_1 = 0, x_N = 1,$$

$$x_K = x_{K+1} = x^{(1)}, x_M = x_{M+1} = x^{(2)}\},$$

вузли якої на кожному інтервалі $(x^{(i-1)}, x^{(i)})$ знаходяться за допомогою рівняння

$$\xi = (1 - e^{-ax} + x e^{-a} + x)/2,$$

де ξ - вузли рівномірної на $[0, 1]$ сітки. Таке перетворення відображає відрізок $[0, 1]$ на $[0, 1]$ і згущає вузли сітки поблизу лівої границі. Параметр a вибирається з міркувань, щоб значення розв'язку у вузлах сітки були приблизно еквідистантними, а саме $a = d_{enz}/L_D$, де d_{enz} - товщина ензимного шару, а $L_D = \min\{L_D^G, L_D^O\}$,

$$L_D^{G,O} = \sqrt{D_{G,O} \frac{K_{G,O}^M}{V_{max}} \left(1 + \frac{K_{O,G}^M C_{G,O}}{K_{G,O}^M C_{O,G}} + \frac{C_{G,O}}{K_{G,O}^M} \right)}$$

Позначимо $h_i = x_i - x_{i-1}$, $h_i = (h_{i+1} + h_i)/2$ для $i = \overline{2, K-1, K+2, M-1, M+2, N-1}$, $h_i = h_i/2$ для $i = 1, K, K+1, M, M+1, N$; $\tau = \bar{t} - t$. Позначення з "-" будемо використовувати на даному часовому шарі, а без "-" на попередньому.

В результаті отримаємо явну різницеву схему

$$\Lambda^h \bar{\varphi} = \\ = -\alpha e \sum_s z_s \bar{C}_s + \bar{Q} + \alpha e \gamma \tau (\Lambda^h(\bar{C}_s) \bar{\varphi} - \bar{F}). \quad (9)$$

$$\frac{\bar{C}_s - C_s}{\tau} = \Lambda_s^h J_s - U_s, \quad (10)$$

де $J_s = D_s (\frac{\partial C_s}{\partial x} - z_s C_s \frac{\partial \varphi}{\partial x})$, $\alpha = e(x^{(3)})^2 / \varepsilon_0 \frac{kT}{e}$, $\gamma = \tau / (x^{(3)})^2$.

Оператори просторової дискретизації визначаються наступним чином

$$\Lambda^h \varphi = \begin{cases} \frac{\varepsilon_j}{h_i} \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h_{i+1}} - \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h_i} \right), & j=1, \quad i = \overline{2, K-2} \\ \frac{1}{h_i} \left(\varepsilon_{j+1} \frac{\varphi_{i+2} - \varphi_{i+1}}{h_{i+2}} - \varepsilon_j \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h_i} \right), & j=2, \quad i = \overline{K+2, M-2} \\ \frac{1}{h_{i+1}} \left(\varepsilon_{j+1} \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h_{i+1}} - \varepsilon_j \frac{\varphi_{i-1} - \varphi_{i-2}}{h_{i-1}} \right), & j=3, \quad i = \overline{M+2, N-1} \\ \frac{1}{h_i} \left(\varepsilon_{j+1} \frac{\varphi_{i+2} - \varphi_{i+1}}{h_{i+2}} - \varepsilon_j \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h_i} \right), & j=1, \quad i = K \\ & j=2, \quad i = M \\ \frac{1}{h_{i+1}} \left(\varepsilon_{j+1} \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h_{i+1}} - \varepsilon_j \frac{\varphi_{i-1} - \varphi_{i-2}}{h_{i-1}} \right), & j=1, \quad i = K+1 \\ & j=2, \quad i = M+1 \\ \frac{\varepsilon_3}{h_N} \left(\frac{\varphi_N - \varphi_{N-1}}{h_N} - \frac{\varepsilon_7}{\varepsilon_3 d_T} \varphi_N \right), & \end{cases}$$

$$\Lambda_s^h J_s = \begin{cases} \frac{1}{h_i} (J_{si+1/2} - J_{si-1/2}), & i = \overline{2, K-1, K+2, M-1, M+2, N-1} \\ \frac{1}{h_i} (J_{si} - J_{si-1/2}), & i = K, M, N \\ \frac{1}{h_{i+1}} (J_{si+1/2} - J_{si}), & i = 1, K+1, M+1, \end{cases}$$

$$\Lambda^h(\overline{C})\varphi = \begin{cases} \frac{1}{h_i} \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h_{i+1}} L_{i+1/2} - \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h_i} L_{i-1/2} \right), & i = \overline{2, K-1, K+2, M-1, M+2, N-1} \\ \frac{1}{h_i} \left(\frac{\varphi_{i+2} - \varphi_{i+1}}{h_{i+2}} L_{i+3/2} - \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h_i} L_{i-1/2} \right), & i = K, M \\ \frac{1}{h_{i+1}} \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h_{i+1}} L_{i+1/2} - \frac{\varphi_{i-1} - \varphi_{i-2}}{h_{i-1}} L_{i-3/2} \right), & i = K+1, M+1 \\ -\frac{1}{h_N} \frac{\varphi_N - \varphi_{N-1}}{h_N} L_{N-1/2}, & i = N \end{cases}$$

$$\overline{F} = \begin{cases} \frac{1}{h_i} (G_{i+1/2} - G_{i-1/2}), & i = \overline{2, K-1, K+2, M-1, M+2, N-1} \\ \frac{1}{h_i} (G_{i+3/2} - G_{i-1/2}), & i = K, M \\ \frac{1}{h_{i+1}} (G_{i+1/2} - G_{i-3/2}), & i = K+1, M+1 \\ -\frac{1}{h_N} G_{N-1/2}, & i = N \end{cases}$$

де

$$J_{si+1/2} = \frac{D_{si+1/2}}{h_{i+1}} \frac{dv_{si}}{e^{dv_{si}} - 1} (C_{si+1} - C_{si} e^{dv_{si}-1}),$$

$$dv_{si} = z_s(\varphi_{i+1} - \varphi_i).$$

J_{si}, J_{si+1} ($i = K, M$) визначаються з умов зшивки

$$J_{si} = J_{si+1} = D_{si+1} \left(\frac{C_{si+2} - C_{si}}{R_s^K} - z_s C_{si+1} \frac{\varphi_{i+2} - \varphi_{i+1}}{h_{i+2}} \right)$$

і граничних умов для $i = 1, N$

$$J_{s1} = D_{s1} \left[\left(\frac{1}{R_s^0} - z_s \frac{\varphi_2}{h_2} \right) C_{s1} - \right.$$

$$\left. \frac{1}{R_s^0} (C_{s0}^B + (C_s^B - C_{s0}^B)(1 - e^{-t/\tau})) \right], \quad J_{sN} = 0.$$

Тут

$$L_{i+1/2} = D_{Hi+1/2} (C_{Hi+1} f(\varphi_{i+1} - \varphi_i) +$$

$$C_{Hi} (1 - f(\varphi_{i+1} - \varphi_i))) +$$

$$D_{Wi+1/2} (C_{Wi+1} (1 - f(\varphi_{i+1} - \varphi_i)) +$$

$$C_{Wi} (\varphi_{i+1} - \varphi_i)).$$

$$G_{i+1/2} = f_1(\varphi_{i+1} - \varphi_i) \left(D_{H_{i+1/2}} \frac{C_{H_{i+1}} - C_{H_i}}{h_{i+1/2}} - \right. \\ \left. D_{W_{i+1/2}} \frac{C_{W_{i+1}} - C_{W_i}}{h_{i+1/2}} \right),$$

$$f(x) = \begin{cases} \frac{(x-1)e^x + 1}{(e^x - 1)^2}, & x \neq 0 \\ 1/2, & x = 0 \end{cases},$$

$$f_1(x) = \begin{cases} \frac{x^2 e^{2x}}{(e^x - 1)^2}, & x \neq 0 \\ 1, & x = 0 \end{cases}.$$

$$\bar{p} = \begin{cases} p_i, & i = \overline{1, K-1, K+2, M-1, M+2, N} \\ \frac{h_{i-1}}{2h_i} p_i + \frac{h_{i+1}}{2h_i} p_{i+1}, & i = K, M \\ \frac{h_{i-1}}{2h_i} p_{i-1} + \frac{h_{i+1}}{2h_i} p_{i+1}, & i = K+1, M+1 \end{cases}$$

де $p \in C_0, Q$.

Таким чином, спочатку знаходимо $\bar{p}$ з системи лінійних рівнянь (9), беручи C_s з попереднього шару. Потім знаходимо $\bar{C}_s$ з системи лінійних рівнянь (10) ($s = O, G, H^+, W^-, WH, AH, A$). Значення $\bar{C}_s$ можна обчислювати паралельно.

3. Результати чисельного експерименту

В результаті чисельного експерименту було отримано ряд корисних для практики результатів, зокрема те, що як позитивно, так і негативно заряджені додаткові шари суттєво змінюють чутливість сенсора. Чисельний експеримент також показав (а фізичний підтвердив), що додавання заряджених шарів може покращувати роботу сенсора. Результати чисельного експерименту також допомогли пояснити результати фізичного експерименту.

Список використаних джерел

1. Jaffrezic-Renault N., Martelet C., El'skaya A. et al. Optimization of membrane material for the development of miniaturized biosensors. New trends in biosensor development. NATO Advanced Research Workshop, July 6-8, 1998, Kiev, v.4(2004), pp.324-349.

2. Soldatkin A., El'skaya A. et al. Glucose-sensitive field-effect transistor with additional Nafion membrane. Anal. Chem. Acta, v.283(1993), pp.695-701.

3. Selberher S. Analysis and simulation of semiconductor devices. New York: Springer, 1984.

4. Садовников А.Д., Черняев А.В. Сравнение разностных схем для моделирования переходных процессов в биполярных полупроводниковых структурах. Дифференциальные уравнения, v.23(1987), с.1262-1268.

5. Jerome J.W. Analysis of charge transport: a mathematical study of semiconductor devices. Berlin: Springer, 1996.

6. Makarov V.L., Gavriluk I.P., Rossokhata N.O., Rossokhaty V.K. Mathematical model of the graded-band-gap semiconductor structure with high internal quantum efficiency. SIAM Journal of Appl. Math., v.59(1999), pp.2121-2138.

Надійшла до редакції 5.12.2006

УДК 514.17

Богдан В. Рубльов

Порівняння метрики дотичних та метрики Хаусдорфа

В статті вивчаються властивості гладкої метрики, класу фігур, в якій вона будується, поняття узагальненої дотичної та канонічного розбиття межі. Розглянутий взаємозв'язок гладкої метрики та метрики Хаусдорфа.

Ключові слова: узагальнена дотична, метрика Хаусдорфа, гладка метрика.

В наш час особливо важливе значення мають швидкі обробки зображень, особливо для випадку евклідової площини. Значну частину всіляких образів реальних об'єктів (сукупності точок, обмежувальний контур, дискретизовані зображення тощо) можна вважати геометричними елементами. Саме тому зараз бурхливого розвитку набула обчислювальна геометрія – наука, що займається саме аналізом та обробкою геометричної інформації [1,2]. Деякі з подібних проблем, такі як побудова опуклої оболонки, перетин многокутників та інші мають досить довгу історію, для них знайдені вже алгоритми або оптимальні, або близькі до оптимальних, а також проведений їх всебічний аналіз (для найгірших випадків, в середньому й т.п.). Внаслідок бурхливого розвитку техніки та можливостей її застосування в різних галузях народного господарства значно зросла кількість проблем, що вимагають побудови нових алгоритмів швидкого розпізнавання образів та аналізу зображень. Серед багатьох існуючих подібних алгоритмів аналізу зображень велике місце займають так звані емпіричні алгоритми, тобто такі, що базуються на природних для певної проблеми припущеннях, влаштовують замовника проблеми, але строго математично не є обґрунтованими. До подібних алгоритмів можна віднести й проблему обчислення периметра фігури за заданим дискретизованим зображенням [3,4]. Але також очевидно, що й потреба в розробках математичного апарату, на якому будуються усі подібні алгоритми та методи, буде зростати. Тому перевагу слід надавати універсальним методам досліджень, тобто таким, що зможуть знайти своє використання при дослідженні якомога більшої кількості різноманітних задач чи алгоритмів. Все

Bogdan V. Rublyov

Comparison of tangent and Hausdorff metric

In this paper properties of smooth metric, class of figures it is built upon, definition of generalized tangent and canonical border division studied. Association between smooth and Hausdorff metrics discussed.

Key Words: generalized tangent, tangent metric, Hausdorff metric.

це стимулює дослідження різних метрик, які можуть стати в нагоді для подібних досліджень. Одним з прикладів подібної метрики є гладка метрика, дослідженню якої й присвячена ця робота.

Базовий клас фігур $S^{(0)}$

Розглянемо клас фігур на площині $S^{(1)}$ усіх плоских однозв'язних областей, що обмежені замкнутою спрямованою жордановою кривою. На межі довільної фігури $\Phi \in S^{(1)}$ визначимо

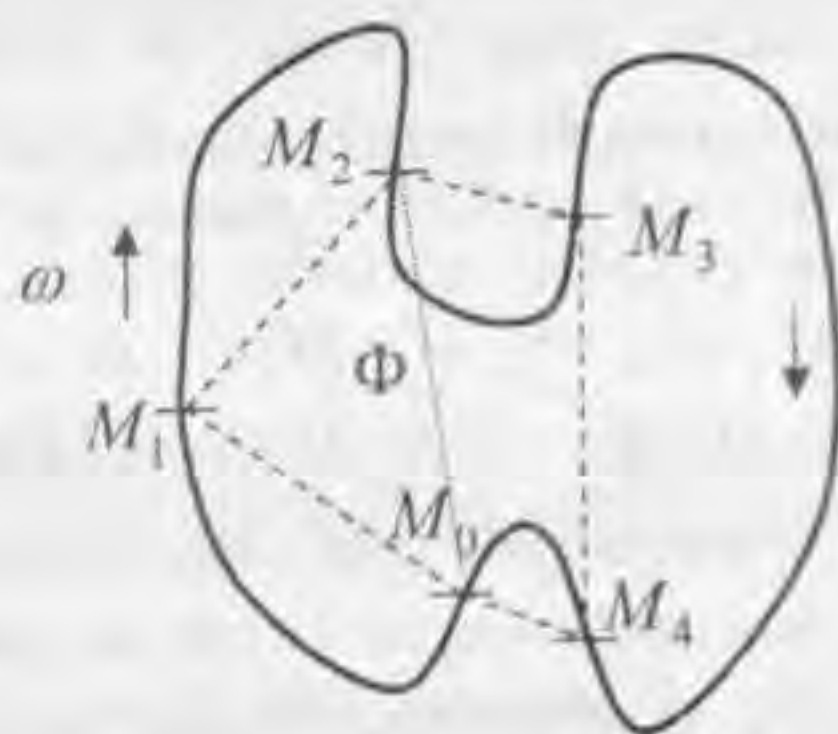


Рис. 1

орієнтацію ω , що відповідає руху за годинниковою стрілкою, тобто при русі вздовж межі цієї фігури вона залишається праворуч.

Нехай на межі деякої фігури $\Phi \in S^{(1)}$ можна вибрати скінчену кількість точок $M_0, M_1, \dots, M_{n-1}$ (покладемо при цьому $M_n = M_0, M_{n+1} = M_1$), які слідує у вказаному порядку в напрямі орієнтації ω , та задовольняють такі умови:

- 1) $\cup M_i M_{i+1} \neq [M_i M_{i+1}]$, $i = \overline{0, n-1}$;
- 2) Фігури F_i , що обмежені $\cup M_i M_{i+1}$ та відрізком $[M_i M_{i+1}]$ є опуклими, $i = \overline{0, n-1}$;
- 3) Фігури G_i , що обмежені $\cup M_i M_{i+2}$ та відрізком $[M_i M_{i+2}]$ не опуклі, $i = \overline{0, n-1}$.

Тоді таку фігуру Φ будемо називати фігурою з опукло-угнутою межею (ФОУМ). Сукупність усіх таких фігур на площини позначимо $S^{(0)}$. Сукупність точок $M_0, M_1, \dots, M_{n-1}$ назовемо канонічним розбиттям $P_n = \{M_i | i = \overline{0, n-1}\}$ межі фігури класу $S^{(0)}$. Дугу $\cup M_i M_{i+1} \subset \Gamma(\Phi)$ назовемо опуклою, якщо існує відрізок CD з кінцями на $\cup M_i M_{i+1}$ що повністю розташований всередині фігури Φ , інакше цю дугу, що з'єднує сусідні точки канонічного розбиття, назовемо угнутою.

Таким чином, якщо $\Phi \in S^{(0)}$, то її межа $\Gamma(\Phi)$ розбивається на опуклі та угнуті ділянки точками деякого її канонічного розбиття. Якщо при цьому виявилось, що дуги $\cup M_i M_{i+1}$ та $\cup M_{i+1} M_{i+2}$ мають різний характер опуклості (одна опукла, інша угнута), то точка M_{i+1} називається точкою перегину межі фігури Φ .

На рис.1 ми бачимо приклад ФОУМ, її канонічне розбиття складають 5 точок, тобто $P_5 = \{M_0, M_1, M_2, M_3, M_4\}$. При цьому дуги $\cup M_0 M_1$, $\cup M_1 M_2$, $\cup M_3 M_4$ – опуклі, а інші дві дуги $\cup M_2 M_3$, $\cup M_4 M_0$ – угнуті. Легко побачити, що фігура, яка обмежена $\cup M_0 M_2$ та відрізком $M_0 M_2$ не опукла. Серед точок розбиття лише M_1 не є точкою перегину, решта – точки перегину.

Властивості канонічного розбиття

1) Якщо Φ – опукла фігура, то канонічне розбиття її межі складається з однієї точки: $P_0 = \{M_0\}$, в сенсі наших позначень при цьому $M_0 = M_1 = M_2$ (рис.2).

2) Існують фігури та канонічні розбиття їх межі, не усі точки яких канонічного розбиття є точками перегину. В якості відповідного

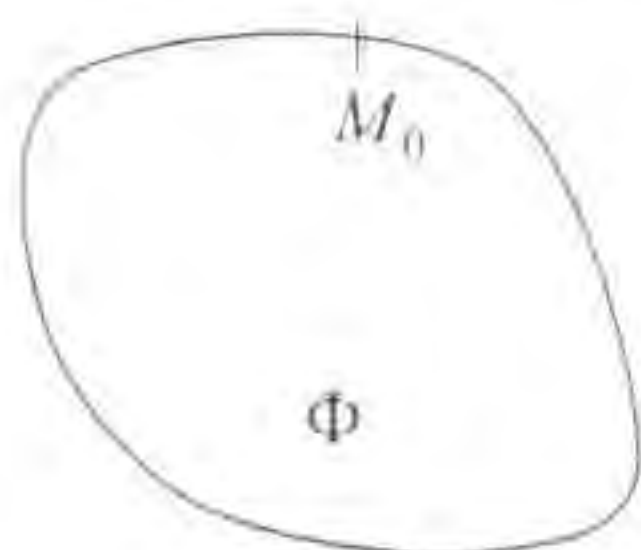


Рис. 2

прикладу можна розглянути фігуру, що зображена на рис.1.

3) У одній фігурі можуть існувати різні канонічні розбиття. Розглянемо ФОУМ, що зображена на рис.3, частину її межі утворює відрізок AB , і точка канонічного розбиття M_3 може бути вибраною довільною на цьому відрізку. Так само на рис.1 розташування точки M_1 строго не визначено. Так само у багатьох ФОУМ існує єдине канонічне розбиття (рис.4). Іншого вибору розташування точок M_0, M_1, M_2, M_3 не існує.

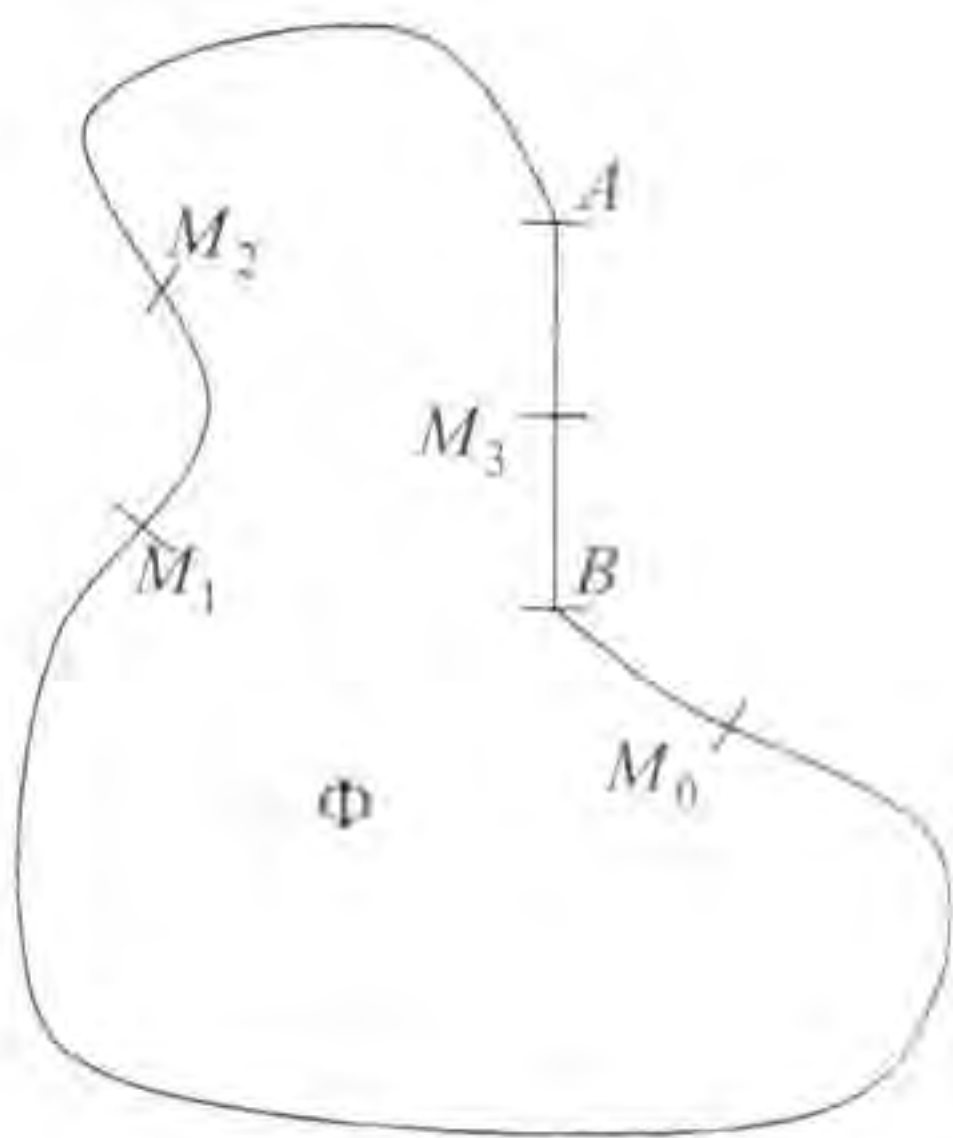


Рис. 3

4) Існують фігури, у яких різні канонічні розбиття мають різну кількість точок (рис.5).

5) Існують ФОУМ, у яких в залежності від канонічного розбиття, їх межі можуть містити або не містити угнутих ділянок (рис.6).

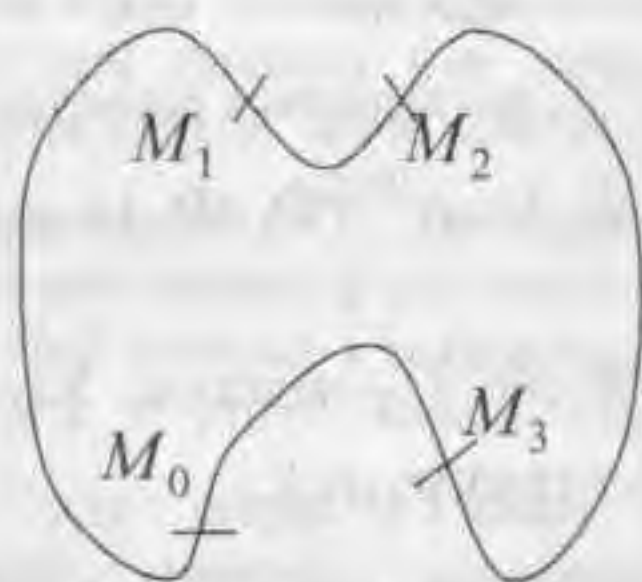
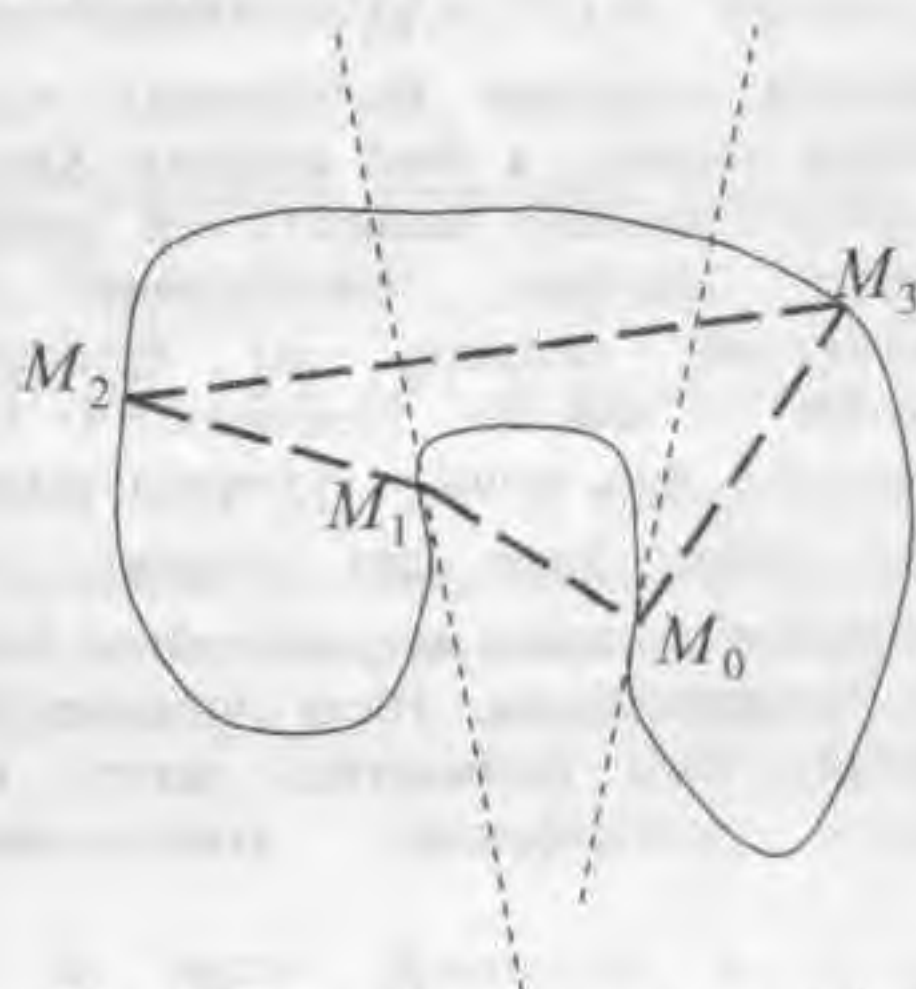


Рис. 4

Зрозуміло, що така ситуація можлива лише у випадку, коли частина межі фігури складають прямолінійні відрізки, оскільки лише вони можуть бути частинами опуклих та угнутих функцій.



При більш детальному дослідженні можна одержати й інші властивості визначеного класу фігур, але з цим ми зустрінемося при подальших дослідженнях, крім того подальші дослідження можуть провести й студенти, яким до вподоби запропонована тематика досліджень.

Визначення гладкої метрики

Введемо тепер поняття узагальненої дотичної (УД) до фігури $\Phi \in S^{(0)}$. Виберемо на її межі довільну точку M . Якщо $M_0, M_1, \dots, M_{n-1}$ – канонічне розбиття $\Gamma(\Phi)$, і точка M до нього не належить, то виберемо дві дуги $\cup DM, \cup MC$ такі, щоб $\cup DC \subset M_i M_{i+1}$, де $M \in \cup M_i M_{i+1}$. Якщо $M = M_i$ при деякому $i \in \{0, 1, \dots, n-1\}$, то нехай точки $D, C \in \Gamma(\Phi)$ так, щоб

$$\cup DM \subset \cup M_{i-1} M_i, \text{ і } \cup MC \subset \cup M_i M_{i+1}.$$

Побудуємо послідовність точок $\{D_n\} \subset \cup DM$ так, щоб вона збігалася до точки M . Розглянемо послідовність січних, що проходять через точки D_n і M . Так як дуга $\cup DM$ є частиною опуклої або угнутої дуги, то існує єдине граничне положення січних $D_n M$ – пряма l_1 . Аналогічно будується граничне положення січних l_2 при прямуванні послідовності точок $\{C_n\}$ до точки M вздовж дуги $\cup MC$. Пряма l , що проходить через точку $M \in \Gamma(\Phi)$ називається узагальненою дотичною (УД) до фігури Φ в точці M , якщо виконується одна з наступних

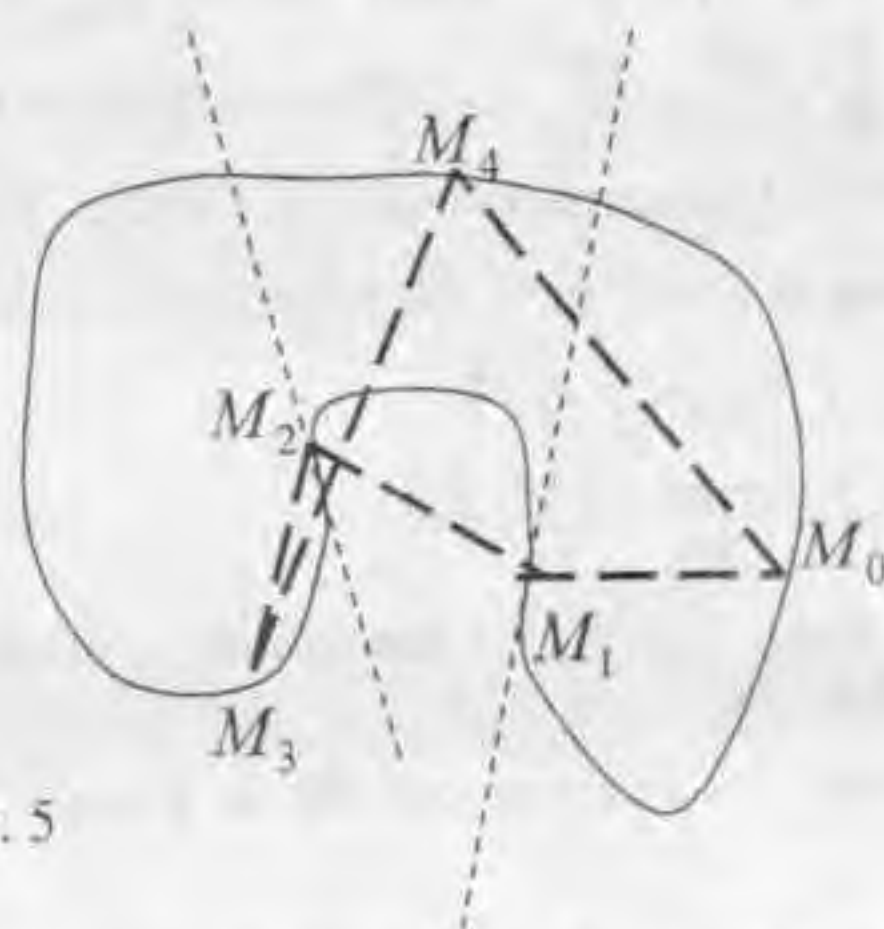


Рис. 5

трьох умов: 1) існує таке додатне число δ , що відрізок $[PQ] = l \cap \bar{S}(M, \delta)$ повністю належить фігурі Φ ; 2) існує таке додатне число δ , що відрізок $[PQ] = l \cap \bar{S}(M, \delta)$ не має спільних внутрішніх точок з фігурою Φ ; 3) пряма l співпадає з однією з двох прямих l_1 або l_2 .

Нехай $\Phi_1, \Phi_2 \in S^{(0)}$; виберемо довільну точку $M_1 \in \Phi_1$, і знайдемо для неї таку точку

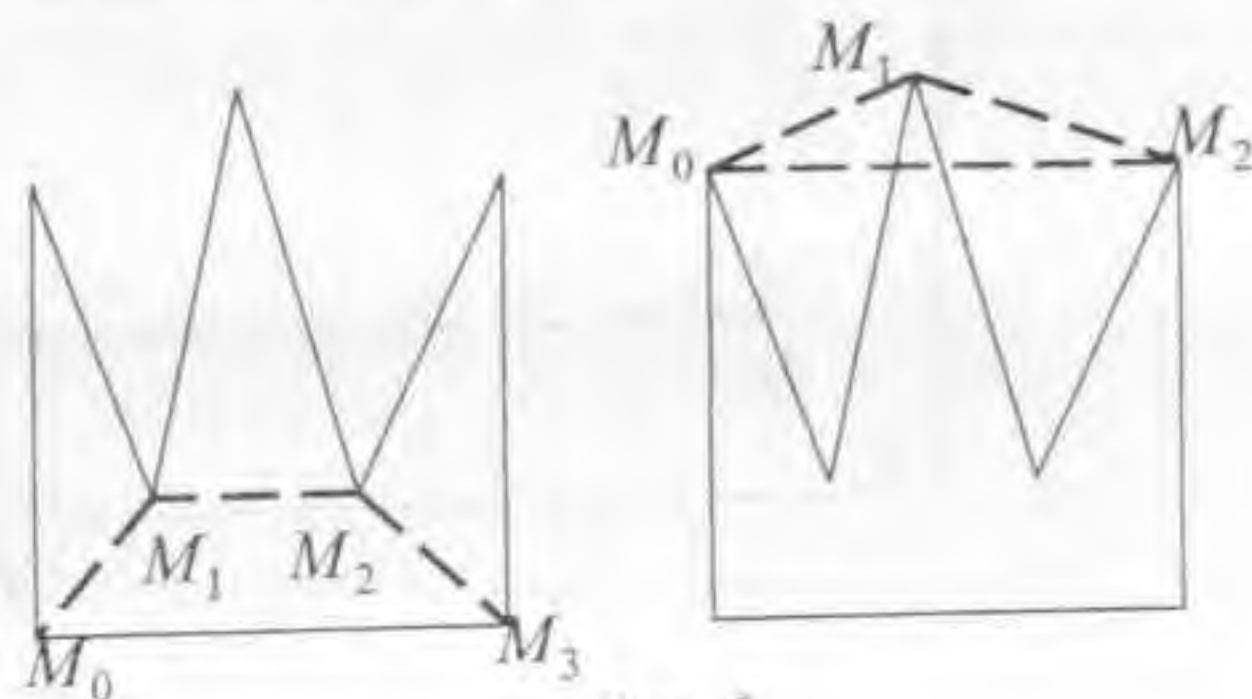


Рис. 6

$M_2^{(1)} \in \Phi_2$, що задовольняє умову:
 $M_1 M_2^{(1)} = \min_{M_2 \in \Phi_2} M_1 M_2$, покладемо

$r_1 = \max_{M_1 \in \Phi_1} M_1 M_2^{(1)}$, аналогічно визначається й

$r_2 = \max_{M_2 \in \Phi_2} M_2 M_1^{(2)}$. Визначимо метрику за

допомогою формули

$\rho^{(0)}(\Phi_1, \Phi_2) = \max\{r_1, r_2\}$. Легко зрозуміти,

що $\rho^{(0)}$ є метрикою Хаусдорфа [5]. Тепер проведемо узагальнення цієї загальновідомої метрики.

Нехай $\Phi_1, \Phi_2 \in S^{(0)}$ – довільні фігури,

$M_1 \in \Gamma(\Phi_1)$, l_1 – деяка УД до Φ_1 в точці

M_1 ; $l_2^{(1)}, l_2^{(2)}, \dots, l_2^{(m)}$ – скінченна кількість УД до

фігури Φ_2 , паралельних l_1 , нехай $l_2^{(j)}$ –

найближча з них до l_1 . Покладемо послідовно –

$r_1(M_1, l_1) = \rho(l_1, l_2^{(j)})$;

$r_1(M_1) = \max_{l_1 \in \Gamma(\Phi_1)} r_1(M_1, l_1)$,

$r_1 = \max_{M_1 \in \Gamma(\Phi_1)} r_1(M_1)$. Аналогічно, визначимо

величину r_2 . Гладкою метрикою в класі $S^{(0)}$

називається відстань між фігурами

$\Phi_1, \Phi_2 \in S^{(0)}$, яка задається рівністю:

$$\rho^{(1)}(\Phi_1, \Phi_2) = \rho^{(0)}(\Phi_1, \Phi_2) + \rho_1(\Phi_1, \Phi_2)$$

де $\rho^{(0)}(\Phi_1, \Phi_2)$ – відстань Хаусдорфа, а

$$\rho_1(\Phi_1, \Phi_2) = \max\{r_1, r_2\}.$$

Той факт, що функціонал $\rho^{(1)}(\Phi_1, \Phi_2)$ є

метрикою. Доведення цього твердження

наводиться в роботах [6].

Порівняння з метрикою Хаусдорфа

Якщо подивитись на визначення гладкої

метрики $\rho^{(1)} = \rho^{(0)} + \rho_1$ – то виникає природне

запитання стосовно необхідності в ньому

першого доданку, а саме метрики Хаусдорфа.

Зрозуміло, що його наявність «не заважає», а

навпаки спрощує дослідження певних

властивостей метрики, які безпосередньо

слідують з власних властивостей метрики

Хаусдорфа. Але, якщо усі основні властивості

мають місце лише для доданку ρ_1 – то

навантаження гладкої метрики зайвим доданком

стає неприпустимим. Після чималих марних

намагань його позбавитись автору вдалося

навести контрприклад, який заперечує

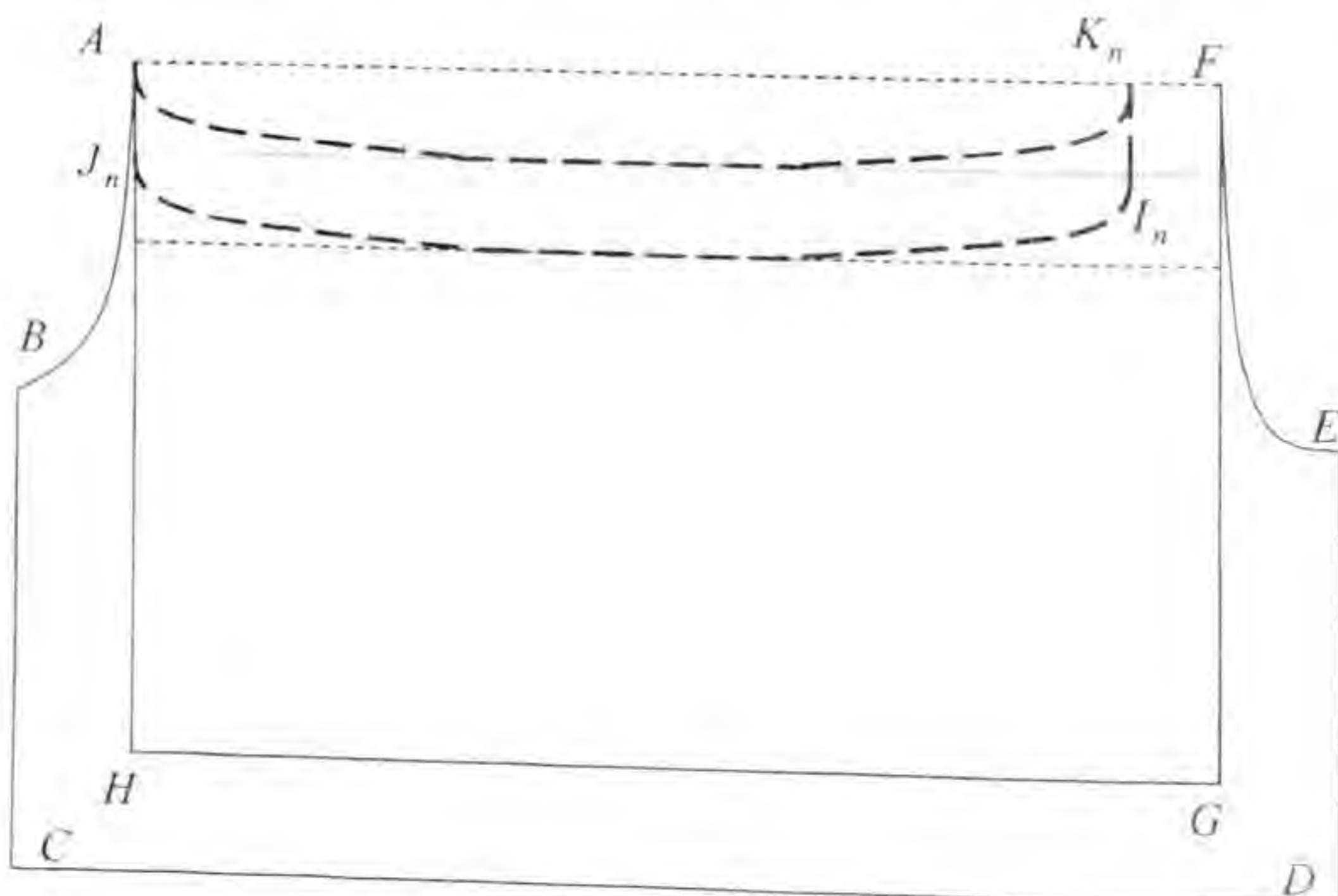


Рис. 7

відкидання цього доданку в загальному випадку. Спочатку цей приклад був побудований для незамкнених кривих. Хоча вони безпосередньо й не належать класу $S^{(0)}$, але не важко провести відповідні визначення й для таких геометричних об'єктів. Цей приклад я залишаю, як вправу для студентів, а в статті наведу лише основний приклад, для фігур з класу $S^{(0)}$. Буде побудовано приклад послідовності фігур $(\Phi_n) \subset S^{(0)}$, для яких $\rho_1(\Phi_n, \Phi_0) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, а $\rho^{(0)}(\Phi_n, \Phi_0) \not\rightarrow 0$, для деякої фігури $\Phi_0 \in S^{(0)}$.

На рис.7 ми зображено $\Phi_0 = ABCDEFGH$, $\Phi_n = ABCDEFGHJ_n I_n K_n A$. При цьому відстані $AJ_n = I_n K_n = K_n F = \frac{1}{n}$. Якщо провести відповідні обчислення, одержимо що $\rho_1(\Phi_n, \Phi_0) = \frac{2}{n} \rightarrow 0$, а $\rho^{(0)}(\Phi_n, \Phi_0) \geq \frac{1}{2} AF$. Це відбувається тому, що точки A, F, J_n, K_n є точками звороту, тобто точками, для яких будь-яка пряма, що через неї проходить є узагальненою дотичною до цієї фігури.

Висновки

Як це часто трапляється в наукових дослідженнях перша спроба визначити нові поняття з певними властивостями не завжди буває ідеальною. Так клас фігур $S^{(0)}$ з межею, що складається з кусково опуклих та угнутих дуг, і гладка метрика цілком задовольняли нас для деяких досліджень [6]. При більш глибокому погляді на ці поняття, подальші дослідження їх властивостей, показують напрям подальших досліджень та узагальнень. Бажаю провести їх цікаві й корисні вдосконалення. Клас фігур розширити до повного простору принаймні в

метриці Хаусдорфа, узагальнити клас фігур на випадок зліченої кількості опуклих та вгнутих ділянок межі. Стосовно останнього результату про порівняння метрики Хаусдорфа та метрики дотичних, то його не можна вважати остаточним. При дослідженні периметрів фігур у гладких метриках була аналогічна ситуація – якщо клас фігур містив фігур, у яких на межі існують точки звороту, то основний результат про слушність оцінки периметра фігур не мав місце. Це дає змогу припустити, що подальші спроби позбавитись доданку $\rho^{(0)}$ не безпідставні, при умові, що ці дослідження будуть проведені у підкласі фігур, що не містять точок звороту. Усі ці питання будуть предметом подальших досліджень автора та його учнів.

Література

1. Gallier, Jean H. Curves and surfaces in geometric modeling: theory and algorithms. – San Fr.: Morgan Kaufmann Publishers, 2000 – 464p.
2. Computational geometry: algorithms and application / Marc de Berg, Marc van Kreveld ... - Berlin; Heidelberg; ... ; Tokyo: Springer, 2000 – 367p.
3. Петунин Ю.И., Шульдешов Г.А. Вычисление периметра плоской фигуры по ее дискретизованному изображению // Кибернетика. – 1985. – № 2. – с.1–7.
4. Рублев Б.В. Алгоритм оценивания периметра плоской фигуры по ее дискретизованному изображению // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – № 4 – с.101–110.
5. Берже М. Геометрия. Том 1. – М.: Мир, 1984 – 560с.
6. Рублев Б.В., Петунин Ю.И. Гладкая метрика в классе плоских фигур с кусочно выпуклой и вогнутой границей, // Кибернетика и системный анализ. ч.1 – 1999. – № 1. – с.125–135; ч.2 – 1999. – № 2. – с. 111–120.

Надійшла до редколегії 27.04.2007

УДК 517.5

Савкіна М.Ю., к. ф.-м. н.

Існування оцінки метода найменших квадратів параметрів моделі нелінійної сплайнової регресії

Доведено існування оцінки метода найменших квадратів параметрів моделі нелінійної сплайнової регресії, де функція регресії – кубічний сплайн дефекту 2 на відрізку $[0, 1]$ з r вузлами. Розташування вузлів невідоме та підлягає оцінюванню.

Ключові слова: модель нелінійної регресії, оцінка параметрів, кубічний сплайн

В деяких застосуваннях теорії обробки спостережень бажаний такий вибір регресійної моделі[1]

$$y_i = g(t_i) + \xi_i, i = 0, 1, \dots, n, \quad (1)$$

де функція регресії $g(t)$ має вигляд

$$g(t) = \begin{cases} g_1(t, \vec{\beta}_1), & 0 \leq t \leq t_1^*, \\ g_2(t, \vec{\beta}_2), & t_1^* \leq t \leq t_2^*, \\ \vdots & \vdots \\ g_{r+1}(t, \vec{\beta}_{r+1}), & t_r^* \leq t \leq 1, \end{cases} \quad (2)$$

$\vec{\beta}_j = (\beta_{0,j}, \beta_{1,j}, \dots, \beta_{l,j}), j = 1, 2, \dots, r+1$, а $\{\xi_i, i = 0, 1, \dots, n\}$ – послідовність незалежних у сукупності випадкових величин з $E\xi_i = 0$ та $D\xi_i = \sigma^2$.

Бажаною властивістю функції $g(t)$ є її неперервність та неперервність її першої похідної, а також те, щоб функції $g_1(t, \vec{\beta}_1), g_2(t, \vec{\beta}_2), \dots, g_{r+1}(t, \vec{\beta}_{r+1})$ були поліномами: $g_l(t, \vec{\beta}_l) = \sum_{j=1}^q b_{lj} t^j$.

Якщо вектор точок з'єднання $T^* = (t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*)$ відомий, то модель (1),(2) є лінійною по параметрах $\vec{\beta}_1, \vec{\beta}_2, \dots, \vec{\beta}_{r+1}$, і знайти їх оцінки можна, використовуючи методи множинної лінійної регресії. Якщо ж вектор T^* невідомий, то модель (1),(2) стає нелінійною, й оцінювання параметрів є більш скрутним.

Наприклад, модель нелінійної сплайнової регресії використовується в радіобіології при

Savkina M.Yu., cand. ph.-math. science

The existence of estimates of least square method of parameters of nonlinear spline regression model

The existence of estimates of least square method of parameters of nonlinear spline regression model is proved, where function of regression is cubic spline on segment $[0, 1]$ with r knot points. The location of knot points isn't known and to be estimated.

Key Words: nonlinear regression model, estimate of parameters, cubic spline

вивченні впливу величини дози опромінювання на ймовірність розвитку злоякісних новоутворень в учасників ліквідації наслідків аварії на Чорнобильській атомній електростанції. Дослідження зафіксували підвищення рівня злоякісних новоутворень; для оцінки радіаційних ефектів необхідно вибрати адекватну математичну модель. В роботі[2] показано, що модель регресії, де функція регресії – лінійний сплайн з двома вузлами, розташування яких невідоме, є найбільш точною при апроксимації залежності патологічних ефектів від величини поглиненої дози опромінювання в області малих доз. Отримано, що ймовірність виникнення онкологічних захворювань має тенденцію зростати до точки переходу 1.289 сантігрей, після якої ця ймовірність починає зменшуватися. Найбільш небезпечними для розвитку радіогенних злоякісних новоутворень у осіб, що були піддані опроміненню, слід вважати малі поглинені дози радіації в інтервалі від 1 до 10 сантігрей.

Розглянемо випадок, коли функція $g(t)$ – кубічний сплайн дефекту 2, тобто

$$g_j(t, \vec{\beta}_j) = \beta_{0,j} + \beta_{1,j}t + \beta_{2,j}t^2 + \beta_{3,j}t^3,$$

$$g_j(t_j^*, \vec{\beta}_j) = g_{j+1}(t_j^*, \vec{\beta}_{j+1}),$$

$$g_j'(t_j^*, \vec{\beta}_j) = g_{j+1}'(t_j^*, \vec{\beta}_{j+1}), j = 1, 2, \dots, r.$$

Тоді її можна подати у вигляді[3]

$$g(t) = at^3 + bt^2 + ct + d + c_{3,1}(t - t_1^*)^3 + \\ g(t) = at^3 + bt^2 + ct + d + c_{3,1}(t - t_1^*)^3 + \\ + c_{3,2}(t - t_2^*)^3 + \dots + c_{3,r}(t - t_r^*)^3 + \\ + c_{2,1}(t - t_1^*)^2 + c_{2,2}(t - t_2^*)^2 + \\ + \dots + c_{2,r}(t - t_r^*)^2, \quad (3)$$

де

$$(t - t_j^*)_+ = \begin{cases} 0, & t - t_j^* \leq 0, \\ t - t_j^*, & t - t_j^* \geq 0. \end{cases}$$

Область визначення параметрів функції $g(t)$ є множиною з простору R_{3r+4}

$$V = \{(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, a, b, c, d, c_{3,1}, \dots, c_{3,r}, c_{2,1}, \\ \dots, c_{2,r}), a, b, c, d, c_{3,1}, \dots, c_{3,r}, c_{2,1}, \dots, c_{2,r} \in R_1; \\ 0 \leq t_1^* \leq t_2^* \leq \dots \leq t_r^* \leq 1\}.$$

Для оцінювання невідомих параметрів скористаємося методом найменших квадратів (МНК). Під оцінкою МНК розуміють таку точку $\theta = \{t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, a, b, c, d, c_{3,1}, \dots, c_{3,r}, c_{2,1}, \dots, c_{2,r}\} \in V$, для якої сума квадратів відхилень

$$S^2(\theta) = \sum_{i=0}^n ((y_i - g(t_i))^2$$

набуває мінімального значення.

Множину V можна подати у вигляді декартового добутку двох підмножин: $V = V_1 \times V_2$, $V_1 = \{(t_1^*, \dots, t_r^*) : 0 \leq t_1^* \leq t_2^* \leq \dots \leq t_r^* \leq 1\}$ і $V_2 = \{(a, b, c, d, c_{3,1}, \dots, c_{3,r}, c_{2,1}, \dots, c_{2,r})\}$. Зафіксуємо деяку точку $\bar{T}^* = (\bar{t}_1^*, \dots, \bar{t}_r^*) \in V_1$, вилучаючи межові точки області, та співставимо їй точку $\Psi \in V_2$, яка надає мінімум функції $S^2(\theta)$ за умовою $t_1^* = \bar{t}_1^*, \dots, t_r^* = \bar{t}_r^*$. Таке відображення множини V_1 в множину V_2 позначимо через ψ . Нехай W – множина всіх точок вигляду $(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*, \psi(t_1^*, t_2^*, \dots, t_r^*))$. Легко показати, що оцінка МНК регресії (3), якщо вона існує, належить множині W . Справді, нехай $\bar{\theta} = (\bar{t}_1^*, \dots, \bar{t}_r^*, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}, \bar{c}_{3,1}, \dots, \bar{c}_{3,r}, \bar{c}_{2,1}, \dots, \bar{c}_{2,r})$ оцінка МНК регресії (3), і $\bar{\theta} \notin W$. Тоді $S^2(\bar{\theta}) > S^2(\bar{t}_1^*, \bar{t}_2^*, \dots, \bar{t}_r^*, \psi(\bar{t}_1^*, \bar{t}_2^*, \dots, \bar{t}_r^*))$, що протирічить тому, що $\bar{\theta}$ – оцінка МНК.

Розглянемо підмножину V_1^ϵ множини V_1 :

$$V_1^\epsilon = \{(t_1^*, \dots, t_r^*) : \epsilon \leq t_1^* \leq t_2^* \leq \dots \leq t_r^* \leq \\ \leq 1 - \epsilon, |t_i^* - t_{i+1}^*| \geq \epsilon, i = 1, \dots, r - 1\}.$$

Доведемо, що відображення ψ на множині V_1^ϵ буде неперервним, тобто з того, що $T_m^* = (t_{1,m}^*, \dots, t_{r,m}^*) \rightarrow T^* = (t_1^*, \dots, t_r^*)$ при $m \rightarrow \infty$ випливає, що $B_m = \psi(T_m^*) \rightarrow B = \psi(T^*)$ при $m \rightarrow \infty$, $(T_m^*, T^* \in V_1^\epsilon)$.

Маємо $B = (X'(T^*)X(T^*))^{-1}X'(T^*)Y[4]$, де $Y = (y_0, y_1, \dots, y_n)$,

$$X(T^*) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{n^3} & \frac{1}{n^2} & \frac{1}{n} & 1 & \left(\frac{1}{n} - t_1^*\right)_+^3 & \dots & \left(\frac{1}{n} - t_r^*\right)_+^3 & \left(\frac{1}{n} - t_1^*\right)_+^2 & \dots & \left(\frac{1}{n} - t_r^*\right)_+^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \left(1 - t_1^*\right)_+^3 & \dots & \left(1 - t_r^*\right)_+^3 & \left(1 - t_1^*\right)_+^2 & \dots & \left(1 - t_r^*\right)_+^2 \end{pmatrix}$$

Позначимо

$$X(T_m^*) =$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{n^3} & \frac{1}{n^2} & \frac{1}{n} & 1 & \left(\frac{1}{n} - t_{1,m}^*\right)_+^3 & \dots & \left(\frac{1}{n} - t_{r,m}^*\right)_+^3 & \left(\frac{1}{n} - t_{1,m}^*\right)_+^2 & \dots & \left(\frac{1}{n} - t_{r,m}^*\right)_+^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \left(1 - t_{1,m}^*\right)_+^3 & \dots & \left(1 - t_{r,m}^*\right)_+^3 & \left(1 - t_{1,m}^*\right)_+^2 & \dots & \left(1 - t_{r,m}^*\right)_+^2 \end{pmatrix}.$$

Очевидно $X(T_m^*) \rightarrow X(T^*)$ при $m \rightarrow \infty$;

$$A(T_m^*) = X'(T_m^*)X(T_m^*) \rightarrow \\ \rightarrow A(T^*) = X'(T^*)X(T^*) \text{ при } m \rightarrow \infty;$$

$$A^{-1}(T_m^*) \rightarrow A^{-1}(T^*)$$

при $m \rightarrow \infty$,

Далі, $X'(T_m^*)Y \rightarrow X'(T^*)Y$, та, насамкінець,

$$B_m = A^{-1}(T_m^*)X'(T_m^*)Y \rightarrow \\ \rightarrow B = A^{-1}(T^*)X'(T^*)Y \text{ при } m \rightarrow \infty.$$

Оскільки неперервне відображення на компактній множині n -вимірного простору обмежене[5], має місце

Лема 1. Для будь-якого $\epsilon > 0$ існує таке $C(\epsilon) > 0$, що якщо $t_1^* \geq \epsilon, t_r^* \leq 1 - \epsilon, |t_j^* - t_{j+1}^*| \geq \epsilon, j = 1, \dots, r-1$, то $\|\psi(T_m^*)\| < C(\epsilon)$.

З а у в а ж е н н я. Замикання $\bar{W}^c$ множини $V^c \cap W$, де $V^c = V_1^c \times V_2$, компактне. Оскільки множина V замкнена, $W^c \subset V$.

Далі будемо вважати, що $t_i = \frac{i}{n}, i = 0, 1, \dots, n$.

Теорема. В множині V оцінка МНК слайшової регресії (3) існує.

Доведення. Припустимо, що в множині V оцінка МНК регресії (3) не існує. Це значить, що в цій множині існує нескінченна послідовність

$$\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_s, \dots \quad (4)$$

така що

$$S^2(\theta_s) = A_s \rightarrow A_0 = \inf_{\theta \in V} S^2(\theta), \text{ при } s \rightarrow \infty,$$

але не існує точки θ^* , в якій $S^2(\theta^*) = A_0$.

Кожній точці θ_s відповідає функція регресії $g_{(s)}(t)$.

Доведемо, що в множині V існує компактна підмножина, в якій можна побудувати послідовність $\theta'_0, \theta'_1, \dots, \theta'_s, \dots$ таку що $S^2(\theta'_s) \rightarrow A_0$ при $s \rightarrow \infty$.

Якщо в послідовності (4) у точок θ_s всі проміжки $[t_j^{*(s)}, t_{j+1}^{*(s)}]$ такі, що $|t_{j+1}^{*(s)} - t_j^{*(s)}| \geq \frac{1}{2n}$, то всі точки $\theta_s = (t_1^{*(s)}, t_2^{*(s)}, \dots, t_r^{*(s)}, a^{(s)}, b^{(s)}, c^{(s)}, d^{(s)}, c_{3,1}^{(s)}, \dots, c_{3,r}^{(s)}, c_{2,1}^{(s)}, \dots, c_{2,r}^{(s)})$ замінюємо точками $\theta'_s = (t_1^{*(s)}, t_2^{*(s)}, \dots, t_r^{*(s)}, \psi(t_1^{*(s)}, t_2^{*(s)}, \dots, t_r^{*(s)}))$.

Згідно з лемою 1 всі точки $\theta'_s \in V^{1/2n}$; з іншого боку, $\theta'_s \in W$, тобто $\theta'_s \in V^{1/2n} \cap W$, а значить, і його замикання. Оскільки множина компактна, в ній функція $S^2(\theta)$ досягає свого найменшого значення A_0 . Очевидно,

$$\lim_{s \rightarrow \infty} S^2(\theta'_s) = A_0.$$

Припустимо, в послідовності (4) існують точки θ_s , у яких є проміжки $[t_j^{*(s)}, t_{j+1}^{*(s)}]$ такі, що $|t_{j+1}^{*(s)} - t_j^{*(s)}| < \frac{1}{2n}$.

Позначимо через $u_j^{(s)} = [t_{j_l}^{*(s)}, t_{j_l+1}^{*(s)}]$ проміжки, для яких $|t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}| < \frac{1}{2n}, l = 1, \dots, k_s$. Можна вважати, що всі $u_j^{(s)}$ містять момент спостереження t_i , інакше функцію $g_{(s)}(t)$ на відрізку $[t_i, t_{i+1}]$, для якого $u_j^{(s)} \subset [t_i, t_{i+1}]$, замінюємо многочленом 3-го порядку $v(t)$, який задовільняє умови

$$v(t_i) = g_{(s)}(t_i), v(t_{i+1}) = g_{(s)}(t_{i+1}),$$

$$v'(t_i) = g'_{(s)}(t_i), v'(t_{i+1}) = g'_{(s)}(t_{i+1}).$$

Такий многочлен існує та єдиний. Оскільки $S^2(\theta_s) = S^2(\bar{\theta}_s)$, де $\bar{\theta}_s$ – точка з V , яка відповідає новій функції $\bar{g}_{(s)}(t)$, в послідовності (4) точку θ_s можна замінити точкою $\bar{\theta}_s$. Крім того, для нових $t_{j_l}^{*(s)}$ та $t_{j_l+1}^{*(s)}$ маємо $|t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}| = \frac{1}{n}$.

Отже, нехай

$$t_i \in u_j^{(s)};$$

$$g_{(s)}(t) = a_3 t^3 + a_2 t^2 + a_1 t + a_0, \text{ коли } t \in [t_{j_l-1}^{*(s)}, t_{j_l}^{*(s)}];$$

$$g_{(s)}(t) = b_3 t^3 + b_2 t^2 + b_1 t + b_0, \text{ коли } t \in [t_{j_l+1}^{*(s)}, t_{j_l+2}^{*(s)}].$$

Тоді функцію $g_{(s)}(t)$ на проміжку $u_j^{(s)}$ можна подати у вигляді[3]:

$$g_{(s)}(t) = \left(\frac{t_{j_l+1}^{*(s)} - t}{t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}} \right)^2 \left(1 + 2 * \frac{t - t_{j_l}^{*(s)}}{t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}} \right) * \\ * (a_3 (t_{j_l}^{*(s)})^3 + a_2 (t_{j_l}^{*(s)})^2 + a_1 (t_{j_l}^{*(s)}) + a_0) + \\ + \left(\frac{t - t_{j_l}^{*(s)}}{t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}} \right)^2 \left(3 - 2 * \frac{t - t_{j_l}^{*(s)}}{t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}} \right) *$$

$$\begin{aligned} & * (b_3(t_{j_l+1}^{*(s)})^3 + b_2(t_{j_l+1}^{*(s)})^2 + b_1(t_{j_l+1}^{*(s)}) + b_0) + \\ & + \left(\frac{t_{j_l+1}^{*(s)} - t}{t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}} \right)^2 (t - t_{j_l}^{*(s)}) * \\ & + (3a_3(t_{j_l}^{*(s)})^2 + 2a_2(t_{j_l}^{*(s)}) + a_1) - \\ & - \left(\frac{t - t_{j_l}^{*(s)}}{t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)}} \right)^2 (t_{j_l+1}^{*(s)} - t) * \\ & * (3b_3(t_{j_l+1}^{*(s)})^2 + 2b_2(t_{j_l+1}^{*(s)}) + b_1). \end{aligned} \quad (5)$$

Позначимо $G = g_{(s)}(t_i)$, $h_1^* = t_i - t_{j_l}^{*(s)}$, $h_2^* = t_{j_l+1}^{*(s)} - t_i$. Підставимо значення t_i в (5). Отримаємо

$$\begin{aligned} G &= \left(\frac{h_2^*}{h_1^* + h_2^*} \right)^2 \left(1 + 2 * \frac{h_1^*}{h_1^* + h_2^*} \right) * \\ & * (a_3(t_i - h_1^*)^3 + a_2(t_i - h_1^*)^2 + a_1(t_i - h_1^*) + a_0) + \\ & + \left(\frac{h_1^*}{h_1^* + h_2^*} \right)^2 \left(3 - 2 * \frac{h_1^*}{h_1^* + h_2^*} \right) * \\ & * (b_3(t_i + h_2^*)^3 + b_2(t_i + h_2^*)^2 + b_1(t_i + h_2^*) + b_0) + \\ & + h_1^* \left(\frac{h_2^*}{h_1^* + h_2^*} \right)^2 (3a_3(t_i - h_1^*)^2 + 2a_2(t_i - h_1^*) + a_1) - \\ & - h_2^* \left(\frac{h_1^*}{h_1^* + h_2^*} \right)^2 (3b_3(t_i + h_2^*)^2 + 2b_2(t_i + h_2^*) + b_1). \end{aligned}$$

Розглянемо функцію двох змінних

$$\begin{aligned} S(h_1, h_2) &= \left(\frac{h_2}{h_1 + h_2} \right)^2 \left(1 + 2 * \frac{h_1}{h_1 + h_2} \right) * \\ & * (-a_3 h_1^3 + a'_2 h_1^2 - a'_1 h_1 + a'_0) + \\ & + \left(\frac{h_1}{h_1 + h_2} \right)^2 \left(3 - 2 * \frac{h_1}{h_1 + h_2} \right) * \\ & * (b_3 h_2^3 + b'_2 h_2^2 + b'_1 h_2 + b'_0) + \\ & + h_1 * \left(\frac{h_2}{h_1 + h_2} \right)^2 (3a_3 h_1^2 - 2a'_2 h_1 + a'_1) - \\ & - h_2 * \left(\frac{h_1}{h_1 + h_2} \right)^2 (3b_3 h_2^2 + 2b'_2 h_2 + b'_1), \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} a'_0 &= a_3 t_i^3 + a_2 t_i^2 + a_1 t_i + a_0, \\ a'_1 &= 3a_3 t_i^2 + 2a_2 t_i + a_1, \quad a'_2 = 3a_3 t_i + a_2, \\ b'_0 &= b_3 t_i^3 + b_2 t_i^2 + b_1 t_i + b_0, \\ b'_1 &= 3b_3 t_i^2 + 2b_2 t_i + b_1, \quad b'_2 = 3b_3 t_i + b_2. \end{aligned}$$

Очевидно,

$$S(h_1^*, h_2^*) = G,$$

$$S(0, h) = a_3 t_i^3 + a_2 t_i^2 + a_1 t_i + a_0,$$

$$S(h, 0) = b_3 t_i^3 + b_2 t_i^2 + b_1 t_i + b_0.$$

Позначимо

$$\Lambda = \{(h, h_2) : 0 \leq h_2 \leq h\} \cup$$

$$\cup \{(h_1, h) : 0 \leq h_1 \leq h\};$$

$$M_1 = \min\{S(0, h), S(h, 0)\},$$

$$M_2 = \max\{S(0, h), S(h, 0)\}.$$

Можливі 2 випадки:

$$(I) \quad G \in [M_1, M_2];$$

$$(II) \quad G \notin [M_1, M_2].$$

Доведемо, що у випадку (I) на кривій Λ існує точка $(\bar{h}_1, \bar{h}_2)$, в якій $S(\bar{h}_1, \bar{h}_2) = G$.

Справді, функція $S(h_1, h_2)$ неперервна у всій площині, вилучаючи точку $(0, 0)$. Оскільки на кінцях кривої Λ функція $S(h_1, h_2)$ приймає значення M_1 та M_2 , згідно властивостей неперервної функції [6] для будь-якого значення M , $M_1 \leq M \leq M_2$, на кривій Λ знайдеться точка $(\bar{h}_1, \bar{h}_2)$, в якій $S(\bar{h}_1, \bar{h}_2) = M$.

З цього твердження випливає, що якщо для $t_i \in u_j^{(s)}$ виконується нерівність $M_1 \leq G \leq M_2$, то існує многочлен 3-го порядку $v_1(t)$ або $v_2(t)$ (принаймні один), який задовільняє умови (V1) або (V2) відповідно:

$$(V1) \quad v_1(t_{i-1}) = g_{(s)}(t_{i-1}), v'_1(t_{i-1}) = g'_{(s)}(t_{i-1}),$$

$$v_1(t_i) = G, \text{ та існує точка } \hat{t}_1 \in [t_i, t_{i+1}], \text{ така що } v_1(\hat{t}_1) = g_{(s)}(t_1), v'_1(\hat{t}_1) = g'_{(s)}(\hat{t}_1).$$

$$(V2) \quad v_2(t_{i+1}) = g_{(s)}(t_{i+1}), v'_2(t_{i+1}) = g'_{(s)}(t_{i+1}), \\ v_2(t_i) = G, \text{ та існує точка } \hat{t}_2 \in [t_{i-1}, t_i], \text{ така що } v_2(\hat{t}_2) = g_{(s)}(t_2), v'_2(\hat{t}_2) = g'_{(s)}(\hat{t}_2).$$

В залежності від того, який з многочленів $v_1(t)$ або $v_2(t)$ існує, на проміжку $[t_{i-1}, \hat{t}_1]$ або $[\hat{t}_2, t_{i+1}]$ функцію $g_{(s)}(t)$ замінюємо многочленом $v_1(t)$ або $v_2(t)$. Очевидно, $S^2(\theta_s) = S^2(\hat{\theta}_s)$,

Значить, $h_1^* \geq \delta_0$. Далі, $t_{j_l+1}^{*(s)} - t_{j_l}^{*(s)} = h_1^* + h_2^* \geq \delta_0$, тобто $\theta_s \in V_{\delta_0} = V_0$. Припустимо, має місце випадок (Iib).

Нехай для визначеності у точці θ_{s_m} для проміжка $u_j^{(s_m)}$ виконується нерівність (8). Якщо $M_1 = b_3 t_i^3 + b_2 t_i^2 + b_1 t_i + b_0$, то покладемо

$$\tilde{t}_{j_l}^* = t_{i-1}, \tilde{t}_{j_l+1}^* = t_i,$$

функцію $g_{(s_m)}(t)$ на проміжку $[\tilde{t}_{j_l+1}^*, \tilde{t}_{j_l+2}^*]$ замінюємо на $b_3 t^3 + b_2 t^2 + b_1 t + b_0$, а на проміжку $[\tilde{t}_{j_l}^*, \tilde{t}_{j_l+1}^*]$ замінюємо многочленом 3-го порядку $v(t)$, який задовільняє умови

$$v(t_{i-1}) = g_{(s_m)}(t_{i-1}), v'(t_{i-1}) = g'_{(s_m)}(t_{i-1}),$$

$$v(t_i) = M_1, v'(t_i) = 3b_3 t_i^2 + 2b_2 t_i + b_1.$$

У випадку, коли $M_1 = a_3 t_i^3 + a_2 t_i^2 + a_1 t_i + a_0$, то покладемо

$$\tilde{t}_{j_l}^* = t_i, \tilde{t}_{j_l+1}^* = t_{i+1},$$

функцію $g_{(s_m)}(t)$ на проміжку $[\tilde{t}_{j_l-1}^*, \tilde{t}_{j_l}^*]$ замінюємо на $b_3 t^3 + b_2 t^2 + b_1 t + b_0$, а на проміжку $[\tilde{t}_{j_l}^*, \tilde{t}_{j_l+1}^*]$ замінюємо многочленом 3-го порядку $v(t)$, який задовільняє умови

$$v(t_i) = M_1, v'(t_i) = 3a_3 t_i^2 + 2a_2 t_i + a_1,$$

$$v(t_{i+1}) = g_{(s_m)}(t_{i+1}), v'(t_{i+1}) = g'_{(s_m)}(t_{i+1}).$$

Новій функції $\tilde{g}_{(s_m)}(t)$ співставляється точка $\tilde{\theta}_{s_m}$. Очевидно, що

$$|S^2(\theta_{s_m}) - S^2(\tilde{\theta}_{s_m})| < \left(\frac{1}{2^m}\right)^2 = \frac{1}{4^m}, \quad (10)$$

Таким чином, для кожної точки θ_{s_m} проміжок $u_j^{(s_m)}$, для якого виконується нерівність (8) або (9), замінимо на проміжок $[\tilde{t}_{j_l}^*, \tilde{t}_{j_l+1}^*]$. Отримаємо послідовність

$$\tilde{\theta}_{s_0}, \tilde{\theta}_{s_1}, \dots, \tilde{\theta}_{s_m}, \dots \quad (11)$$

для якої виконується умова (10) та

$$|t_{j_l+1}^* - t_{j_l}^*| = \frac{1}{n}.$$

Згідно умов теореми

$$S^2(\theta_{s_m}) \rightarrow A_0 \text{ при } m \rightarrow \infty.$$

З нерівності (10) випливає, що

$$S^2(\theta'_{s_m}) \rightarrow A_0 \text{ при } m \rightarrow \infty.$$

Якщо для інших проміжків $u_j^{(s_m)}$ точок θ'_{s_m} для яких $G \notin [M_1, M_2]$, виконуються нерівності (6), (7), то всі точки послідовності (11) належать множині V_0 , інакше в цій послідовності можна знайти підпослідовність, для якої виконується нерівність (8) або (9). Оскільки у точки θ_s проміжків $u_j^{(s)}$ може бути не більше ніж r , то ми обов'язково отримаємо послідовність

$$\theta''_0, \theta''_1, \dots, \theta''_s, \dots$$

всі точки якої належать V_0 , та

$$\lim_{s \rightarrow \infty} S^2(\theta''_s) = A_0.$$

Оскільки множина V_0 компактна, то цю послідовність можна вважати збіжною до деякої точки θ^* , що протирічить припущенню, що така точка не існує. Теорему доведено.

Список використаних джерел

1. Fuller W.A. Grafted polinomials as approximating function. //The Australian journal of agricultural economics. — 1969.—13. — С.35–46.
2. Петунин Ю.И., Демина Э.А., Ключин Д.А., Савкина М.Ю. Оценка влияния величины дозы облучения на вероятность развития злокачественных новообразований на основе сплайновой регрессии. //Международ. науч.-теор. журнал "Кибернетика и системный анализ". — 2006.—3. — С.168–176.
3. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. — Москва: Наука, 1980.—352 С.
4. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессия. — Москва: Финансы и статистика, 1981.—304 С.
5. Данфорд Н., Шварц Дж. Линейные операторы. Общая теория. — Москва: Изд-во иностранной литературы, 1962.—752 С.
6. Фиттенгольд Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. — Москва: Наука, 1966.—т.1—608 С.
7. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. — Москва: Наука, 1971.—432 С.

Надійшла до редколегії 23.03.07.

УДК 517.98

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

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.

Sukhtayeva A.M., k.ph.-m.s.,
Khadjiev dph.-m.s., prof.

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.

E-mail: sukhtayeva@ukr.net

Теория линейных алгебраических полугрупп была заложена в работах М. Пютча за 1980-82 годы. Эти исследования в дальнейшем были продолжены в работах самого Пютча, 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 Пютча 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 A - поле произвольной характеристики, V - векторное пространство над A . $L(V)$ - множество всех линейных отображений V в себя. $L(V)$ превращается в полугруппу, если в нем в качестве бинарной

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 I^K обозначим подпространство в V , состоящее из K -инвариантных элементов:
$$I^K = \{v \mid \rho(v)v = v, \forall k \in K\}.$$

Определение 1. Линейное представление $\rho: K \rightarrow L(V)$ полугруппы K в векторном пространстве V назовем α -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 представление ρ также считаем α -представлением.

Определение 2. Линейное представление $\rho: K \rightarrow L(V)$ полугруппы K назовем β -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 ρ также считаем β -представлением.

Определение 3. Линейное представление $\rho: K \rightarrow L(V)$ полугруппы K назовем γ_1 -представлением (γ_2 -представлением), если для подпространства V^K (для всякого K -инвариантного подпространства) в V существует K -инвариантное дополнение. γ_2 -представление называется также полупростым.

Определение 4. Полугруппу K назовем класса α (соответственно класса $\beta, \gamma_1, \gamma_2$), если всякое ее линейное представление является α -представлением (соответственно β -, γ_1 -, γ_2 -представлением).

Полугруппу K класса γ_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 α -представлением (соответственно β -, γ_1 -, γ_2 -представлением).

Полугруппу K класса $f\gamma_2$ назовем полупростой.

В $L(V)$ рассмотрим топологию Зарисского.

Определение 6. Полугруппа $K \subseteq L(V)$ 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 α -представлением (соответственно β -, γ_1 -, γ_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 τ – 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 ρ 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 ρ 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 подгруппы класса $\{a, 1\beta, 1\gamma, 1\gamma_2\}$.

Предполагая, что условия $\{a, 1\beta, 1\gamma, 1\gamma_2\}$ выполнены для конечномерных линейных представлений, введем классы $f\alpha, f\beta, f\gamma, f\gamma_2$.

Рассмотрим линейное представление $\rho: K \rightarrow L(V)$ подгруппы K в векторном пространстве V над полем Λ . 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 подгруппы 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) ρ является α -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 ρ 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 ρ . Тогда естественный K -гомоморфизм $F: V \rightarrow V/H$ является сюръективным. Рассмотрим элемент $v \in W, v \notin H$. Тогда $kv = \lambda v + y$, $\lambda \in \Lambda, y \in H$. 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 α -представления является α -представлением, причем, если $\rho: K \rightarrow L(V)$ есть α -представление и $\nu: K \rightarrow L(W)$ - его

фактор-представление по K -инвариантному подпространству H , то

$$(FV)^K = (V \cap H)^K = V^K \cap H^K = F^K V^K.$$

Доказательство. Пусть $\rho: K \rightarrow L(V)$ заданное α -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 α -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 (α) и полугруппа P есть ее гомоморфный образ. Тогда полугруппа P также является полугруппой класса (α) .

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 ρ 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 (α) , отображение $F^K: V^K \rightarrow W^K$ - сюръективно. С другой стороны,

$$F^P = F^K \cap V^P = V^K \cap W^P = W^K.$$

Следовательно, ρ является α -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 (α) 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 $(t\alpha)$, 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 α -представление полугруппы K в векторном пространстве V такое, что в каждом V_{τ_α} оно является α -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_τ . 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 редуктивно, 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 $\rho : K \rightarrow L(V)$ α -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 ρ 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 α – представлений полугруппы K является α – представлением.

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

$\{V_{\tau}, \tau \in \Delta\}$ – система подпространств V_{τ} , $V = \sum_{\tau \in \Delta} V_{\tau}$ и сужение ρ на подпространство V_{τ} есть α – 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 полугруппа класса (γ_2) (соответственно $(f\gamma_2)$) есть полугруппа класса (α) (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 полугруппа класса (α) (соответственно $(f\alpha)$) является полугруппой класса (γ_2) (соответственно $(f\gamma_2)$).

Доказательство. Отметим ([3], теорема 7.36), что образ $\rho(K)$ инверсной полугруппы K является инверсной полугруппой. Через $\rho(k)$ будем обозначать элемент $\rho(K)$, инверсный к $\rho(k)$. Пусть $\rho: K \rightarrow L(V)$ – произвольное линейное представление полугруппы K , W – произвольное K – инвариантное подпространство. Докажем, что W имеет K – инвариантное дополнение. Через H_1 обозначим $\text{Hom}_{\Lambda}(V, W)$ пространство всех Λ – линейных отображений из V в W . Через H_2 обозначим пространство

$L(W)$. В H_1 определим действие полугруппы K по следующей формуле:

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

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

т.е. сужение отображения u на W .

Тогда ввиду того, что представление ρ является α – 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 полугруппе K . Как известно, элемент e является идемпотентным и $\bar{e} = e$.

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

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

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

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 $\{\Lambda v\}$. 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.

Литература:

1. Желобенко Д.П. Компактные группы Ли и их представления. // М.: Наука, 1970. – 664 с.
2. Желобенко Д.П., Штерн А.И. Представление 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 ВИНИТИ 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.

Прийнято до друку 20/03/2007

УДК 581.133.1:535.361.2

Яценко В.О.^{*}, проф., д.т.н.
Семенів О.В.^{**}, аспірант.
Кашпіровський О.І., доц., к.ф.-м.н.

Моделювання спектральних кривих та оцінювання вмісту хлорофілу в рослинності.

Розглянута проблема оцінювання концентрації хлорофілу в рослинності на основі моделювання спектральних кривих та виділенні інформаційних параметрів. Запропоновано розв'язок на основі використання сплайнів та нелінійних моделей регресії. Приведені результати його порівняння з методом головних компонент.

Ключові слова: сплайн, спектр відбиття, регресія, оптимізація, системний аналіз.

E-mail: vyatsenko@gmail.com^{*}; oleg.semeniv@gmail.com^{**}.

Вступ

Проблема ризику у зв'язку з постійним погіршенням екологічної ситуації є однією з головних у напрямку забезпечення існування людського суспільства. В її вирішенні важливу роль відіграють системи моніторингу різноманітних компонентів навколишнього середовища з метою спостереження процесів деградації, а також для виявлення ексцесів у зв'язку з аварійними ситуаціями техногенного походження або природними аномаліями. До складу задач моніторингу можна віднести: а) виявлення та прогнозування еволюції стану різних ділянок суші; б) оперативне знаходження екологічних стресів; в) контроль стану техногенних об'єктів підвищеної небезпеки; г) контроль господарських соціально важливих об'єктів, таких як, наприклад, сільськогосподарські угіддя і ліси. Найбільш оптимальним рішенням таких задач є дистанційне спостереження, яке в свою чергу, вимагає розробки нових методів отримання необхідної інформації. Для цього потрібно знайти зручні для дистанційного вимірювання параметри об'єктів і способи тематичної дешифровки результатів вимірювання. Рослини є невід'ємним компонентом середовища існування живого світу, а фотосинтетичний апарат зелених листків можна використати як чутливий індикатор стресових ситуацій. Стреси різного походження впливають на вміст хлорофілу у листках, а цей параметр може бути отриманим

V. Yatsenko^{*}, PhD, prof.
O. Semeniv^{**}, PhD student.
O. Kashpirovsky, PhD, docent.

Modeling of spectral curves and estimation of chlorophyll content in vegetation.

The problem of chlorophyll content estimation in vegetation using modeling of spectral curves and informative parameters is considered. The solution which is based on splines and nonlinear regressions is proposed. Results of comparing with the principal components analysis method are given.

Key Words: spline, reflectance spectra, regression, optimization, system analysis.

безконтактним дистанційним методом, що ґрунтується на використанні характеристик відбиття в оптичному діапазоні. Існує велика кількість публікацій, які вказують на реакцію пігментного апарата рослин у відповідь на дії стресу. Деякі праці вказують на зниження вмісту хлорофілу у рослин в Чорнобильській зоні [1], при витокі газу на магістральних газопроводах [2], вірусних захворюваннях [3], дефіциті азотного харчування [4] та вологи [5].

Проблема інформативності параметрів спектра відбиття рослинності, відносно різних показників стану, активно розробляється протягом останніх 30 років. Праці більш раннього періоду були орієнтовані на побудову різних вегетаційних індексів, що використовують спектральні коефіцієнти яскравості отримані багатоканальними дистанційними спектро радіометрами. Напівширина спектральної ділянки таких каналів була 10-30 нм. Були знайдені комбінації коефіцієнтів, які виявляли високу ступінь кореляції з вмістом в листках тих чи інших біохімічних компонентів, зокрема хлорофілу. Дистанційне вимірювання з використанням такого підходу називають мультиспектральними, а відповідну апаратуру багатозональними сканерами. Результати таких вимірювань мають значні обмеження відносно дешифровки даних з метою отримання коректної інформації. Це зумовлено в основному двома обставинами: 1) необхідністю мати еталони коефіцієнтів яскравості, котрі необхідно

вимірювати в тих же умовах, що і дослідний об'єкт; 2) спотворення корисного сигналу у зв'язку з відбиття від ґрунту при роботі з фітоценозами з неповним проєктивним покриттям.

Останнім часом широкого розвитку набули дослідження, які торкаються інформативних можливостей спектральних кривих відбиття рослинності, виміряних при високій спектральній роздільній здатності. Встановлено, що зміни нахилу лінійної ділянки спектральної кривої в області, так званого, червоного краю, 680-800 нм, зумовлені варіаціями вмісту хлорофілу [6]. В деяких працях останніх років для якісної оцінки змін концентрації хлорофілу використовували відношення інтенсивності двох екстремумів в графіку 1-ої похідної від спектральної кривої в області червоного краю. В праці [4] показано, що при більш низькій концентрації хлорофілу домінує більш короткохвильовий екстремум. В роботах [2, 7] запропоновано відношення інтенсивності екстремумів при 705 и 722 нм, D_{705}/D_{722} , в якості диференціального індексу для розпізнання ситуації, які відповідають більшому або меншому вмісту хлорофілу, для виявлення таким чином стресу в оливкових дерев. Однак автори рахують, що величина цього відношення залежить від флуоресценції листків.

Нами протягом декількох років розробляється методологічний підхід для визначення хлорофілу в листках на основі кореляційного зв'язку цього параметра с величиною відношення двох екстремумів в графіку 1-ої похідної [8, 9, 10]. Було показано, що такий підхід дозволяє отримати рівняння регресії для обрахунку хлорофілу і формула є стійка до вкладу відбиття від ґрунту [11]. Однак спроможність методу значно залежить від рівня шуму на виході установки, оскільки від цього фактору залежить виділення двох екстремумів в графіку 1-ої похідної. Крім цього для прикладної реалізації методу необхідно розробити спосіб автоматичного пошуку положення екстремумів та їх інтенсивності.

Вказані недоліки запропонованого підходу стимулювали пошук методу підвищення якості і оперативності обробки спектральних кривих відбиття. Аналіз методів дозволив запропонувати і підтвердити новий підхід на основі сплайнів та методів оптимізації. Для перевірки застосування розробленого нами підходу та адаптації його до польових вимірювань, і впровадження в широку практику необхідно використати польовий прилад для вимірювання спектрів відбиття рослинності. Прилад повинен відповідати ряду специфічних вимог, котрі обумовлюють його

конструктивні особливості, а також включають спеціалізоване програмне забезпечення для розрахунків вмісту хлорофілу за розробленим алгоритмом.

Метод

Для обробки спектрів відбиття листків $S(\lambda)$ озимої пшениці з різним вмістом хлорофілу використовували сплайн. Їх записували в цифровому вигляді на спектрофотометрі СФ-10, котрий має інтегруючу сферу. Регіструюча система була модифікована з тим, щоб отримувати спектри в цифровому вигляді. Діапазон реєстрації 400-750 нм, крок відбору інформації 1 нм. Шматочки листків, спектри відбиття $S(\lambda)$ яких були зняті, потім обробляли 80% ацетоном для екстракції хлорофілу, вміст, якого в екстракті, визначали спектрофотометрично за Арноном [12].

Системи рослинність-ґрунт, які використовувались для з'ясування стійкості алгоритмів оцінки хлорофілу до впливу вкладу відбиття від ґрунту при неповному проєктивному покритті, імітували в вигляді фізичних і графічних моделей. Фізичні моделі здійснювали шляхом покриття листками тільки відповідної частини поверхні вимірювального кювету. Фоном слугував чорний ґрунт або пісок, як проєкційна площина з мінімальним і максимальним відбиттям. В графічних моделях неповне проєктивне покриття моделювали математичним складанням спектральних кривих відбиття листків і фону із заданими ваговими коефіцієнтами.

Розв'язок

Для розв'язку задач моделювання та обробки спектральних кривих використовувався кубічний сплайн, за допомогою якого чисельно визначались екстремуми ξ і η першої похідної для побудови регресійної моделі. В рамках цієї моделі вміст хлорофілу визначається як функція відношення згаданих екстремумів. Для їх визначення необхідно шукати першу та другу похідні спектральної кривої y_i , заданої таблично.

Алгоритм сплайн-обробки полягає у наступному. Спочатку над таблицею значень y_i здійснюють процедуру згладжування сплайнами. Між вузлами λ_i і λ_{i+1} сітки дискретизації, спектральну криву наближуємо кубічним многочленом:

$$S_3(\lambda) = y_i(1-\tau) + y_{i+1}\tau - \frac{h^2}{6}\tau(1-\tau)[(2-\tau)M_i + (1+\tau)M_{i+1}],$$

де h – крок дискретизації y_i – значення спектральної кривої у вузлі λ_i , M_i – значення другої похідної у вузлі λ_i . Величини y_i, M_i

визначаються з умови мінімуму квадратичного функціоналу:

$$J(f) = \int_{\Delta} (f''(\lambda))^2 d\lambda + (1-\rho) \sum_{i=1}^N (\bar{y}_i - y_i)^2,$$

де ρ - параметр згладжування, $f(\lambda)$ гладка функція така, що $f(\lambda_i) = y_i$, $f''(\lambda_i) = M_i$, Δ - інтервал. Мінімум цього функціонала досягається на кубічному сплайні $S_3(\lambda)$.

Для реалізації використовувався пакет "Tool Cuver Fitting" системи MatLab 7.1, який дає змогу будувати кубічний сплайн по експериментальним даним та обчислювати першу та другу похідні спектральної кривої. Він дозволяє використовувати зашумлені спектральні дані.

Параметр згладження ρ коливається від 0 до 1 (рівний 0,82). Для оцінки якості згладжування використовується ряд коефіцієнтів: SSE та R-square. Коефіцієнт SSE є сумою квадратів похибок. Ця статистична величина показує відхилення експериментальних даних від результатів отриманих за допомогою сплайнів (рівна 0,01889). R-square – статистична величина, що показує наскільки успішним є наближення в залежності від варіації вхідних даних. Проведені обчислення дали змогу визначити екстремуми першої похідної в області червоного краю та побудувати регресійні моделі [13, 14].

Запропоновано декілька типів регресійних моделей:

лінійна модель

$$z = a + b_1\xi + b_2\eta = F_1(\xi, \eta);$$

білінійна модель

$$z = a + b_1\xi + b_2\eta + c_{11}\xi^2 + c_{12}\xi\eta + c_{22}\eta^2 = F_2(\xi, \eta);$$

бікубічна модель

$$z = a + b_1\xi + b_2\eta + c_{11}\xi^2 + c_{12}\xi\eta + c_{22}\eta^2 + d_{11}\xi^3 + d_{12}\xi^2\eta + d_{21}\xi\eta^2 + d_{22}\eta^3 = F_3(\xi, \eta),$$

де ξ, η - екстремуми першої похідної спектральної функції в області червоного краю, $a, b_1, b_2, c_{11}, c_{12}, c_{22}, d_{11}, d_{12}, d_{21}, d_{22}$ невідомі коефіцієнти регресії.

Чисельні результати

Для побудови регресійних моделей використовувались 17 спектральних кривих відбиття листків озимої пшениці з різним вмістом хлорофілу, концентрація якого була встановлена хімічним методом [12]. Експериментальні криві було згладжено

кубічним сплайном (рис.1), після чого визначено екстремуми першої похідної в області так званого червоного краю (рис.2). Це дозволило побудувати регресійні моделі. На рис. 3 приведено приклад одновимірної регресійної моделі концентрації хлорофілу.

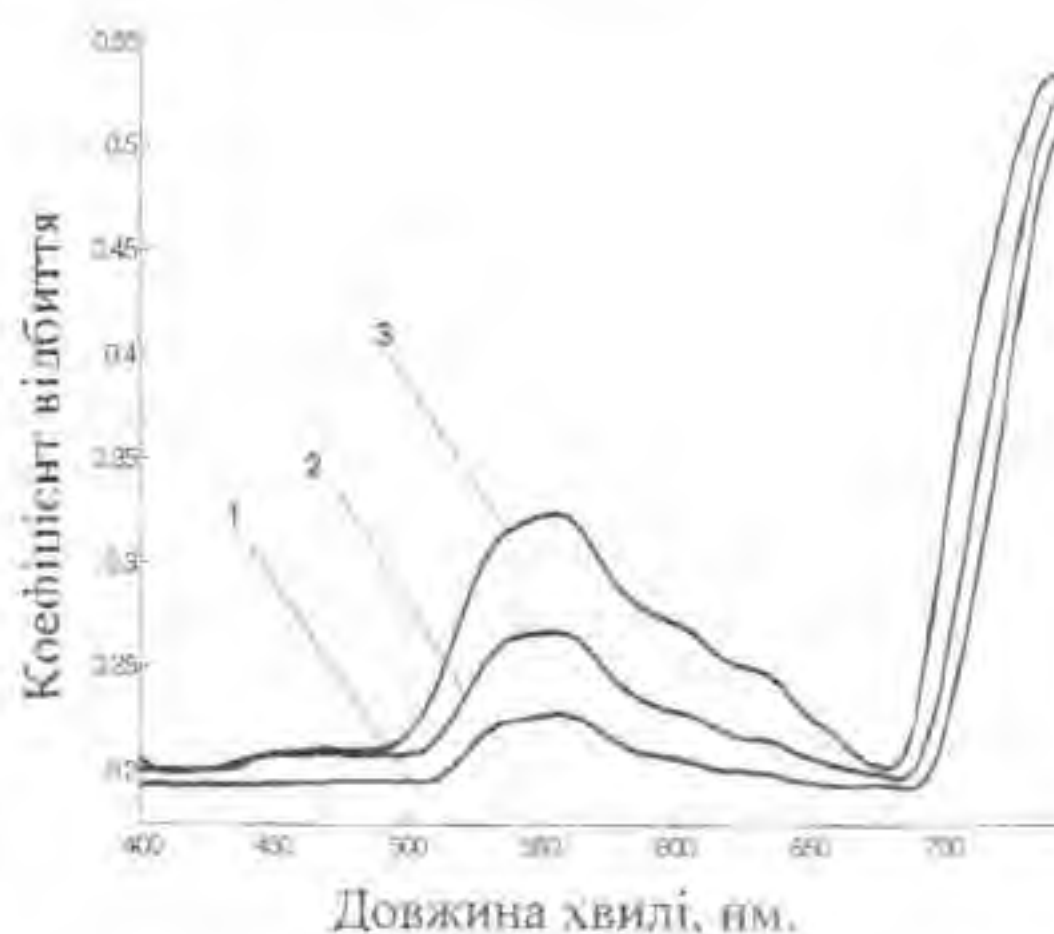


Рис.1 Графіки кривих з різною концентрацією хлорофілу (1 - низький вміст хлорофілу; 2 - середній вміст; 3 - високий вміст).

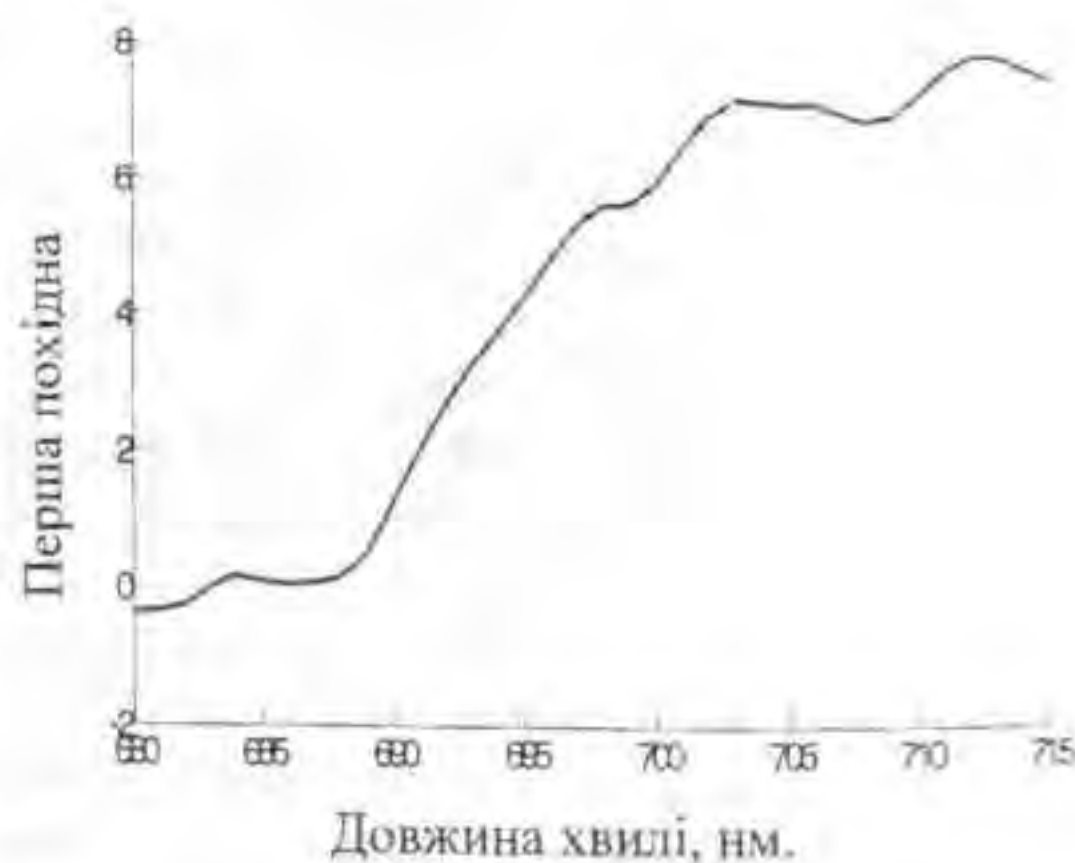


Рис.2 Графік першої похідної кривої з середнім вмістом хлорофілу

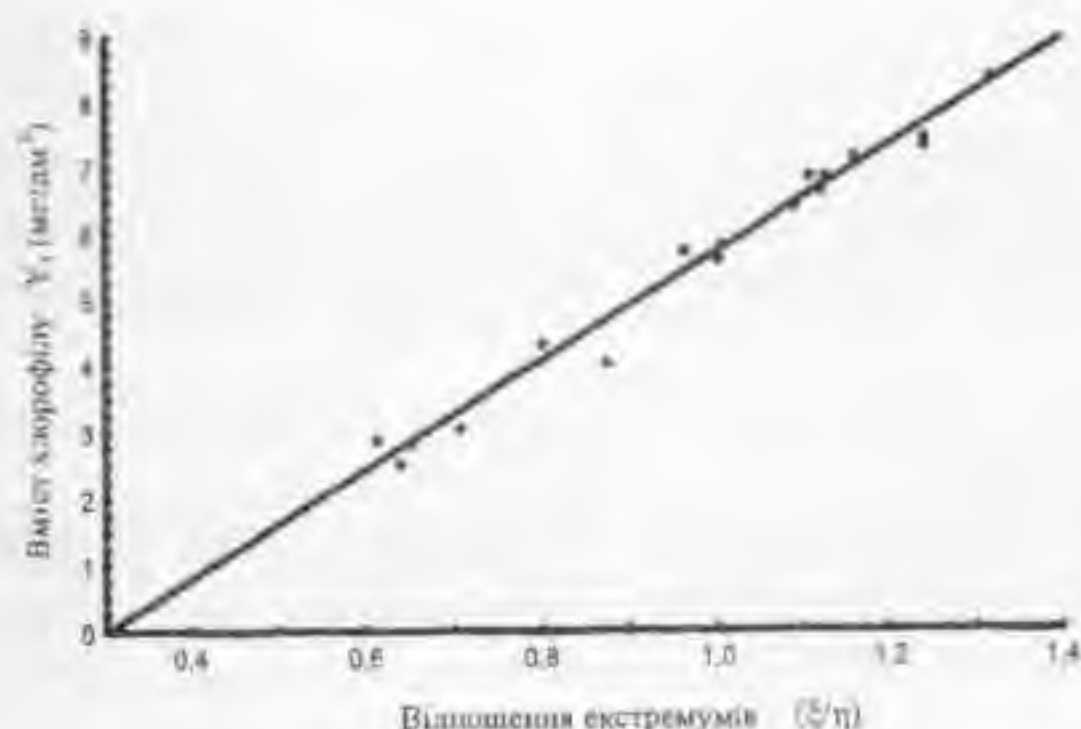


Рис.3 Регресійна залежність між вмістом хлорофілу та відношенням екстремумів ξ і η (де ξ -перший екстремум, а η - другий)

$$y = -2,4625 + 8,1652 \cdot x$$

Висновки

В роботі розглянута актуальна проблема оцінювання хлорофілу в рослинності та окремі задачі моделювання спектральних кривих. Вперше використано сплайни для обробки та моделювання зашумлених спектральних кривих з урахуванням типу проєктивного покриття. Це дозволило виділити найбільш інформативні компоненти, якими є значення першої похідної спектральної кривої та її екстремуми в області червоного краю. Встановлено, що існує нелінійна залежність між вмістом хлорофілу та відношенням екстремумів. Моделі, які включають відношення екстремумів, є більш стійкими до зміни типу проєктивного покриття. За допомогою статистичних критеріїв Фішера і Стюдента досліджена адекватність регресійних моделей. Подальші дослідження будуть пов'язані з автоматизацією визначення екстремумів спектральної кривої з урахуванням шумів.

Література

1. Davids C., Tyler A.N. Detecting contamination-induced tree stress within the Chernobyl exclusion zone // Remote Sens. Environ. - 2003. - 85. - P. 30-38.
2. Smith K.L., Steven M.D., Coll J.J. Use of hyperspectral derivative ratios in the red-edge region to identify plant stress responses to gas leaks // Remote Sens. Environ. - 2004. - 92. P. 207-217.
3. Polischuk V.P., Shadchina T.M., Kompanetz T.I., Budzanivskaya I.G., Boyko A.L., Sozinov A.A. Changes in reflectance spectrum characteristics of Nicotiana debney plant under the influence of viral infection. // Arh. Phytopath. Pflanz. - 1997. - 31. P. 115-119.

4. Lamb D.W., Steyn-Ross M., Schaare P., Hanna M.M., Silvestr W., Steyn-Ross A. Estimating leaf nitrogen concentration in ryegrass (Lolium spp.) pasture using the chlorophyll red-edge: theoretical modelling and experimental observations. // Int. J. Remote Scens. - 2002. - 23. - P. 3619-3648.
5. Bowyer P., Danson F.M. Sensitivity of spectral reflectance to variation in live fuel moisture content at leaf and canopy level. // Remote Sens. Environ. - 2004. - 92. - P. 297-308.
6. Шадчина Т.М. Наукові основи дистанційного моніторингу стану посівів зернових. - Київ: Фітосоціоцентр. 2001. - 220с.
7. Yatsenko V.A., Kochubey S.M., Pardalos P.M., Zhan L. Estimation of chlorophyll concentration in vegetation using global optimization approach. Technologies, Systems, and Architectures for Transnational Defence II, SPIE Conference 'AeroSense: Technologies and Systems for Defence & Security', 21-25 April 2003, Orlando USA, Proc. of SPIE, V. 5071.
8. Кочубей С.М., Кобец Н.И., Шадчина Т.М. Спектральные свойства растений как основа методов дистанционной диагностики. - Киев: Наук. думка, 1990. - 136 с.
9. Кочубей С.М., Кобец Н.И., Шадчина Т.М. Количественный анализ формы спектральной кривой отражения листьев растений как способ тестирования их состояния // Физиология и биохимия культурных растений. - 1988. - 20. - С. 535-539.
10. Кочубей С.М. Сравнение информативных возможностей многозональной съемки и спектроскопии высокой разрешающей способности при дистанционном зондировании растительного покрова // Космична наука і технологія. 1999. Т.5, №2/3. С. 41-48.
11. Лялько В.І., Попов М.О. Багатоспектральні методи дистанційного зондування землі в задачах природокористування. - Київ: "Наукова думка". 360с.
12. Arnon D.I. Copper enzymes in isolated chloroplasts. Polyphenoloxidase in Beta vulgaris // Plant Physiol. - 1949. - 24. - P. 1-15.
13. Bevington, P.R. and D.K. Robinson. Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, 2nd Ed., WCB/McGraw-Hill, Boston, 1992.
14. Branch M.A., Coleman T.F. and Li Y. "A Subspace, Interior, and Conjugate Gradient Method for Large-Scale Bound-Constrained Minimization Problems," SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 21, Number 1, pp. 1-23, 1999.

Надійшла до редакції 05.04.2007р.

УДК 621.385.83

Афанас'єв* Т.В., проф. інж. Гранічук О.А., ст. пр.,
Коваль І.І., а.ф.-м.н., доц. Назаренко М.Г.,
а.ф.-м.н., проф., академік НАН України.

Адсорбція кисню на поверхні GeSi(001)

Наведені дані про механізми адсорбції кисню на поверхні кремнію вказують на доцільність подальшого дослідження на до-
повнення розробки в області прикладних. Дослід-
ження, що проводилися в рамках проекту, свідчать про
формування Si^{2+} комплексів з киснем на поверхні
кристалів, що утворюються з Si-Si_2 зв'язків, що
впливають на механізми процесів адсорбції кисню
на поверхні кремнію. Крім того, на поверхні
кристалів кремнію відбуваються процеси, що
впливають на механізми процесів адсорбції кисню
на поверхні кремнію. Крім того, на поверхні
кристалів кремнію відбуваються процеси, що
впливають на механізми процесів адсорбції кисню
на поверхні кремнію.

Ключові слова: адсорбція,
кристал.

E-mail: afanasiev@ukr.net

Вступ

Використання кремнію в напівпровідниковій
техніці є дуже важливим. Кремній є
основним матеріалом для виготовлення
кристалів кремнію, а також кремнію, що
використовується в напівпровідниковій
техніці. Крім того, кремній є основним
матеріалом для виготовлення кристалів
кремнію, а також кремнію, що використовується
в напівпровідниковій техніці.

Настає питання, чи можна використовувати
кремній в напівпровідниковій техніці, чи
можливо використовувати кремній в напів-
провідниковій техніці, чи можна використовувати
кремній в напівпровідниковій техніці.

В роботі [1] було встановлено, що на поверхні
кристалів кремнію (111) та (100) при $T = 300^\circ\text{C}$ в
умові вакууму (10^{-5} тт) адсорбція кисню
проходить за механізмом, який полягає в
формуванні комплексів Si-Si_2 зв'язків, що
впливають на механізми процесів адсорбції
кисню на поверхні кремнію. Крім того, на
поверхні кристалів кремнію відбуваються
процеси, що впливають на механізми процесів
адсорбції кисню на поверхні кремнію.

Висновки

В.В. Афанас'єв, проф. О.А. Гранічук, ст. пр.,
І.І. Коваль, а.ф.-м.н., доц. М.Г. Назаренко,
а.ф.-м.н., проф., академік НАН України.

Oxygen adsorption on the GeSi(001) surface

The most stable adsorption sites for oxygen on the
surface of silicon have been investigated by means
of first principles calculations. Our results show that
 Si^{2+} , Si^{3+} , and Si^{4+} ions are adsorbed on the
surface. It has been found that the formation of
 Si^{2+} complex is the most stable in oxygen
adsorption. Our results indicate that the
formation of Si-Si_2 bonds is the most stable
in oxygen adsorption. Our results indicate that
the formation of Si-Si_2 bonds is the most stable
in oxygen adsorption. Our results indicate that
the formation of Si-Si_2 bonds is the most stable
in oxygen adsorption.

Ключові слова: адсорбція, кристал.

РАДІОФІЗИКА

Висвітлення наукової діяльності
Української академії наук

Висвітлення наукової діяльності
Української академії наук

Висвітлення наукової діяльності
Української академії наук

Висвітлення наукової діяльності
Української академії наук

УДК 621.385.833

Афанас'єва* Т.В., пров. інж., Гринчук О.А., студент, Коваль І.П., к.ф.-м.н., доц., Находкін М.Г., д.ф.-м.н., проф., академік НАН України.

Адсорбція кисню на поверхні Ge/Si(001)

Найбільш імовірні місця адсорбції одного, двох та трьох атомів кисню досліджено за допомогою розрахунків з перших принципів. Встановлено, що найбільш енергетично вигідним є формування Si^{2+} координованого оксиду, таким чином, щоб утворювались зв'язки Si-O-Si, що виникають між атомом поверхневого димеру та атомами другого шару. Встановлено, що кисень може спричиняти перемішування Si і Ge, що в свою чергу, може призвести до зміни бар'єрів дифузії і хемосорбції. Взаємодія кисню з поверхнею не є виключно локальною.

Ключові слова: адсорбція, окислення, оксидні стани.

T.V. Afanasieva, engineer, O.A. Grinchyck, student, I.P. Koval, Dr. Ph., Docent, M.G. Nakhodkin, Dr. Sci., Professor, Academician of NAS of Ukraine.

Oxygen adsorption on the Ge/Si(001) surface

The most stable adsorption sites for one, two and three oxygen atoms have been investigated by using of first principles calculation. Core level shifts for Si^{+1} , Si^{2+} , and Si^{3+} stable configurations have been computed. It has been found that the formation of Si^{2+} species is energetically favorable in agreement with experiment. Oxygen atom promotes mixing of Si and Ge atoms that results in the changes of the atomic oxygen chemisorption energies. The interaction of oxygen atoms with Ge/Si(001) surface is non-local.

Key Words: adsorption, oxidation, oxide species.

*E-mail: afanasieva@univ.kiev.ua

Вступ

Використання в електроніці наноструктур на основі Si та Ge є дуже перспективним. Вони є багатообіцяючою основою для виготовлення інтегральних схем, запам'ятовуючих, оптоелектронних та швидкодіючих пристроїв. Формування атомно-контрольованого тонкого шару SiO_2 на кремнієвих поверхнях, і процес окислення напружених SiGe-структур є також важливим для формування і функціонування схем сучасної мікро- та нанoeлектроніки.

Чиста поверхня Si виявляє велику реактивну здатність за рахунок наявності на поверхні обірваних зв'язків. На ній має місце нерівномірний розподіл напружень, що забезпечує інкорпорацію атомів Ge в приповерхневі шари підкладки.

В роботі [1] було виявлено, що після осадження 0,8 моношару (МШ) Ge на поверхню Si(001) при $T=500^\circ\text{C}$ в ультрависокому вакуумі (2×10^{-10} торр) атоми Ge розташовуються в чотирьох приповерхневих шарах об'ємного зразка. Причому, найбільш імовірно вони знаходяться між димерними рядами. При подальшому збільшенні температури була зафіксована наявність атомів Ge під димерними рядами Si. В [1] було також показано, що дифузія Ge в Si може здійснюватись трьома шляхами: через вакансії, через міжвузля (бар'єр 0,1 eV) та шляхом заміщення вузлового атома (бар'єр 0,3 eV) (вважалося, що атом вже знаходиться в містковому зв'язку між

першим і другим поверхневим шаром). Таким чином, дифузія вглиб імовірніше відбуватиметься через міжвузля. Встановлено, що структура Ge/Si(001) є більш енергетично вигідною, ніж чистий Si [2,3].

Цікавим є процес окислення таких гетероструктур. Як було виявлено в ряді експериментів [4], поверхня Si(100) вкрита плівкою Ge товщиною від 1 МШ до 3 МШ при $T=300\text{K}$ пасивується, тобто окислюється гірше ніж чиста поверхня Si(001). При збільшенні температури до 500K пасивація слабшає, бо присутність Ge на поверхні Si(001) прискорює процес окислення [5,6]. Насичений оксид кремнію утворюється на поверхні Ge/Si(001) раніше, ніж на чистих поверхнях Si(001) і Ge(001) при температурах від 500K до 800K. Окислена поверхня Ge/Si(100) є тришаровою структурою, що складається з поверхневого шару Ge, насиченого оксиду Si та кремнієвої підкладки.

В роботі [6] було показано, що ключову роль у зміні характеру окислення поверхні Ge/Si(001) грає процес взаємної дифузії атомів Ge і Si. Цей процес при різних температурах відбувається по-різному. Це призводить до зміни умов дифузії атомів кисню та швидкості утворення оксидів при зміні температури. Крім того, окислення повинно суттєво залежати від розподілу енергетично найбільш імовірних місць адсорбції атомів кисню в такій системі. Найбільш імовірні місця ад-

сорбції атомів кисню в системі Ge/Si(001)+O не досліджувався достатньо детально. Тому, метою цієї роботи було визначення найбільш імовірних місць адсорбції атомів кисню на поверхні Ge/Si(001) для встановлення механізмів утворення субоксидів та виявлення можливості впливу дальності при окисленні.

Методика

Для дослідження використовувалось числове моделювання адсорбції атомів кисню на поверхню Ge/Si(001). Воно здійснювалось за допомогою розрахунків з перших принципів у наближенні обмеженого методу Хартрі-Фока (RHF) за допомогою програми Gamess [7]. Для всіх атомів (Si, H, Ge, O) використовувався базис N21-3**. Поверхню Ge/Si(001) було модельовано в вигляді кластеру $\text{Si}_{17}\text{H}_{14}\text{Ge}_2$. Обірвані зв'язки на границях кластерів були насичені атомами водню. Всі довжини зв'язків Si-Si обирались такими, як в об'ємі кристалічного кремнію 2,35 Å, а довжини зв'язків Si-H 1,48 Å. Ми здійснювали оптимізацію координат атомів двох верхніх шарів поверхні та координат атомів O. Для кожної структури, що містила n атомів кисню, розраховано енергії адсорбції (в eV на один атом кисню):

$$E = (E_{[\text{Ge/Si}(001)+n\text{O}]} - E_{\text{Ge/Si}(001)} - n \cdot E_{\text{O}}) / n,$$

де $E_{[\text{Ge/Si}(001)+n\text{O}]}$ – повна енергія структури $[\text{Ge/Si}(001)+n\text{O}]$; $E_{\text{Ge/Si}(001)}$ – повна енергія поверхні Ge/Si(001); E_{O} – повна енергія атому O.

Результати і обговорення

Спочатку ми вибрали три можливі положення двох атомів Ge на поверхні Si(001), які наведено на рис.1

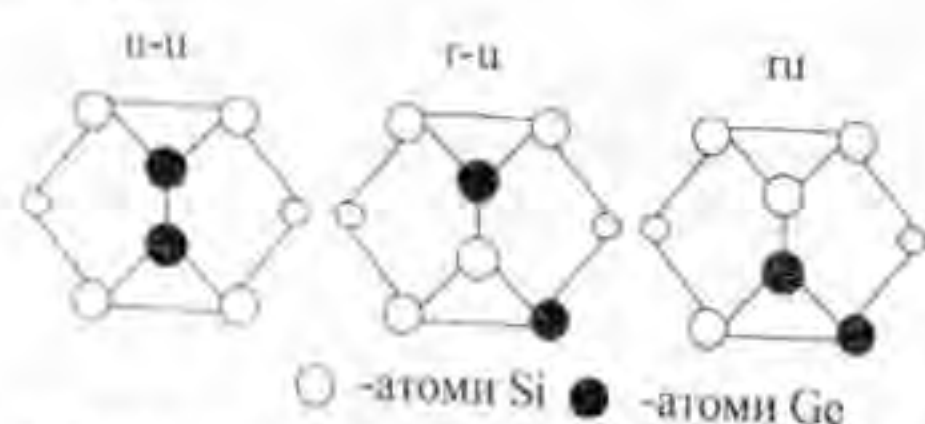


Рис.1 Найбільш імовірні положення двох атомів Ge на поверхні Si(001).

Найбільш енергетично вигідною виявилась позиція u-u, в якій утворився поверхневий димер Ge. Довжина зв'язку в поверхневому димері складає 2,62 Å, а кут нахилу поверхневого димеру $\theta = 13,8^\circ$. Потрібно зазначити, що триплетний стан системи виявився енергетично вигіднішим, ніж синглетний. Така сама тенденція спостерігалась і для поверхонь, на яких поверхневий димер був орієнтований паралельно поверхні. Для синглетного стану системи

встановлено, що букльований ($\theta \neq 0$) димер на поверхні Si(001) є більш енергетично вигідний, ніж небукльований. Схожу тенденцію було встановлено в роботі [8].

Для вибраних положень Ge на поверхні Si(001) ми розглянули можливі місця адсорбції атомарного кисню, позначивши їх так, як наведено на рис.2. Результати розрахунку наведено в таблиці 1.

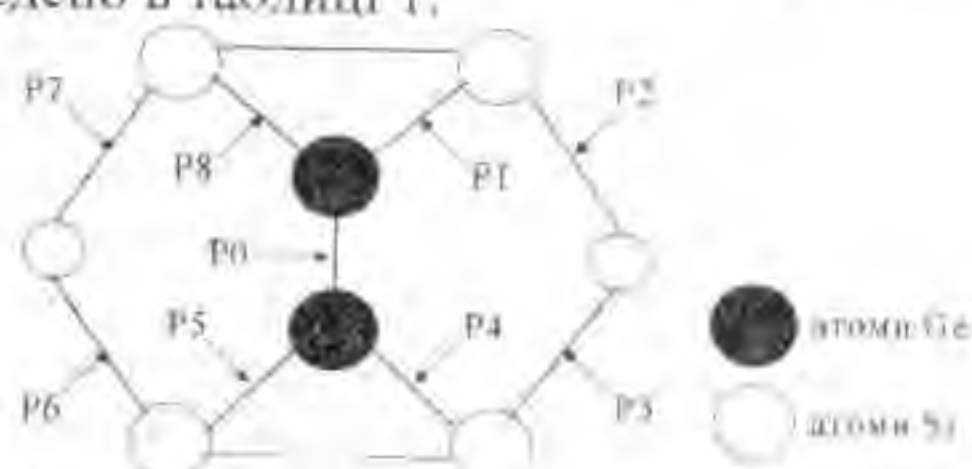


Рис.2 Місця адсорбції атомарного кисню.

Таблиця 1

E (eV/атом) – енергії адсорбції одного атому кисню на поверхні Ge/Si(001); $\Delta E_{\text{Ge}3d}$, $\Delta E_{\text{Si}2p}$, $\Delta E_{\text{O}1s}$ (eV) – зсуви основних рівнів Ge 3d, Si 2p, і O 1s.

Структури		E	$\Delta E_{\text{Ge}3d}$	$\Delta E_{\text{Si}2p}$	$\Delta E_{\text{O}1s}$
u-u					
Ge-O-Ge	P0	5,86	0,26	–	3,29
Si-O-Ge	P1	7,56	1,26	0,37	2,4
Si-O-Si	P2	6,59	–	1,16	2,27
r-u					
Si-O-Ge	P0	5,89	-0,02	0,10	2,99
Ge-O-Si	P3	6,93	1,00	-0,33	2,76
Si-O-Ge	P4	8,02	0,58	1,27	2,32
Si-O-Si	P5	8,14	–	1,47	1,91
ru					
Si-O-Si	P1	8,26	–	1,36	1,95
Si-O-Si	P2	7,59	–	0,87	2,37
Ge-O-Si	P3	6,28	1,03	-0,28	2,96
Ge-O-Ge	P4	6,94	1,19	–	2,66
Si-O-Ge	P5	7,73	1,21	0,44	2,39
Si-O-Si	P7	7,61	–	0,85	2,4

Встановлено, що атому кисню енергетично вигідно вбудуватись у містковий зв'язок між першим і другим шарами поверхні Ge/Si(100) (таб.1). На рис.3 зображені найбільш енергетично вигідні місця адсорбції атома O. Встановлено, що найбільш енергетично вигідним є формування місткових зв'язків Si-O-Si (структури ru-p1, r-up5). Відповідно, формування зв'язків Si-O-Ge і Ge-O-Ge є менш енергетично вигідним (таб.1).

Присутність кисню на поверхні може призводити до розриву зв'язків у поверхневому димері (позиції p0). У випадках, коли кисень знаходиться між другим і третім шаром (позиції p2, p3, p6, p7), спостерігалось збільшення довжини поверхневого димеру.

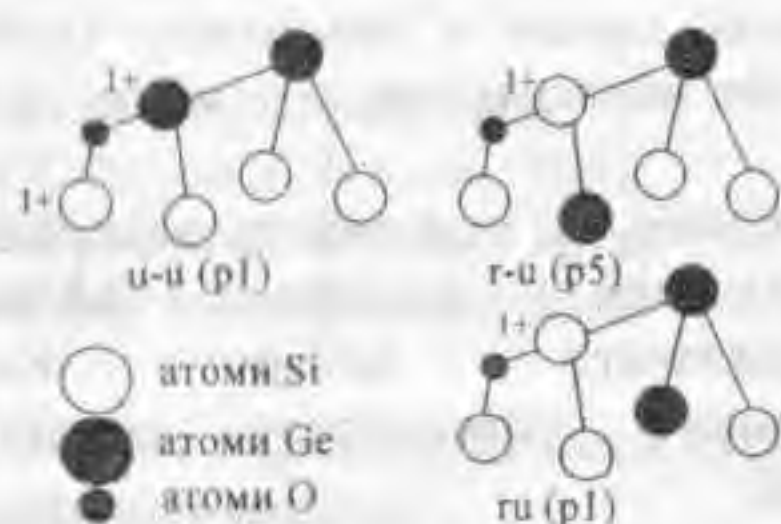


Рис.3. Найбільш імовірні місця адсорбції для одного атома кисню на поверхні Ge/Si(001).

Різниця повних енергій між структурами u-u і r-u (рис.1) становить 0,08 еВ. При адсорбції одного атома кисню, повні енергії цих двох структур відрізняються на ~1 еВ. При цьому, структура r-up5 енергетично вигідніша, ніж структура u-up1. Тобто адсорбція кисню може спричиняти перемішування Si і Ge.

Далі встановлено найбільш імовірні місця адсорбції другого атома кисню (рис.4).

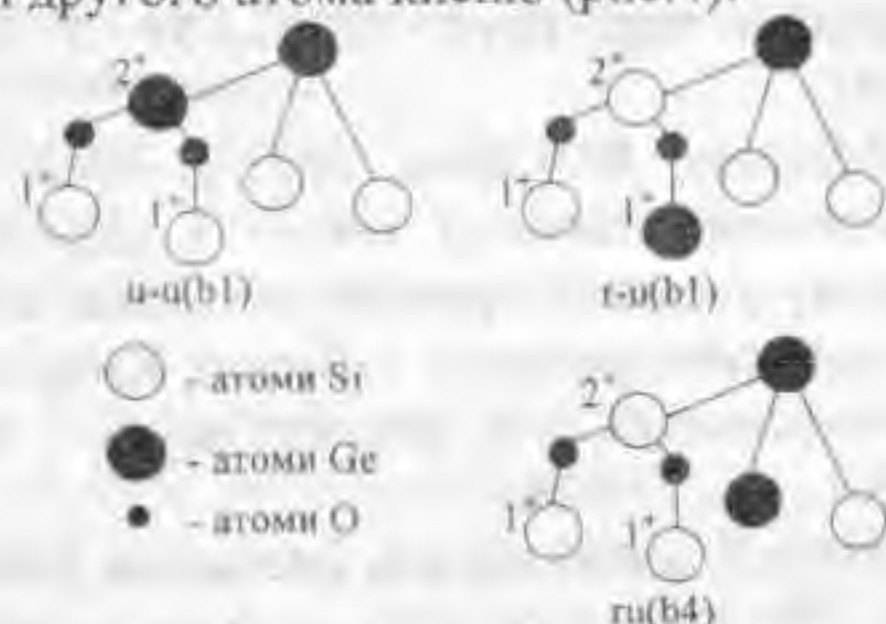


Рис.4 Найбільш імовірні місця адсорбції для двох атомів кисню.

Виявилось, що атому кисню енергетично вигідно утворювати містковий зв'язок між атомом димеру (що вже зв'язаний з атомом кисню) і атомом другого шару. Енергії адсорбції та зсуви основних рівнів наведено в таб.2.

Таблиця 2

E (eV/атом) – енергії адсорбції двох атомів кисню на поверхні Ge/Si(001); $\Delta E_{Ge3d, Si2p, O1s}$ (eV) – зсуви основних рівнів Ge 3d, Si 2p і O 1s.

	E	ΔE_{Ge3d}	ΔE_{Si2p}	ΔE_{O1s}
u-ub1	7,66	1,79	0,14	2,25
r-ub1	8,08	0,49	1,63	0,69
rub4	8,38	-	1,84	0,7

Як вже було зазначено, найбільш енергетично вигідною структурою з одним атомом кисню виявилася структура ru(p1) (рис.3). В цій структурі спостерігалось зменшення довжини зв'язку атома димеру (іншими сусідами якого є атоми кисню), з атомом другого шару, при цьому позитивний заряд на атомі димеру (+0,7e) збільшився у порівнянні із зарядом цього атома на чистій поверхні

(+0,14e). У цьому кластері з одним атомом кисню спостерігалось збільшення довжини зв'язку Ge-Ge (2,59Å) у порівнянні з довжиною цього зв'язку на чистій поверхні (2,37Å). Тому можна припустити, що другому атому кисню простіше вбудуватися в слабкий видовжений зв'язок Ge-Ge, але виявилось, що другому атому кисню енергетично вигідніше вбудуватись у стиснений зв'язок Si-Si (rub4) (рис.4). Це може бути пояснене тим, що найбільший негативний заряд (з усіх атомів другого шару у випадку з одним атомом кисню) знаходиться на атомі Si (-0,43e) (рис.5).

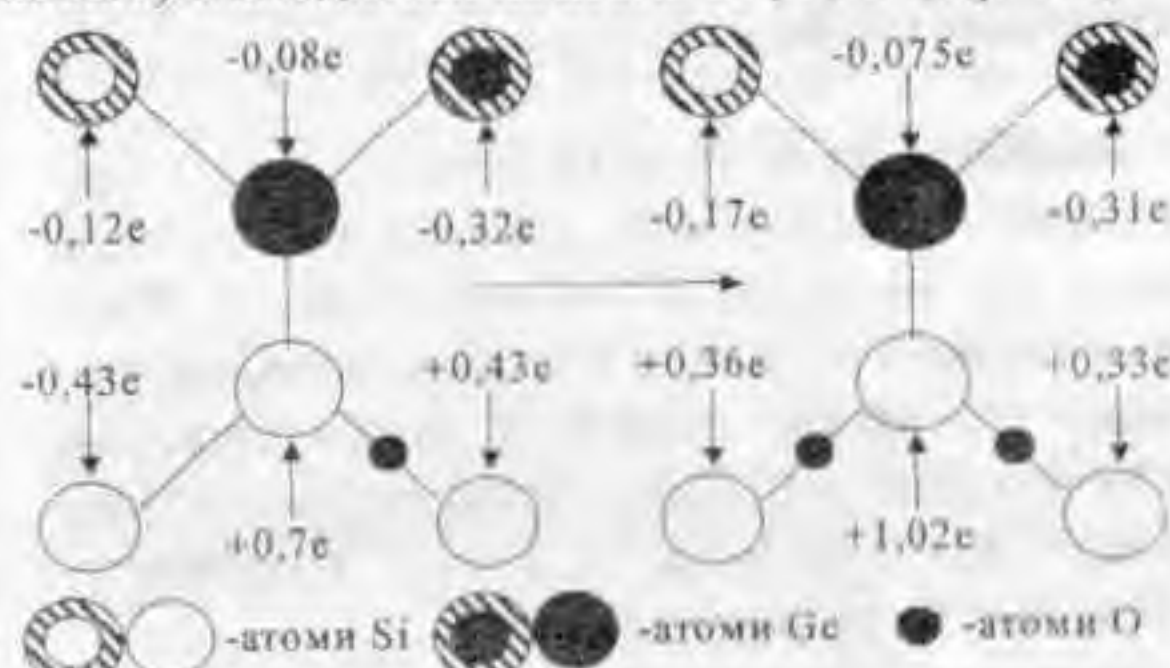


Рис.5. Заряди на поверхневих атомах Si і Ge при адсорбції одного та двох атомів кисню.

Отже, утворення 2^+ координованого оксиду Si (ru (b4) таб.2) є більш енергетично вигідним, ніж утворення 1^+ координованого оксиду Si (rup1 (таб.1).

Наступним нашим кроком стало визначення найбільш імовірних місць адсорбції третього атома кисню. Енергії адсорбції та зсуви основних рівнів наведено в таблиці 3. З таблиці 3 видно, що найбільш енергетично вигідною виявилась структура ruc4 (рис.6).

Таблиця 3

E (eV/атом) – енергії адсорбції трьох атомів кисню на поверхні Ge/Si(001); $\Delta E_{Ge3d, Si2p, O1s}$ (eV) – зсуви основних рівнів Ge 3d, Si 2p і O 1s.

	E	ΔE_{Ge3d}	ΔE_{Si2p}	ΔE_{O1s}
u-uc1	6,84	3,49	0,68	1,14
r-uc1	7,78	0,80	2,81	0,6
ruc4	7,97	-1,25	3,09	1,27

Енергія адсорбції трьох атомів кисню (структура ruc4, таб.3), що відповідає 3^+ окисленому стані поверхневого атома Si, менша, ніж енергія адсорбції двох атомів кисню (структура rub4, таб.2) та енергія адсорбції одного атома кисню (структура ru(p1, (таб.1). З цього можна зробити висновок, що на розглянутій нами поверхні Ge/Si(001), найбільш енергетично вигідним є утворення 2^+ координованих оксидів Si.

Як вже було зазначено, при окисленні має місце перенос заряду в поверхневому димері і на

місткових зв'язках, що зв'язують один з атомів поверхневого димеру з атомами другого шару.

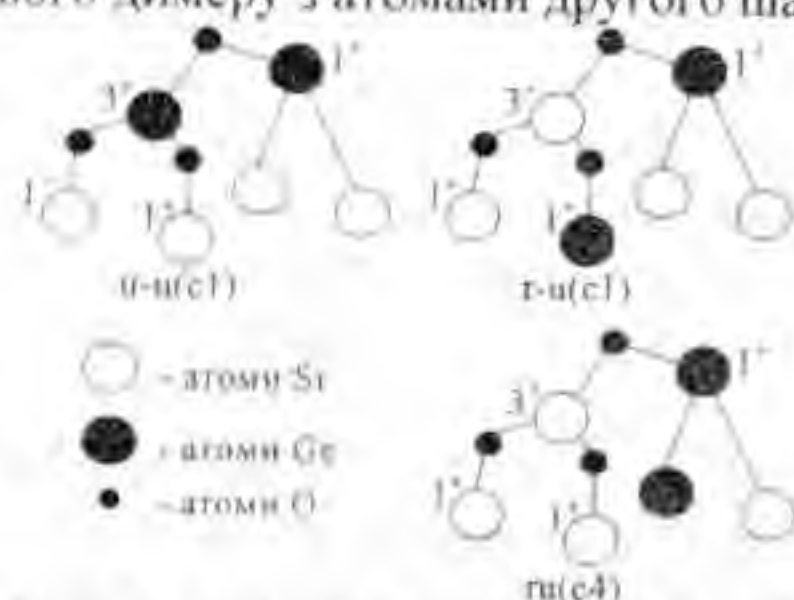


Рис.6 Найбільш імовірні місця адсорбції для трьох атомів кисню.

Зважаючи на це, було визначено зсуви основних рівнів на атомах поверхневого димеру та на атомах, що знаходяться на відстанях ~ 4 Å від атомів кисню і зв'язаних з атомом поверхневого димеру (ці атоми позначені штриховкою на рис.5), для найбільш енергетично вигідних структур rup1 , rub4 і ruc4 для 1^+ , 2^+ та 3^+ координованих оксидів Si, відповідно (таб.4).

Таблиця 4

$\Delta E_{\text{Si}3d, \text{Si}2p}$ (eV) – Зсуви основних рівнів атомів Si і Ge другого шару поверхні, позначених штриховкою на рис.5, у випадках 1^+ , 2^+ та 3^+ координованих оксидів Si (кластери rup1 , rub4 і ruc4 , відповідно).

	$\Delta E_{\text{Ge}3d}$	$\Delta E_{\text{Si}2p}$
rup1	-0,85	-0,98
rub4	-0,81	-0,93
ruc4	-1,25	-1,36

З таб.4 видно, що зсуви основних рівнів Ge $3d$ і Si $2p$, що спричинені адсорбцією кисню та перемішуванням Si і Ge, є значними. Таким чином, нами був зафіксований вплив атома кисню на атоми, що знаходяться на відстанях ~ 4 Å від нього. Тобто, кисень взаємодіє з атомами кластеру нелокально, має місце ефект дальності.

Висновки

1. Було визначено найбільш імовірні місця адсорбції одного, двох та трьох атомів кисню на поверхні Ge/Si(001).
2. Найбільш енергетично вигідним є утворення місткових зв'язків Si-O-Si між атомами димеру і атомами другого поверхневого шару.
3. Найбільш енергетично вигідним на поверхні Ge/Si(001) є утворення 2^+ координованого оксиду Si.
4. Атом кисню сприяє перемішуванню атомів Ge і Si на інтерфейсі Ge/Si(001).

5. Взаємодія кисню з поверхнею Ge/Si(001) є виключно нелокальною, має місце ефект дальності.

Автори вдячні за можливість використовувати обчислювальний кластер Інформаційно-Обчислювального центру Київського Національного університету імені Тараса Шевченка.

Список використаних джерел

1. Blas P., Uberuaga, Michael Leskova, Arthur P. Smith, Hannes Jonsson, Diffusion of Ge below the Si(100) Surface: Theory and Experiment // Phys. Rev. B. – 2000. – 84, №11. – P. 2441-2444.
2. Zandvliet H.J.W., Gurlu O., Afanasieva T.V., Bulavenko S.U., Koval I.F. Diffusion of dimers on Si(100) and Ge(001) surfaces // J.Appl.Phys. – 2003. – 93. – P.1452-1456.
3. Ko J., Park K., Sook J. Mixed Si-Ge formation in Ge/Si(100) and Si/Ge(100) growth // Appl. Phys. – 2000. – 39. – P. 4295-4297.
4. І.П.Коваль, Ю.А.Лень, М.Г.Нахожкін. Дослідження взаємодії кисню з поверхнею сплаву германій-кремній методами електронної спектроскопії // Вісник Київського університету.Серія: фіз.-мат.науки. – 2006. – №1. – С. 275-283.
5. Fukuda T. Initial oxygen interaction between Ge(100) and Ge/Si(100) surfaces compared by scanning tunneling microscopy // J. J. Appl. Phys. – 1999. – 38, Part 2, № 12A. – P.L1450– L1452.
6. T. Fukuda, T. Ogino. Oxidation kinetics of epitaxial Ge-covered Si(100) surface // Surf. Sci. – 1997. – 380. – P. L469-L473.
7. 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. – 14 – P.1347.
8. J.T.Arantes,R.H.Miwa,T.M. Structural models and core-levels shifts of the oxidation of the Si(100) surface // Phys. Rev. B. – 2004. – 70. – P.235321(1)-235321(7).

Надійшла до редколегії 05.06.07

УДК 620.18:546.28

Барчук О.І., канд. фіз.-мат. наук,
Оберемок Є.А., канд. фіз.-мат. наук,
Родіонова Т.В., канд. фіз.-мат. наук,
Савенков С.М., канд. фіз.-мат. наук

Barchuk O.I., Ph. D.,
Oberemok E.A., Ph. D.,
Rodionova T.V. Ph. D.,
Savenkov S.N., Ph. D.

Поляризаційні характеристики структур полікремнієвих плівок

Polarization characteristics of the polysilicon films structure

Виміряні кутові залежності оптичних характеристик полікремнієвих плівок з різним типом структури. Характер залежностей (коефіцієнта відбиття та елементів матриці Мюллера) істотно змінюється для кожного типу структури плівки. Проведено тестування оптичних вимірювань на суцільних матеріалах. Зроблено припущення, що наявність у залежностях додаткових екстремумів пов'язана з існуванням інтерферуючих хвиль, що відбиті від границь з різними показниками заломлення для системи повітря-плівка-окисел кремнію-підкладка.

Angle dependences of optical parameters have been measured for polysilicon films with different structure types. The character of such dependences (of the reflectance coefficient and of the matrix Muller elements) has been essentially changed for each of structure type. The optical measurements have been tested for known solid medium.

Ключові слова: плівки полікремнію, структура, коефіцієнт відбиття, Мюллер-поляриметрия, лінійний дихроїзм.

It has been supposed that existing of addition extremums in dependences connected with the presence of interfering waves which are reflected from boundary with different refractive indexes for system: air-polysilicon film-oxide silicon-substrate.

Key words: polysilicon films, structure, reflectance coefficient, Muller-polarimetry, linear dichroism.

E-mail: rodvtv@univ.kiev.ua

E-mail: sns@univ.kiev.ua

Вступ

Останнім часом з розвитком нанотехнологій оптичні методи все частіше використовуються як для дослідження взаємодії електромагнітного випромінювання з середовищами, що складаються з декількох нанорозмірних шарів різноманітних за своїми властивостями матеріалів [2-4], так і з точки зору їх діагностики щодо виявлення морфологічних особливостей та визначення ефективних оптичних характеристик таких об'єктів [5-9]. До таких структур можна віднести полікристалічні плівки кремнію та багатшарові структури на їх основі, зокрема, структури типу: плівки полікремнію-SiO₂-монокристалічний Si, які були об'єктом дослідження даної роботи.

З метою діагностування [5,7,8] використання оптичних методів полягало у вимірюванні таких оптичних характеристик, як еліпсометричні кути

Ψ та Δ , які пов'язані з коефіцієнтами відбиття s - та p -компонент випромінювання, що падає на досліджуваний зразок, співвідношенням

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \tan(\Psi) e^{i\Delta}. \quad (1)$$

Вирішувалась пряма і обернена задачі еліпсометрії, а саме: для прямої задачі - за відомими характеристиками об'єкта для відомої оптичної схеми дослідження розраховувались можливі поляризаційні характеристики, і для оберненої - за поляризаційними характеристиками відтворювались можливі варіанти шаруватих структур.

Основні проблеми полягали у тому, щоб мінімізувати нев'язку між експериментально виміряними даними $\Psi(\varphi) = \Psi_{\text{експ}}$ і $\Delta(\varphi) = \Delta_{\text{експ}}$ при різних кутах падіння світла φ та теоретично

отриманими залежностями для вибраних товщин шарів d_i і комплексних показників заломлення кожного шару

$$n = n_{\text{Re}} - i n_{\text{Im}}, \quad (2)$$

де n_{Re} – показник заломлення, а n_{Im} – коефіцієнт поглинання (n_{Re} та n_{Im} також називаються дійсною та комплексною частинами показника заломлення). Коректність вибору оптичної моделі відбиваючої системи є основоположною проблемою при отриманні теоретичних залежностей, а точність позиціонування кутів та вимірювання коефіцієнтів відбиття визначає точність експериментальних результатів, що у подальшому впливає на достовірність методики в цілому. Врахування кількості шарів, оксидних плівок на поверхні та її шорсткості уточнювало характер залежностей, що потребувало, в свою чергу, уточнень розрахунків ефективних показників заломлення [7-8]. В результаті були отримані теоретичні параметри d_i та $n_{\text{Re}}, n_{\text{Im}}$, які вважались істинними і при підстановці у теоретичну модель давали залежності, які точно співпадали з експериментально отриманими спектрами пропускання [5-7], дисперсійними [3,6] та кутовими залежностями коефіцієнтів відбиття [4,7]. Отже, задача точного опису структур, що досліджуються оптичними методами, є важливою і потребує детального аналізування у кожному конкретному випадку.

У попередній роботі [9] при дослідженні структур, що складались з плівки полікремнію- SiO_2 -монокристалічного Si, були отримані деякі оптичні характеристики (коефіцієнт відбиття та величина ефективного лінійного дихроїзму), за якими можна було розрізнити структури плівок за їх морфологією. Це дозволило зробити припущення про чутливість оптичних методів до виявлення в полікремнієвих плівках структурних ділянок з різним ступенем упорядкування. Більш детальному з'ясуванню особливостей оптичних характеристик, а саме - дослідженню кутових залежностей поляризаційних параметрів при відбиванні когерентного випромінювання присвячено дану роботу.

Об'єкт та методи дослідження

Як вже згадувалось раніше, об'єктами дослідження були зразки, що являли собою підкладку з монокристалічного кремнію (100) із шаром окисла SiO_2 товщиною ~ 0.1 мкм, на який

були нанесені полікристалічні плівки. Зразки розрізнялися товщинами нанесених плівок (0.5-2 мкм), особливостями їх структури (рівноосьова, дендритна або волокниста), розмірами зерен (0.3-0.7 мкм), що були характерні для тієї або іншої структури та неоднорідностями поверхні (7 нм-0.5 мкм), які також були обумовлені характерними розмірами структур.

Детально структури плівок, залежно від умов одержання і наступних обробок та вимірювання їх характерних розмірів, описано в роботах [10,11].

Користуючись моделлю багатошарової структури, наші зразки можна представити не менше, ніж 3 межами поділу (повітря-плівка полікремнію- SiO_2 -монокристалічний Si), на яких, за рахунок різних показників заломлення, можливе відбиття та заломлення оптичної хвилі. Врахування шорсткості поверхні і проміжних шарів також можуть уточнити модель і отримати додатково ще 3 межі з ефективними показниками заломлення, які вираховуються як зважене середнє показників заломлення суміжних шарів. Стосовно шару полікремнієвої плівки, його теж потрібно характеризувати ефективним показником заломлення, що відповідає тій чи іншій морфології плівки і відрізняється від коефіцієнта заломлення монокристалічного Si. Звісно, кожен шар такої багатошарової структури має певну товщину, проходячи яку частина заломленої хвилі поглинається, інша – проходить у наступний шар, а частина – відбивається від межі та вертається у той самий шар. Враховуючи сумарний вклад від кожної з меж поділу для перерахованих хвиль, можна отримати співвідношення для сумарної інтенсивності світла, відбитого від поверхні зразка. Отже, на сумарний результат будуть впливати коефіцієнти заломлення та поглинання, довжина оптичного шляху хвиль, фазові співвідношення між ними, що визначають умови їх інтерференції (тип матеріалу кожного шару враховується існуванням уявної частини показника заломлення при даній довжині хвилі зондуючого випромінювання).

Оптична схема установки для вимірювання поляризаційних характеристик досліджуваних зразків, яка є повним Мюллер-поляриметром, представлена на рис. 1. У поєднанні з приймальною частиною, яка представляє собою Стокс-поляриметр, вона дозволяє одержувати будь-які поляризаційні характеристики (елементи матриці Мюллера досліджуваних об'єктів, параметри еліпса поляризації, параметри Стокса, ступінь поляризації та коефіцієнти відбиття для

ортогональних компонент досліджуваного випромінювання) [12].

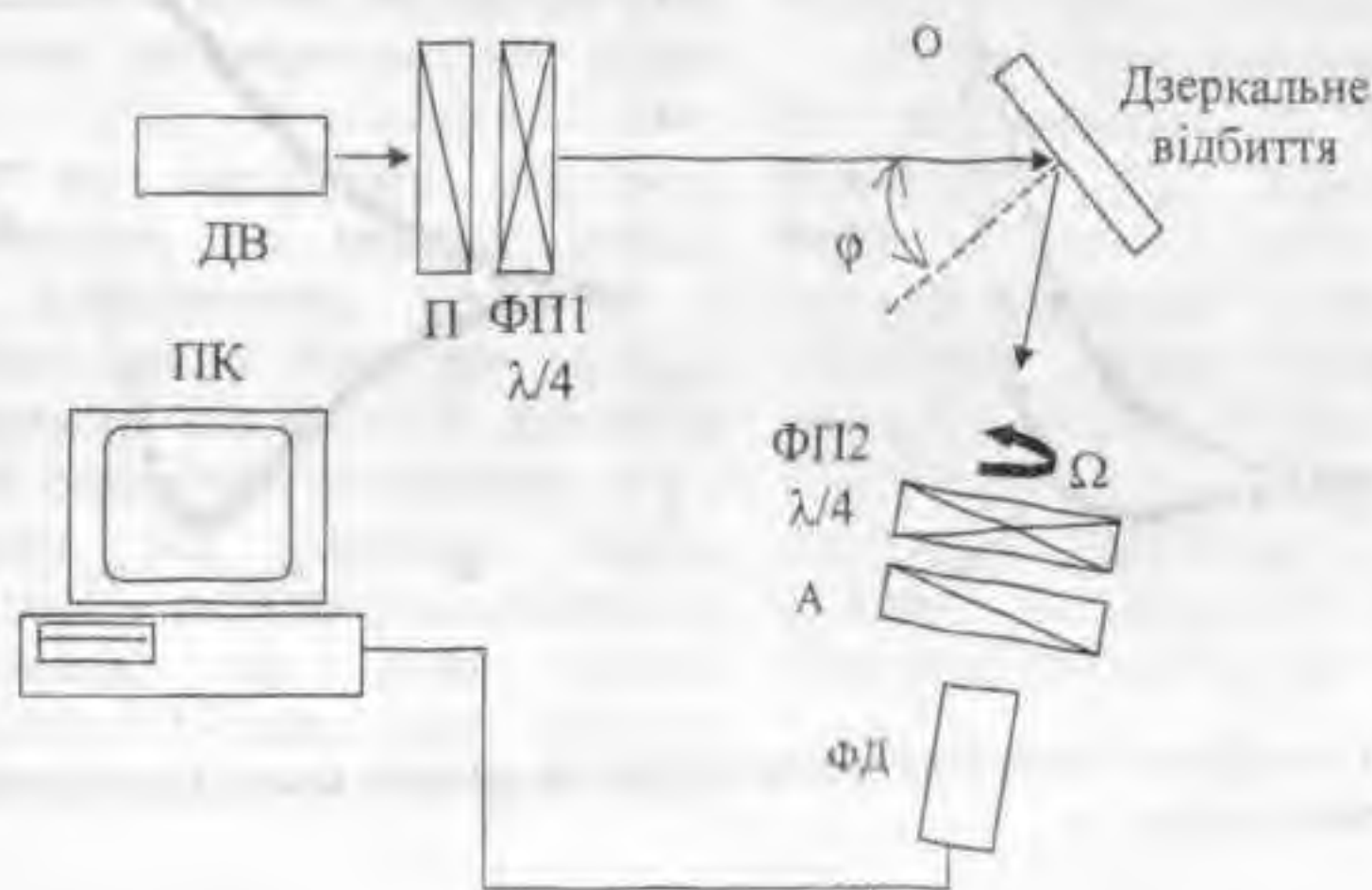


Рис.1. Схема досліджень оптичних характеристик: ДВ – джерело випромінювання (He-Ne лазер, $\lambda = 0.63$ мкм); П, ФП1 – поляризатор та чвертьхвильова фазова пластинка (утворюють керований генератор поляризації випромінювання); О – об’єкт дослідження; А, ФП2 – фазова пластівка та аналізатор; ФД – фотодетектор, ПК – персональний комп’ютер.

Матриця Мюллера $\mathbf{M}$ пов’язує між собою стан поляризації випромінювання, представленого вектором Стокса $\mathbf{S}$ до та після взаємодії з досліджуваним об’єктом:

$$\mathbf{S}^{\text{вих}} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{S}^{\text{вх}}; \quad \mathbf{S}^{\text{вх(вих)}} = \begin{bmatrix} I \\ IP \cos(2 \cdot \theta) \cos(2 \cdot \varepsilon) \\ IP \sin(2 \cdot \theta) \cos(2 \cdot \varepsilon) \\ IP \sin(2 \cdot \varepsilon) \end{bmatrix}; \quad \mathbf{M} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

де $\mathbf{S}^{\text{вх(вих)}}$ – вектори Стокса до та після взаємодії з середовищем, I – інтенсивність випромінювання; P – ступінь поляризації, θ, ε – азимут та кут еліптичності еліпса поляризації випромінювання.

В даній роботі проводились вимірювання елементів матриць Мюллера зразків для випадку дзеркального відбиття лазерного випромінювання з перерізом 1 мм з можливістю зміни кута падіння φ в діапазоні 0° - 90° (відносно нормалі до поверхні зразка). В результаті були отримані залежності елементів матриць Мюллера від кута падіння, що наведені нижче (рис. 2-7). На рисунках всі елементи, крім m_{11} , нормовані на m_{11} . Величина елемента m_{11} відображає процент відбитого світла при одиничній інтенсивності вхідного променя. Похибка визначення елементів матриці складала 2%.

Дослідженню кремнієвих зразків передувало тестування установки на суцільних середовищах

з відомими показниками заломлення (скло та чиста підкладка монокристалічного кремнію Si(100)). При цьому з результатів вимірювань розраховувались залежності значень коефіцієнтів відбиття для s - і p - компонент випромінювання від кута падіння, які можна було порівняти з класичними залежностями [1] (зокрема, для скла та чистого кремнію), що дозволило оцінити достовірність подальших експериментальних результатів (рис.2).

Також для калібрування вимірювань кремнієвих зразків з нанесеними плівками як реперні об’єкти було досліджено зразки чистої підкладки кремнію Si(100) та підкладки з нанесеною плівкою аморфного кремнію Si(100)+Si(a) товщиною 0.7 мкм. Кутові залежності елементів матриці Мюллера для них зведені на рис. 3. Видно, що найбільш чутливі

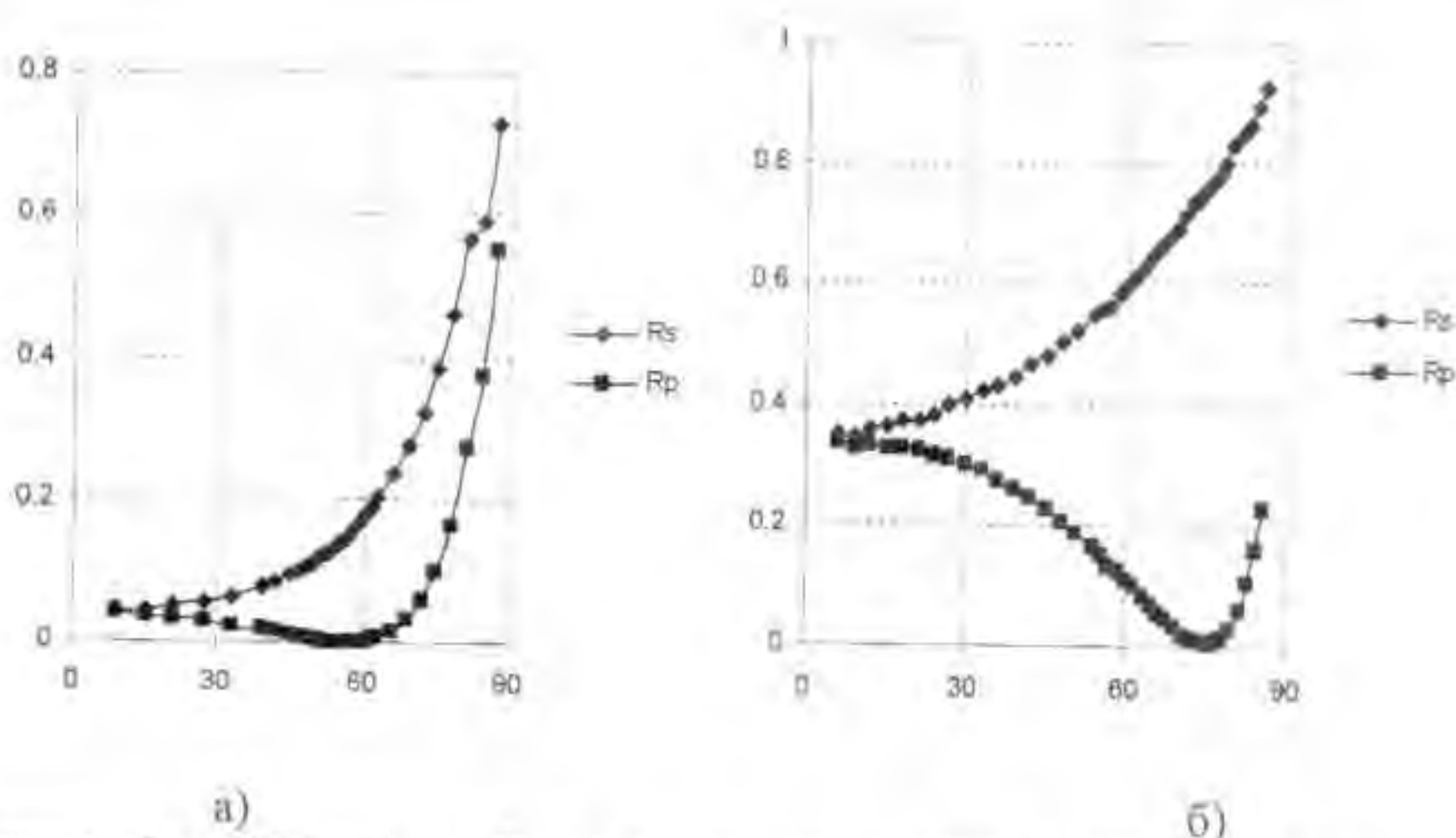


Рис.2. Кутові залежності коефіцієнтів відбиття для масивних зразків скла (а) та кремнію (б) (точки-експеримент, суцільні лінії-теорія).

до кута падіння - елементи $m_{12}(m_{21})$ та $m_{34}(m_{43})$. Перші відображають зміну дихроїчних властивостей зразка (анізотропне поглинання), другі - зміну еліптичності еліпса поляризації випромінювання. Елементи ж m_{22} , m_{33} та m_{44} формуються при комбінації отриманих характеристик.

Не дивлячись на те, що в середньому коефіцієнти відбиття для чистої підкладки Si(100) та підкладки з аморфною плівкою відрізняються майже на 10% (елементи m_{11}), в поляризаційному сенсі вони не виявляють особливостей у вигляді екстремумів у межах похибки і майже ідентичні. Але при досягненні кута падіння 75° - 85° поляризаційні особливості починає проявляти плівка аморфного кремнію (див. елементи m_{34} , m_{43}). Таким чином, особливості, що пов'язані з наявністю плівок або додаткових границь на поверхні можуть з'являтися в елементах m_{11} , m_{34} , m_{43} .

Аморфний кремній, як і полікристалічний є ізотропною речовиною. Тому можна припустити, що утворені ними плівки на однаковій підкладці не будуть істотно відрізнятися за поляризаційними властивостями при відповідних кутах зондування поляризованим випромінюванням.

Результати та їх обговорення

Результати поляриметричних досліджень для зразків досліджуваних матеріалів представлені на рисунках 4-7. Тут наведені кутові залежності елементів матриці Мюллера, отримані для зразків підкладки кремнію з плівками різної структури:

дендритної Si(d) (рис. 4), волокнистої Si(f) (рис.5), рівноосьової Si(e) (рис. 6) з відповідними параметрами (товщиною, складом, рельєфом), порівняно з такими самими залежностями для плівки аморфного кремнію Si(a). На рис.7 порівняно залежності для плівок рівноосьової структури з однаковою товщиною 0.5 мкм, але різним розміром зерен: 0.5 мкм та 0.3 мкм.

Виникнення додаткових екстремумів для всіх полікристалічних плівок з будь-якими структурами може бути пов'язане з виникненням відбитої хвилі від границі, якою може виявитись доволі щільний шар SiO_2 , і яка складає значну частину від первинної хвилі. Відбита від першої границі (повітря-плівка) хвиля може інтерферувати з відбитою від другої (плівка- SiO_2) і вносити зсув у фазові співвідношення для результуючої інтенсивності, а, отже, і в поляризаційні характеристики досліджуваного випромінювання.

З наведених залежностей видно, що дендритна плівка (тієї ж товщини, що і аморфна) починає проявлятися на фоні аморфної вже на етапі розгляду залежності її відбиваючої здатності від кута падіння випромінювання. Так відбиваюча здатність зразка з поверхнею, сформованою дендритною структурою плівки (елемент m_{11} рис.4), істотно змінюється з кутом падіння і має мінімум в районі 56° . Поляризаційні властивості цієї плівки також істотно відрізняються від аморфної, як це видно із залежностей для інших елементів матриці Мюллера. Можна відмітити симетрію матриці, що характерна для чистої підкладки і підкладки з аморфною плівкою. Однак, сам характер

залежностей для всіх ненульових елементів (крім елемента m_{22}) різко змінився вже після кутів падіння 35° - 40° . З'явилися чіткі характерні екстремуми, кількість і кутові положення яких дещо відрізняються (симетрично) для різних елементів.

На відміну від дендритної структури, волокниста призводить до менших змін у поляризаційних властивостях, порівняно з аморфною плівкою (рис.5). Вона має товщину 2 мкм і має характер залежностей практично такий же, як для суцільного середовища, але з дещо відмінними від аморфної плівки елементами $m_{21}(m_{12})$, $m_{23}(m_{32})$ та $m_{24}(m_{42})$. Наявність елементів, які дуже сильно відрізняються $m_{34}(m_{43})$, може лише свідчити про морфологічні особливості у структурі плівок.

Проте відмінність також спостерігається у залежності відбиваючої здатності від кута падіння випромінювання (елемент m_{11} , рис.5). Мінімум останньої досягається в районі кута 39° .

Плівки з рівноосьовими структурами (рис.6-7) відрізняються за характером кутових залежностей та величинами відбиваючої здатності від аморфної плівки. Мінімуми відбиття зсуваються у бік менших кутів при зменшенні товщин плівок та характерних розмірів зерен. Різниця у поляризаційних властивостях також пов'язана із зсувом екстремумів у бік менших кутів і збільшенням їх величини із зменшенням розміру товщини та зерен рівноосьової плівки.

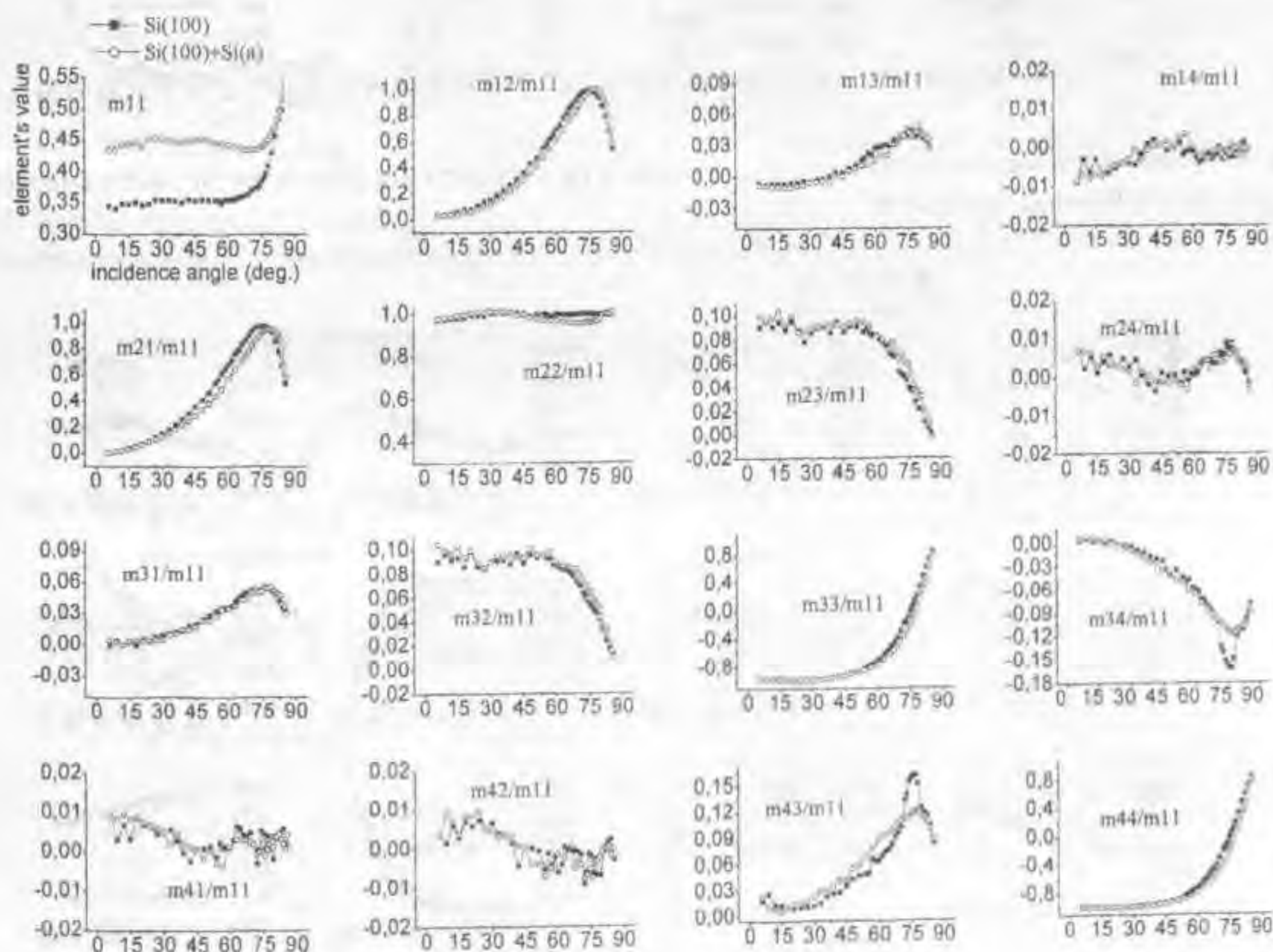


Рис.3. Залежності елементів матриці Мюллера від кута падіння лазерного випромінювання при відбитті від підкладки Si(100) (■) та підкладки з плівкою аморфного кремнію Si(a) (○).

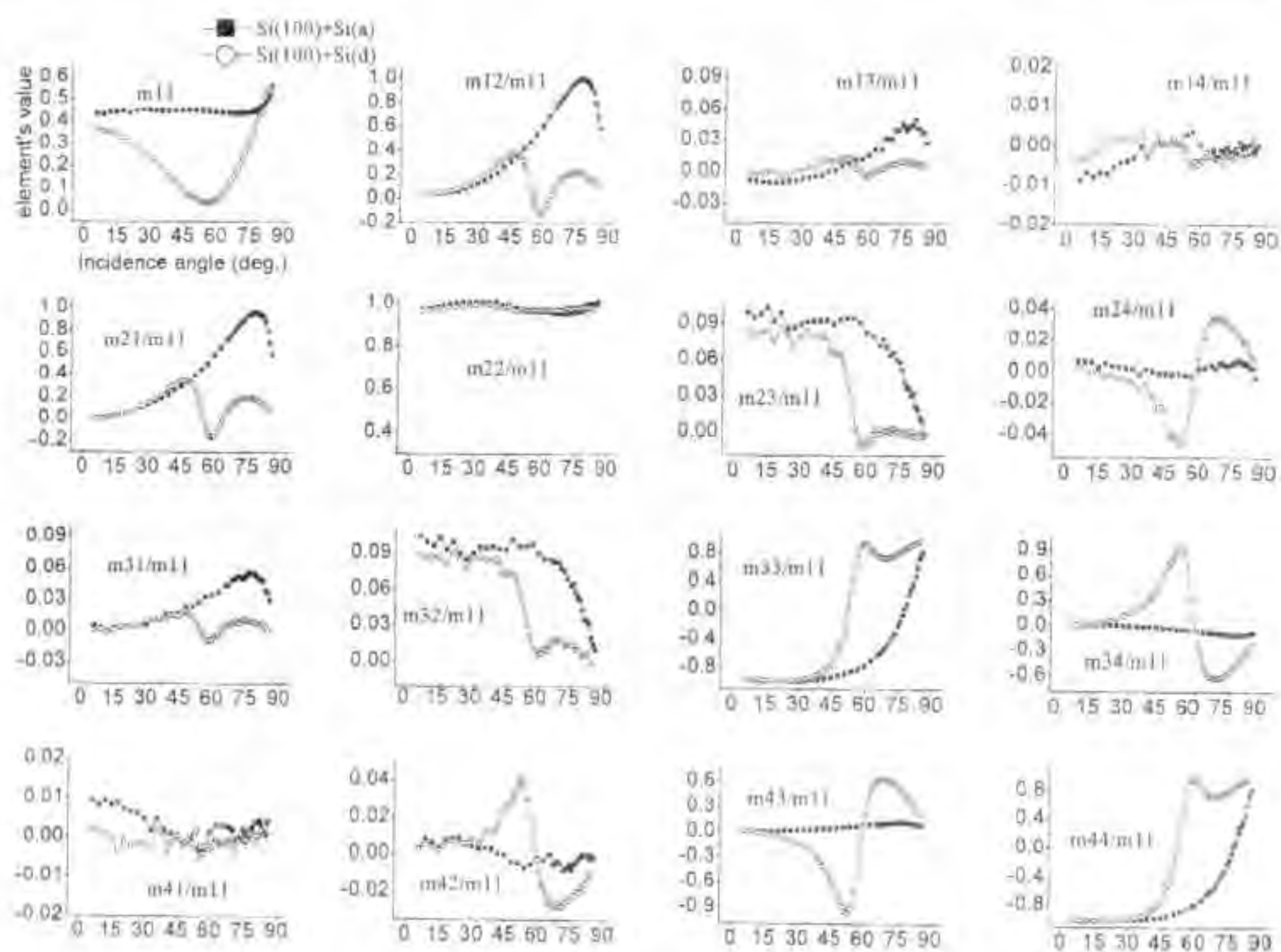


Рис. 4. Кутові залежності елементів матриці Мюллера при відбитті від підкладки Si(100) з аморфною (■) та з дендритною (○) плівками

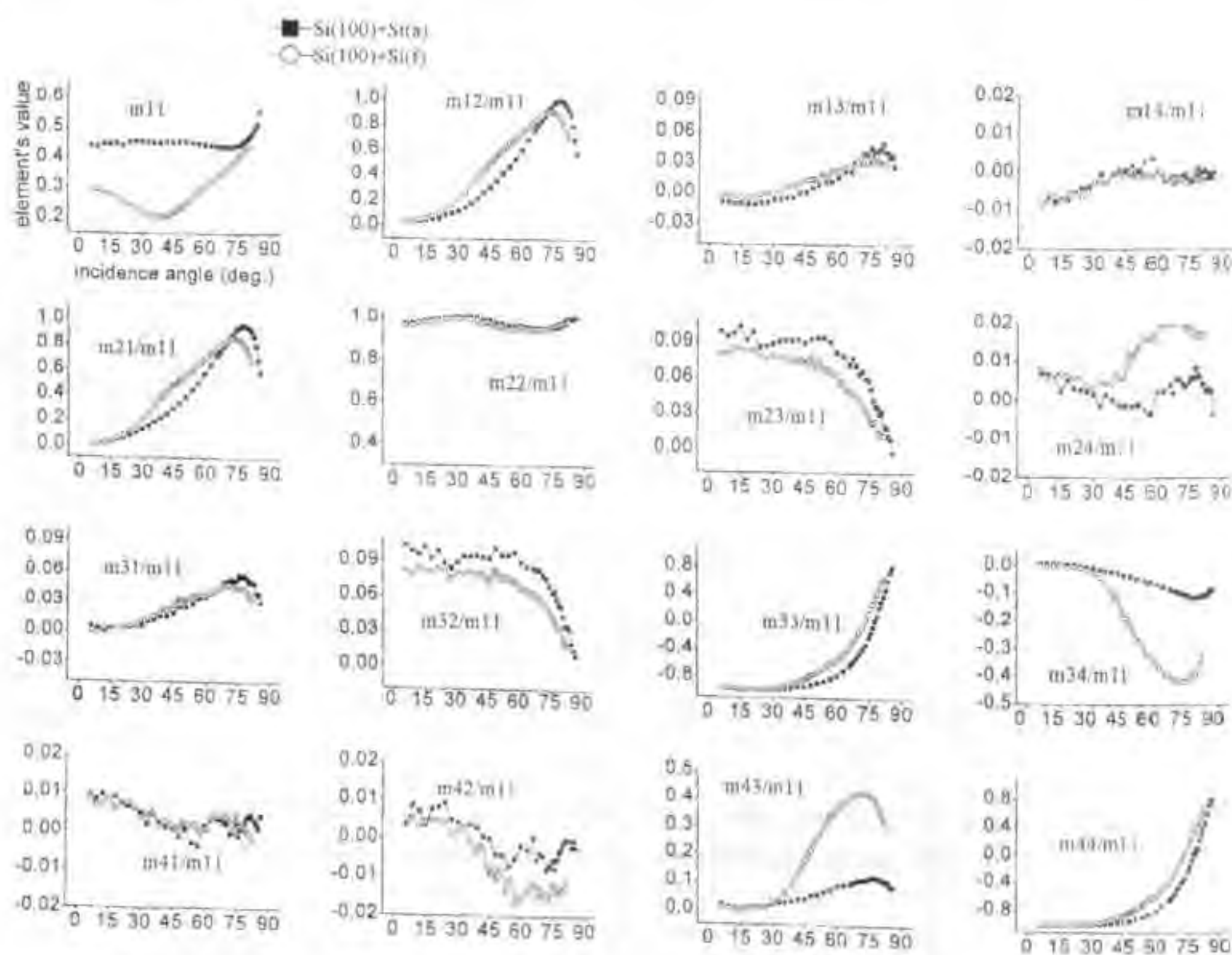


Рис. 5. Кутові залежності елементів матриці Мюллера при відбитті від підкладки Si(100) з аморфною (■) та волокнистою (○) плівками.

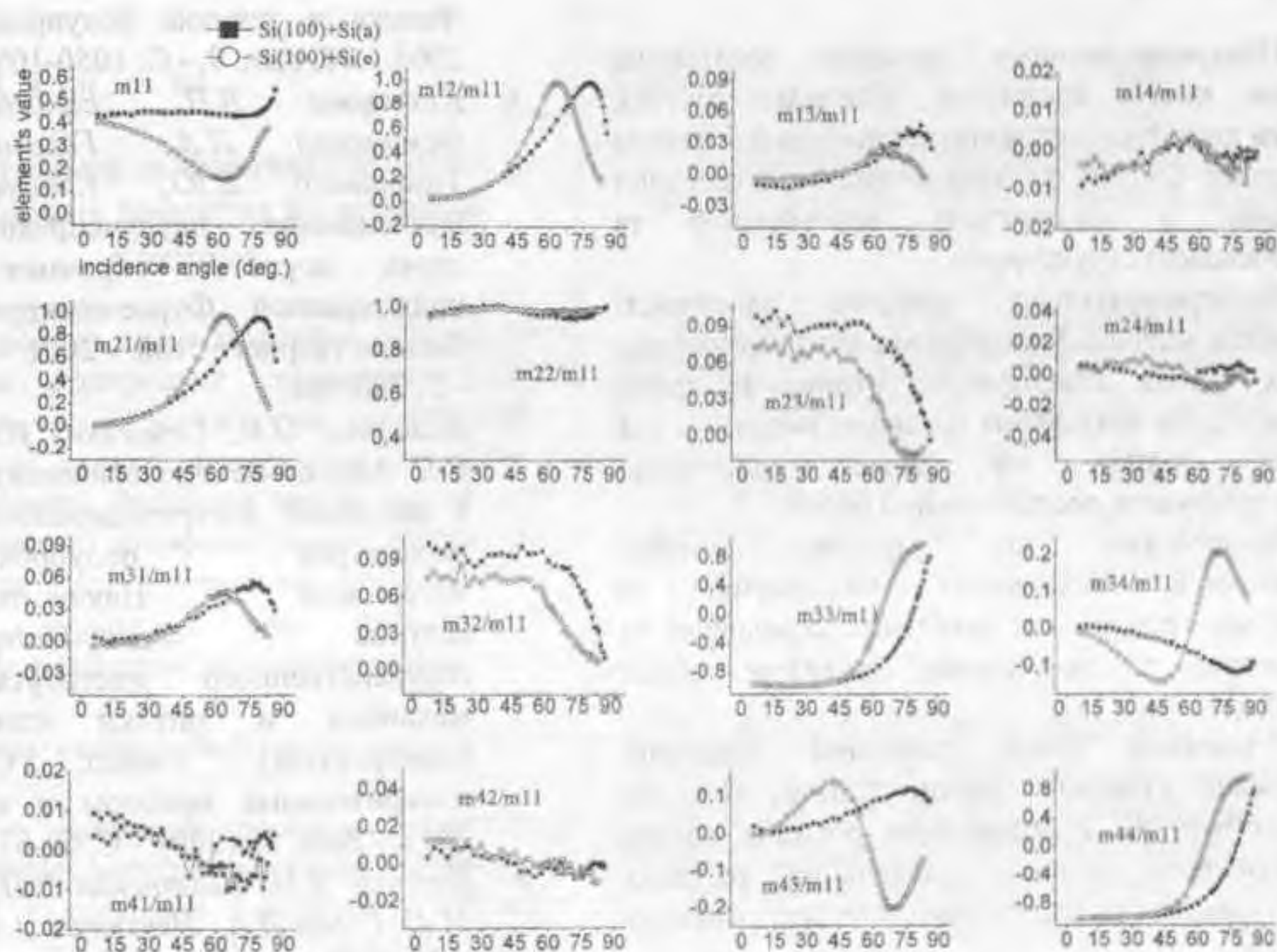


Рис.6. Кутові залежності елементів матриці Мюллера при відбитті від підкладки Si(100) з аморфною (■) та рівноосьовою (○) плівками товщиною 0.5 мкм та розмірами зерен 0.5 мкм

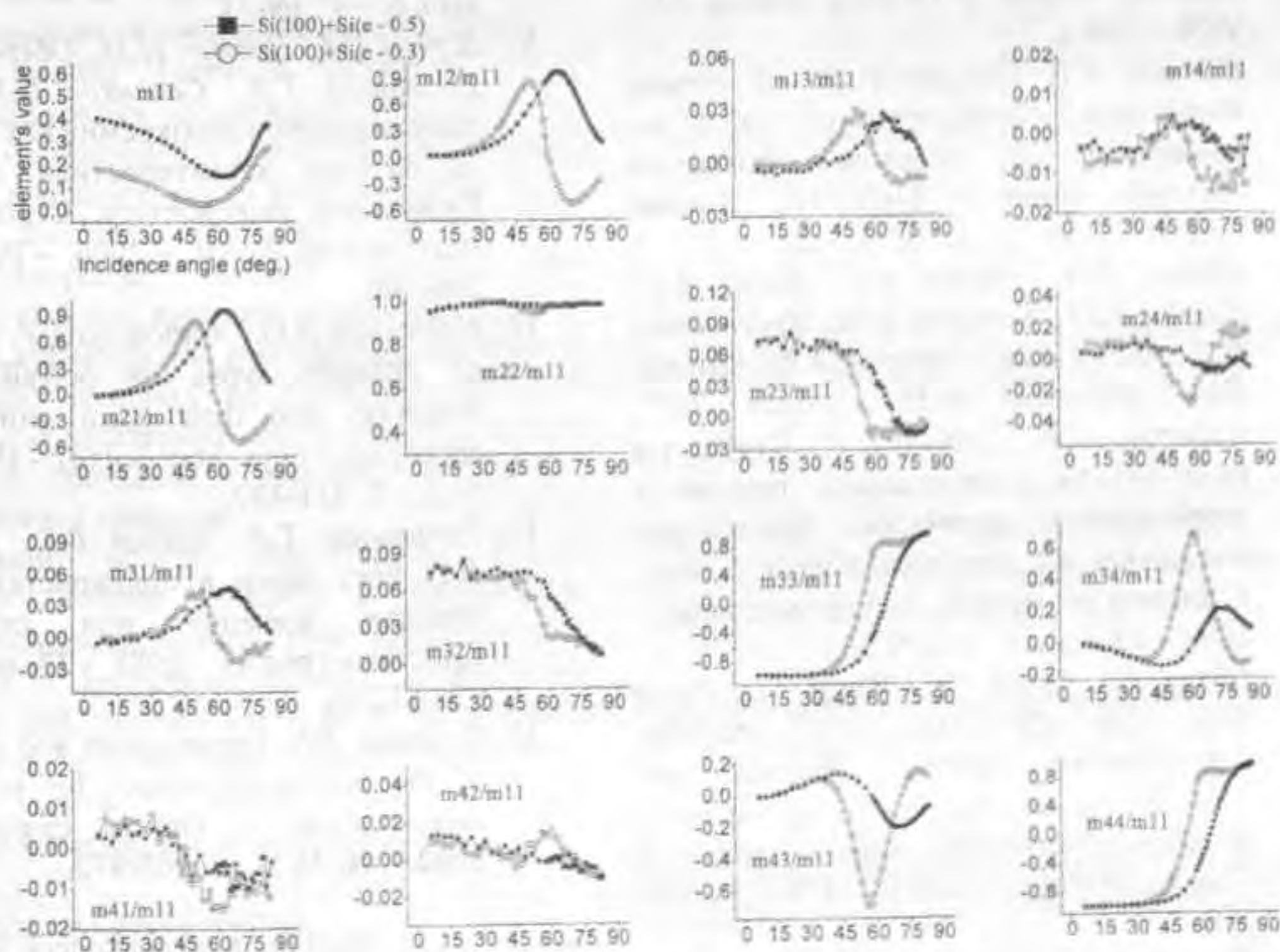


Рис.7. Кутові залежності елементів матриці Мюллера для зразків з рівноосьовими плівками із зернами 0.5 мкм (■) та (0.3 мкм) (○).

Висновки

Поляриметричними методами досліджено зразки: чистої кремнієвої підкладки Si(100), плівки аморфного кремнію товщиною 0.7 мкм на підкладці Si(100) та кремнієвих плівок різної товщини з дендритною, волокнистою та рівноосьовою структурами.

Експериментально виміряні залежності елементів матриці Мюллера від кута падіння для даних зразків. Аналізування отриманих даних показало, що зондування в одному напрямку для різних зразків не може однозначно характеризувати досліджуваний об'єкт.

Встановлено, що характер кутових залежностей (положення максимумів та мінімумів) різний для суцільних середовищ та середовищ з нанесеними плівками різної структури.

Отримання більш детальної кількісної інформації стосовно товщин плівок, тієї або іншої структури, її характерних розмірів, оцінки її пористості потребує детальних тестових експериментів із залученням стандартизованих об'єктів.

Список використаних джерел

1. Бори М., Вольф Э. Основы оптики. М., 1970. – 856 с.
2. Павлова Е.Г. Поляризаторы на основе пленочных наноструктур и их применение в волоконно-оптических системах связи // *Lightwave. Russian Edition*. - 2006. - № 3. - С. 49-52.
3. Малеев Н.А., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Егоров А.Ю., Устинов В.М., Крестников И.Л., Лунев А.В., Сахаров А.В., Воловик Б.В., Леденцов Н.Н., Котьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. Структуры InGaAs/GaAs с квантовыми точками в вертикальных оптических резонаторах для диапазона длин волн вблизи 1.3 мкм. // *Физика и техника полупроводников*. - 1999. - 33, вып. 5. - С. 629-633.
4. Chang J.J., Hsieh T.E., Wang Y.L., Tseng W.T., Liu C.P., Lan C.Y. Modified polycrystalline silicon chemical-vapor deposition process for improving roughness at oxide/polycrystalline silicon interface // *Thin Solid Films*. - 2005. - 472. - P. 164-168.
5. Беляева А.И., Галуза А.А., Коломиец С.Н. Границы раздела слоев и шероховатость в многослойной кремниевой структуре //

- Физика и техника полупроводников. - 2004. - 38, вып. 9. - С. 1050-1055.
6. Кузнецова Л.П., Ефимова А.И., Осмикина Л.А., Головань Л.А., Тимошенко В.Ю., Кашикарров П.К. Исследование двулучепреломления в слоях пористого кремния методом инфракрасной Фурье-спектроскопии // *Физика твердого тела*. - 2002. - 44, вып. 5. - С. 780-784.
 7. Майорова О.В., Скалецкая И.Е., Орлова Е.Е. Анализ методологических подходов к описанию поляризационно-оптических параметров полупроводниковых материалов // *Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного института точной механики и оптики (технического университета). Раздел: Оптические измерительные приборы и системы*. - 2001. - Вып. 15 (209). - С. 60-67.
 8. Биленко Д.И., Полянская В.П., Гецьман М.А., Горин Д.А., Невешкин А.А., Яценюк А.М. Влияние переходного слоя на результаты эллипсометрических исследований наноразмерных слоев // *Журнал технической физики*. - 2005. - 75, вып. 6. - С. 69-73.
 9. Барчук О.І., Литвин П.М., Оберемок Є.А., Родіонова Т.В., Савенков С.М. Вплив типу структури полікремнієвих плівок на їх оптичні характеристики // *Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки*. - 2006. - Вип. 3. - С. 299-306.
 10. Nakhodkin N.G., Rodionova T.V. Formation of different types of polysilicon film structures and their grain growth under annealing // *Phys. Stat. Sol.(a)*. - 1991. - 123, № 2. - P. 431-439.
 11. Родіонова Т.В., Кобка В.Г., Находкин Н.Г. Рост зерен в поликристаллических пленках кремния при отжиге // *Кристаллография*. - 1988. - 33, вып. 5. - С. 1207-1212.
 12. Savenkov S.N. Optimization and structuring of the instrument matrix for polarimetric measurements // *Optical Engineering*. - 2002. - 41, № 5. - P. 965-972.

Надійшла до редколегії 30.05.2007

УДК 382.2

Білоусов І.В., к.т.н., ст. н.с.

Формування силіцидного шару в двовимірних дефектах на поверхні кремнію

Проаналізовано вплив дефектів на поверхні кремнію на формування силіцидного шару. Розраховано часові залежності температури екзотермічної реакції формування силіциду в області дефекту. Виділення тепла при високій швидкості реакції обумовлює значне підвищення температури в зоні реакції, що призводить до плавлення силіциду і його латерального розростання на поверхні металевої плівки.

Ключові слова: силіцид, дефект, межа розділу.

Однією з важливих проблем формування силіцидів металу методом твердофазного синтезу на кремнії є проблема однорідності рельєфу силіцидної плівки [1]. Експериментальні дослідження впливу морфології поверхні напівпровідника на процеси реакційної взаємодії в системах метал - кремній свідчать про значний вплив дефектів на структуру силіцидної плівки. Високий коефіцієнт дифузії всередині дефекту і висока реакційна здатність атомів на його бокових поверхнях обумовлюють активізацію процесів масопереносу і суттєве підвищення локальної швидкості росту шару силіциду [4-5]. Крім того, зростання температури екзотермічної реакції утворення силіциду при високій швидкості хімічної взаємодії може призвести до плавлення взаємодіючих компонент в зоні реакції [5-6]. Викид розплаву на поверхню під дією пружних або капілярних сил в області дефекту може бути причиною утворення специфічних отворів у плівці силіциду.

В даній роботі аналізується процес формування плівки силіциду в двовимірних структурних дефектах типу границі кристаліту чи дислокації. Експериментальні дослідження проведені для системи Co - Si, в якій реакція формування силіциду характеризується низькою енергією активації і високою чутливістю до структури поверхні напівпровідника.

Результати і обговорення.

Аналіз процесів силіцидоутворення в дефекті на поверхні кремнію здійснюватимемо в рамках моделі Фішера [1], в якій двовимірний дефект

Belousov I.V., senior scientific researcher.

Formation of layer silicide in two-dimensional defects of surface silicon

The influencing of defects surface of silicon on processes of formation silicide layer was investigated. Relation of temperature to time of reaction formation of silicide in the field of a defect is determined. The heating at high speed of exothermic reaction causes a melting of silicide and it of lateral increase on surface of metallical film.

Key words: silicide, defects, interface.

розглядається як поглиблення шириною δ з високим коефіцієнтом дифузії, що обмежується границями об'ємного напівпровідникового матеріалу з меншим коефіцієнтом дифузії (рис.1).

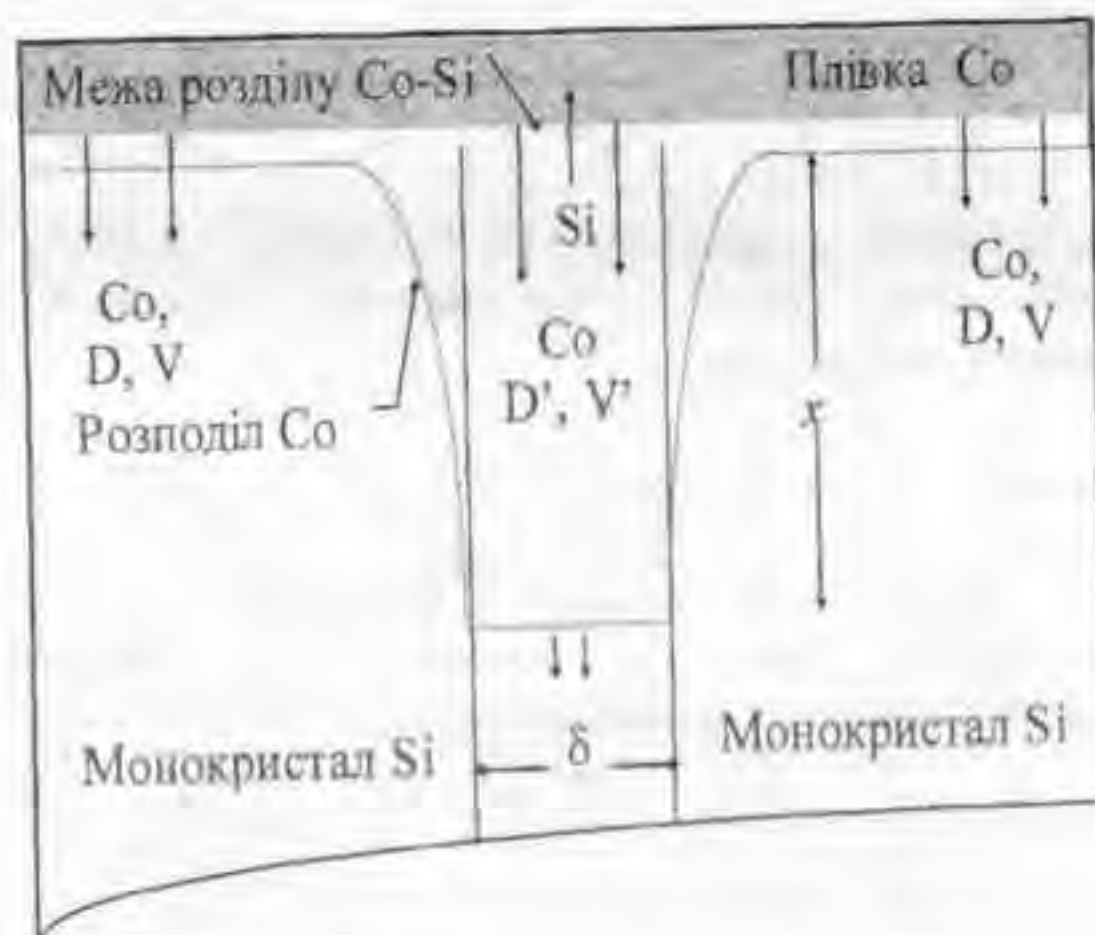


Рис. 1. Структура двовимірного дефекту. Заштриховано – сформований шар силіциду товщиною x ; δ - ширина дефекту.

На поверхню напівпровідника (Si) нанесено тонкий шар металу (Co), атоми якого надходять до дефекту, утворюючи суміш атомів металу та кремнію. В моделі передбачається, що структура нагріта до початкової температури T_0 , достатньої для проходження реакції утворення силіциду.

Для точного знаходження розподілу температур у зоні реакції необхідно розрахувати кількість тепла, що виділилася в результаті

реакції і розв'язати рівняння теплопровідності для системи, показаної на рис.1.

Згідно моделі Фішера, середньоквадратичний зсув x атомів металу вглиб дислокації є пропорційним кореню четвертого ступеня часу дифузії t :

$$x = At^{\frac{1}{4}}, \quad A = \sqrt{\frac{\delta D' \sqrt{\pi}}{2\sqrt{D}}}, \quad (1)$$

де δ - поперечний розмір структурного дефекту, D і D' - відповідно, коефіцієнти дифузії в суцільному матеріалі і дефекті. Для системи Co-Si експериментальні значення $D'/D \sim 10^4 \div 10^5$ [4].

Вважатимемо, що лише незначна частина дифундуючих усередину дефекту атомів кобальту може брати участь у реакції з низькою енергією активації. Хімічна реакція утворення силіциду $\text{Co} + \text{Si} = \text{CoSi}$ відбувається тільки на межах розділу CoSi/Si в дефекті і протилежним потоком атомів Si в плівку Co можна знехтувати. Після переходу через границю фаз CoSi-Si атом металу реагує з атомом кремнію і при цьому швидкість реакційної взаємодії v' . Загальний час росту силіцидної фази товщиною x визначається сумою часів проходження дифузії і хімічної реакції:

$$t = \frac{x^4}{A^4} + \frac{x}{v'}. \quad (2)$$

Товщина x зростаючого в області дефекту силіцидного шару визначається рівнянням четвертого ступеня:

$$x^4 + \frac{A^4}{v'} x = A^4 t, \quad (3)$$

де t - час від початку реакції. Швидкість V росту силіцидного шару x обчислюється шляхом диференціювання рівняння (2):

$$V = \frac{dx}{dt} = \left(\frac{4x^3}{A^4} + \frac{1}{v'} \right)^{-1} \quad (4)$$

Граничні значення рівняння (4) наступні: $V = v'$, якщо $4x^3 v' \ll A^4$ і $V = \frac{A^4}{4x^3}$, якщо $4x^3 v' \gg A^4$.

Зміна цих двох граничних режимів відбувається

при $x' \approx \sqrt[3]{\frac{A^4}{4v'}}$. Із порівняння цієї величини з

товщиною $x_1 \approx \frac{D}{v}$ (v - швидкість росту в кінетичному режимі для бездефектного гомогенного шару) слідує [2], що в дефектному середовищі при великих v і v' можна отримати

значно більшу товщину силіцидного шару. Наприклад, при $D \approx 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$, $D' \approx 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$, $\delta \approx 10^{-8} \text{ м}$ і $v' \approx 10^{-2} \text{ м/с}$ отримаємо $x' \approx 1.3 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ замість $x_1 \approx 1 \cdot 10^{-12} \text{ м}$ при тому ж значенні v для випадку звичайної дифузії. Високі швидкості хімічної реакції можуть бути результатом залежності її енергії активації від високої густини поверхневого заряду на внутрішніх границях структурних дефектів і мікротріщин у кремнії [2-3].

Оцінімо температуру силіцидного шару при проходженні екзотермічної реакції $\text{Co} + \text{Si} = \text{CoSi}$ на межі розділу фаз CoSi/Si. Розглянемо випадок, коли напівнескінченна пластина шириною δ (область дефекту) і високим коефіцієнтом дифузії D' розміщена в суцільному матеріалі. Товщина нанесеного шару кобальту 10-50 нм, система знаходиться при температурі хімічної взаємодії $T_0 = 1000 \text{ К}$ (рис.1). У результаті екзотермічної реакції силіцидоутворення за час τ виділяється теплота $q_1 [T(r=0, \tau)] = \tilde{Q} \rho_1 x(\tau) \delta L$, де T - температура, r - просторова координата, $\tilde{Q}$ - тепловий ефект реакції, L - довжина дефекту.

Вважаючи, що $L \gg \delta$ і геометричні розміри зразка значно перевищують характерну довжину поширення тепла ($\sim 10^{-6} \text{ м}$) за даний проміжок часу, можна розглядати розподіл температур в структурі як нагрів напівнескінченного простору Si лінійним джерелом тепла зі змінною потужністю [3]. Питома потужність виділення тепла на одиницю довжини в цьому випадку дорівнює:

$$q [T(r=0, \tau)] = \tilde{Q} \rho_1 V(\tau) \delta. \quad (5)$$

Зміщення реакційної зони вглиб дефекту можна не враховувати, оскільки при тривалості розігріву $\tau \leq 10^{-3} \text{ с}$ характерна довжина поширення тепла $\sim 10^{-6} \text{ м}$ перевищує це зміщення ($\sim 10^{-8} \div 10^{-7} \text{ м}$) і перепад температур на таких довжинах є несуттєвим. Рівняння для знаходження температури системи при розігріві лінійним джерелом тепла зі змінною потужністю запишемо:

$$T(r, \tau) = T_0 + \frac{1}{2\pi\lambda} \int_0^\tau \frac{q[T(r, z)] e^{-\frac{r^2}{4a(\tau-z)}}}{\tau-z} dz, \quad (6)$$

де λ - теплопровідність кремнію, a - коефіцієнт температуропровідності кремнію. Розв'язуючи систему рівнянь (4)-(6) запропонованим в [3] методом, отримаємо при $\tau_{m-1} < \tau < \tau_m$:

$$T(r, \tau_m) = T_0 + \frac{1}{2\pi\lambda} \int_0^{\tau_m-1} \frac{q[T(r, z)] e^{-\frac{r^2}{4a(\tau-z)}}}{\tau-z} dz + \frac{q[T(r, \tau_{m-1})]}{2\pi\lambda} \int_{\tau_{m-1}}^{\tau_m} \frac{e^{-\frac{r^2}{4a(\tau-z)}}}{\tau-z} dz \quad (7)$$

Температурні залежності швидкості росту реакційного шару мають арсеніусівський вигляд:

$$v = v_0 e^{-\frac{U_r}{kT}}, \quad v' = v'_0 e^{-\frac{U_r}{kT}},$$

$$D = D_0 e^{-\frac{U_d}{kT}}, \quad D' = D'_0 e^{-\frac{U_{def}}{kT}}, \quad (8)$$

де v_0, v'_0, D_0, D'_0 - передекспоненційні множники, U_r - енергія хімічної реакції, U_d - потенційний бар'єр дифузії Co в об'ємі Si, U_{def} - потенційний бар'єр дифузії Co в дефекті, g - числовий множник ($0 < g < 1$).

При залежних від температури коефіцієнтах система рівнянь (1)–(5) вирішується числовими методами. При заданій товщині x силіцидного шару час t його формування можна визначити з рівняння (2). Швидкість росту шару в даний момент часу визначається за значенням похідної залежності товщини від часу. Далі із рівняння (5) розраховується кількість виділеного тепла, а із рівняння (7) визначається температура системи.

Для розрахунку розподілу температури в системі використовували температурні залежності коефіцієнтів дифузії:

$$D = 10^{-5} e^{-\frac{1.9 \text{ eV}}{kT}}, \quad D' = 10^{-5} e^{-\frac{3 \cdot 1.9 \text{ eV}}{5 kT}}.$$

Величина $U_d = 1.9 \text{ eV}$ експериментально визначена в умовах дифузійного росту шару CoSi [6]. Тоді згідно (8) для визначення швидкості лінійного росту силіцидного шару в системі Co-Si можна

скористатися виразом: $v' = 10^3 e^{-\frac{1.9 \text{ eV}}{kT}}$. При початковій температурі $T = 1000 \text{ K}$ і $g = 1$ значення швидкості лінійного росту приблизно дорівнює $v' \sim 10^{-7} \text{ м/с}$, а енергетичний ефект реакції $\bar{Q} \sim 1.15 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$.

Часові залежності $T(t)$ температури системи Co-Si для $g = 0.3$ при різних значеннях ширини дефекту δ показані на рис.2. При малих значеннях δ зростання температури є незначним

(рис.2, кр.1). Зі збільшенням δ спостерігається поступовий перехід до експоненційного росту температури (рис.2, кр.2,3). При подальшому збільшенні параметра δ експоненційне зростання температури стає більш вираженим. Температура поверхні розділу метал-кремній досягає температури плавлення CoSi, а потім після переходу росту шару в дифузійний режим зменшується згідно залежності $t^{-1/4}$ (рис.2, кр.4). При значеннях $\delta \geq 5 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ область плавлення може охопити весь покриваючий шар кобальту. Характерні часи розігріву реакційної зони до температури плавлення: $\tau_p \sim 10^{-8} \text{ с}$.

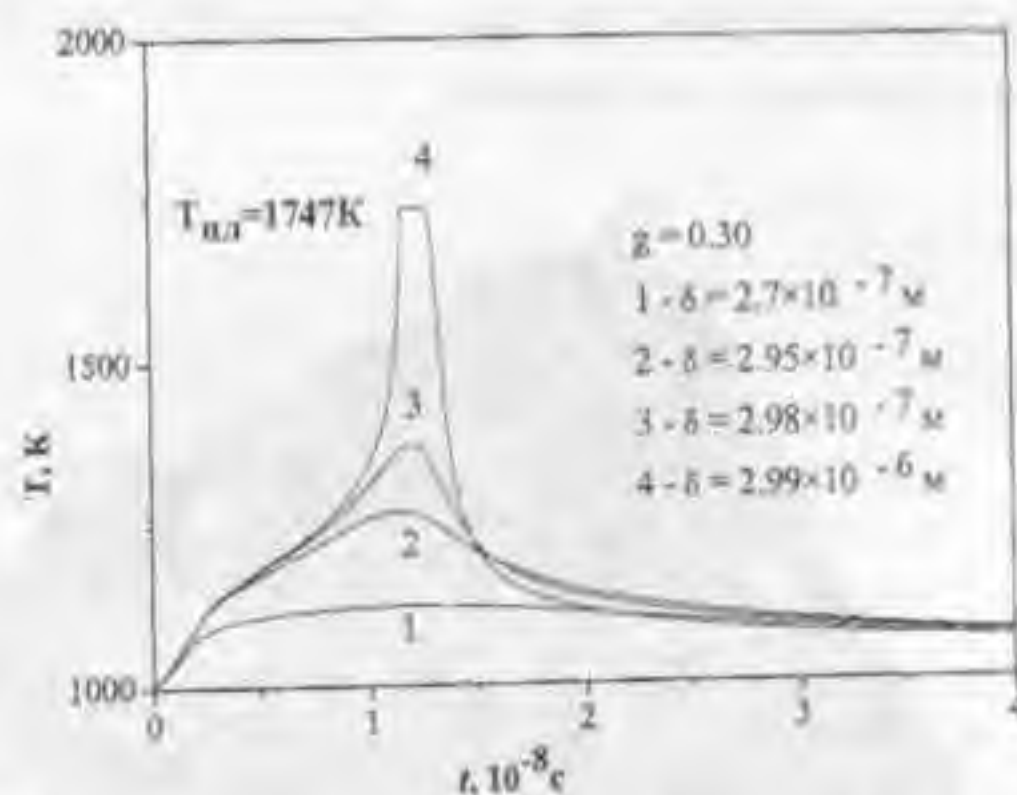


Рис. 2. Часова залежність температури $T(0,t)$ системи Co-Si при різних значеннях параметра δ .

Використовуючи множник g , можна моделювати зміни енергії активації реакції, обумовлені зміною поверхневого заряду на внутрішніх поверхнях дефекту. При малих δ експоненціальний ріст температури на початковій стадії проявляється лише при великих швидкостях хімічної реакції і малих значеннях g . Одночасно розширюється часовий інтервал, при якому здійснюється плавлення силіциду. При великих значеннях g ріст товщини силіцидного шару уповільнюється і температура зменшується після максимуму не досягаючи значення температури плавлення.

Відмітимо, що при досягненні температури реакції рівня температури плавлення Co, Si і CoSi модель нагріву системи повинна враховувати значення питомих теплоємностей плавлення фаз. Це означає, що температура в області реакції не перевищує температуру плавлення або зменшується після закінчення

реакції. Розплавлений силіцид витягується капілярними силами на поверхню плівки Co протягом часу $\sim 10^{-7}$ с, і після цього відбувається процес кристалізації CoSi_2 . Плавлення силіцидного шару в області структурних дефектів під час проходження екзотермічної реакції з малою енергією активації призводить до формування мікроканалів і локальних порушень структури силіцидної плівки.

Порушення суцільності силіцидного покриття експериментально спостерігались методами тунельної мікроскопії у вигляді характерних отворів у плівці силіциду (рис.3). Можна вважати, що утворення отворів у системі Co-Si при досить значних δ відбувається за описаним вище механізмом.

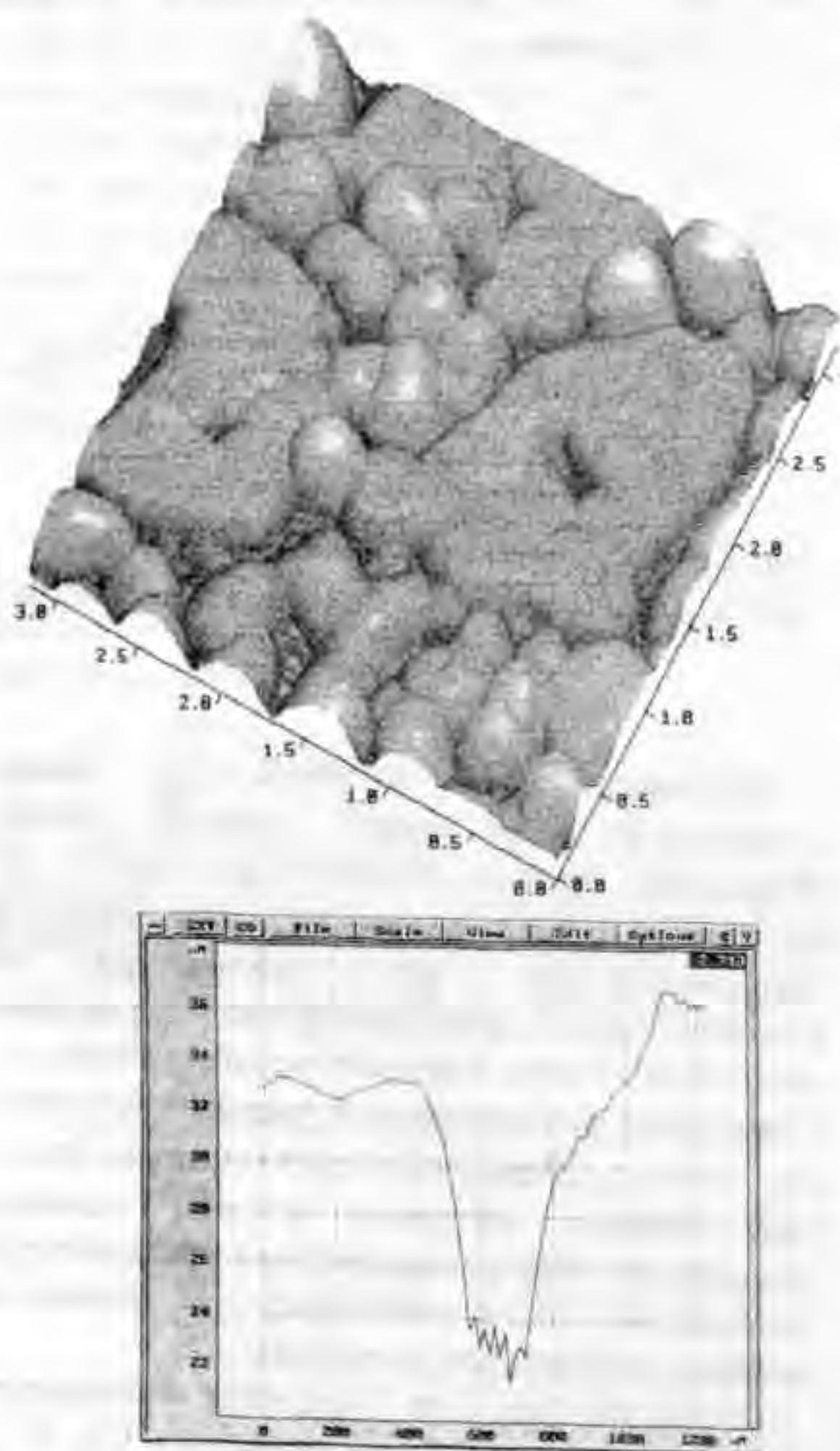


Рис. 3. Вплив структурних дефектів на поверхні кремнію на формування мікроотворів у силіцидному шарі CoSi_2 .

а – зображення поверхні силіцидної плівки;
б – профіль мікроотвору.

Висновки

Розглянуто особливості процесу формування силіцидного шару в двовірному дефекті на поверхні кремнію. Показано, що в області дефекту значно зростає швидкість росту шару силіциду, що обумовлено високим коефіцієнтом дифузії і зниженням енергії активації реакції хімічної взаємодії. Високі швидкості росту силіцидного шару при екзотермічній реакції силіцидоутворення призводять до значного саморозігріву системи. Розрахунок температури в зоні реакції показав, що при певних значеннях параметрів моделі (ширини дефекту й енергії активації реакції) як силіцид, так і покриваючий шар кобальту розігріваються до температури плавлення. Викид розплаву на поверхню в області дефекту може спричиняти порушення суцільності покриття і утворення мікроотворів в плівці силіциду.

Список використаних джерел

1. Тонкие пленки. /Под ред. Поута Д., Ту К., Мейера Д. – М.: Мир, - 1982. - 576 с.
2. Гуров К.П., Карташкин Б.А., Угасте Ю.Э. Взаимная диффузия в многофазных металлических системах. – М.: Наука, - 1981. - 350 с.
3. Методы измерения теплопроводности и температуропроводности. /Под ред. Лыкова А.В. – М.: Энергия, - 1973. - 270 с.
4. Belousov I., Rudenko E., Linzen S., Seidel P. Local nucleation and lateral crystallisation of silicide cobalt phases at interaction of cobalt film with silicon surface. // Thin Solid Films. - 1998. - 325. - p.145-150.
5. Ruan L., Chen D. M. Pinhole formation in solid phase epitaxial film of CoSi_2 on Si(111). // Appl. Phys. Lett. -1998. - 72, No 26, - p.3464-3368.
6. Belousov I.V., Grib A.N., Kuznetsov G.V. The influence of surface defects on the pinhole formation in silicide thin film. // Semiconductor physics, quantum electronics and optoelectronics. -2006. – 9, – No 3. – p.30-35.

Надійшла до редколегії 30.06.07.

УДК 518: 519.9

Брендель М.О., студент, Данилов В.В., докт. фіз.-мат. наук, професор, Макаров Д.Г., студент, Нечипорук О.Ю., канд. фіз.-мат. наук, доцент

FDTD-аналіз проходження електромагнітної хвилі крізь структуру з фотонною забороненою зоною

Використано FDTD метод чисельного розв'язку рівнянь Максвелла для дослідження проходження електромагнітного випромінювання крізь періодично-неоднорідний планарний хвилевід. Отримано спектральні залежності для коефіцієнта пропускання. Результати порівнюються з такими, що отримано з аналітичних розрахунків. Обговорюються основні переваги та недоліки чисельного розрахунку таких систем.

Ключові слова: FDTD метод, рівняння Максвелла, фотонна заборонена зона.

Brendel' M.O., Student, Danilov V.V., Professor, Makarov D.G., Student, Nechiporuk O.Y., Associate Professor

FDTD-analyse of electromagnetic wave propagation through photonic band gap structure

FDTD-method for numerical solution of Maxwell's equation has used for investigation of electromagnetic wave transmission through the periodically inhomogeneous planar waveguide. The spectral dependence for transmission factor has obtained. This result compared with the previous one, obtained with approximate analytical calculations. General advantages and disadvantages of numerical method usage for the investigation of such systems have discussed.

Key Words: FDTD-method, Maxwell's equation, photonic band gap.

*E-mail: chipa@univ.kiev.ua

1. Introduction

For the last decades the multilayered structures (1D, 2D and/or 3D) are widely investigated. First of all such wide usage and analytical investigations directly connected to the unique properties of the photonic structures to create the band gap for transmission of electromagnetic wave through the structure [1]. This effect finds application using for producing large number of devices: for projecting of systems with antireflectance covering [2], interference mirrors and filters [3], semiconductors superlattices [4] etc. From the other side, the most perspective direction in such multilayered structures investigation is creation of photonic crystals – macroscopic structures with periodical (spatial) changes of structure parameter, which makes the band gap for irradiation, influence such structure. At present the requirement to the photonic crystal structures became higher: now it is necessary to produce band gap structures with tuneable characteristics of structure parameters: position and spectral width of band gap; and, of course, it is useful to change light parameters (ellipticity and orientation of polarisation angle) passing through the structure [5-7]. Before the main method of investigation of such structure properties was the direct solution of Maxwell's equations with certain boundary conditions [6-7]. This gives the opportunity to obtain the basics characteristics of the spectral dependencies of reflection (transmission)

factor, investigate influence structure parameters (quantity of layers, layers material etc.) on the behaviour of reflection factor and parameters of light. These dependencies obtain, of course, in very strong approximations: investigations of marked parameters near the first Bragg maximum (first Brillouin zone), small perturbations of non-diagonal components of the permeability tensor etc [6-7]. Nevertheless, with the development of modern technologies for producing thin films with certain parameters the devices, which used now for various practical purposes, are complicated enough, so for analytical forecasting is not enough to use linear (and even weakly non-linear) theories. So, single possibility for investigation of the photonic band gap structures is usage of numerical methods, such as: finite-dimension-time-domain (FDTD), finite-elements (FE) or N-order methods. These methods give the opportunity to obtain general properties of the complex electromagnetic structure with complex boundary conditions. The paper seek to investigate numerically the propagation of linear polarised light through 1D multilayered structure in planar waveguides.

We assume that such theory can be very useful for projection of the various number of waveguide: filters, routers etc. So, the common values in near infra red region for Bragg wavelength and refraction index of layers were used as parameters of the theory for calculation.

II. Basic part

In the work we present numerical calculation of wave transmission through the multilayered structure and compare obtained results of our paper with the well known similar classical calculations. So, it is natural to divide investigations into two parts.

FDTD calculation

In this part we want to obtain the distribution of electrical field in the structure for different time interval – evolution of the field in structure. For such dependencies calculation it is common to use FDTD-method, because this method gives the opportunity to solve time-dependent Maxwell's equations [8]. The main point of the method is following: all investigated volume G is divided into elementary spatial cells $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$ (for 3D geometry of the problem) and time intervals Δt . In the certain cell of obtained lattice we have to set the starting condition. After that the starting condition is recalculating on the recurrent low in the nearest cells. After large quantity of such recalculations we can get the field distribution in arbitrary cell of the lattice at arbitrary moment of time.

From the description of the basic positions of FDTD-method we see that it is simple method for algorithm realisation. Any way, the large quantity of recurrent procedure usage makes such computations very hard even for modern computer systems.

$$Ez_{(i,j)}^{n+1} = \frac{1}{(1 + \alpha_{(i,j)}\Delta t)} \left[2Ez_{(i,j)}^n - Ez_{(i,j)}^{n-1}(1 - \alpha_{(i,j)}\Delta t) + \frac{c\Delta t}{\varepsilon_{(i,j)}\Delta x} [Ez_{(i+1,j)}^n + Ez_{(i-1,j)}^n - 2Ez_{(i,j)}^n] + \frac{c\Delta t}{\varepsilon_{(i,j)}\Delta y} [Ez_{(i,j+1)}^n + Ez_{(i,j-1)}^n - 2Ez_{(i,j)}^n] \right], \quad (4)$$

where $\alpha_{(i,j)}$ – describes the amplification (damping) term ($\alpha(i,j) = \frac{\mu\mu_0\sigma(i,j)}{2}$ but in this work we assume $\alpha_{(i,j)} = 0$); $\varepsilon_{(i,j)}$ – distribution of dielectric constant at the space; c – light speed in vacuum. Very important point in this relation is that we used symmetric presentation of the first derivative on time: it means that $\frac{\partial Ez}{\partial t} \rightarrow \frac{Ez_{(i,j)}^{n+1} - Ez_{(i,j)}^{n-1}}{2\Delta t}$. Based on the equivalence of all directions in space the first and the second order space derivatives choose in symmetric form. Steps $\Delta x, \Delta y$ and Δt choose from the position of satisfying the Currant ratio:

Calculation description

We will investigate the Maxwell's equations for the isotropic linear medium. In SI system the set of Maxwell's equations take the form:

$$\text{rot}\vec{H} = \sigma\vec{E} + \varepsilon\varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \text{rot}\vec{E} = -\mu\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t},$$

$$\text{div}\vec{H} = 0, \quad \text{div}\vec{E} = 0 \quad (1)$$

where ε, μ, σ – dielectric and magnetic permeability constants and conductivity of the medium; these parameters are time independent. This system of equations can be easily transform to the wave equation, which in the case under discussion has the form:

$$-\Delta\vec{E} + \mu\mu_0\sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{\varepsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

As example we show the usage of the method for calculation only TE mode in waveguide; so we assume that components E_x, E_y and H_z of magnetic and electric field are equal to zero. In this assumption vector Eq.(2) can be transform to one equation for calculating Ez -component:

$$\frac{\partial^2 Ez}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Ez}{\partial y^2} - \mu\mu_0\sigma \frac{\partial Ez}{\partial t} - \frac{\varepsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 Ez}{\partial t^2} = 0 \quad (3)$$

Now we present (3) as time and space differences:

$\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} \geq c_{\max} \Delta t$, where $c_{\max}$ – the maximum value of light speed in the medium.

From the physical point of view the investigated volume G has to be infinity. Of cause, this infinity includes to the boundary conditions. So, for the mathematical model of the physical infinity we used the following means: on the boundary of the investigated region we recalculate the field, using the expressions like:

$$Ez_{(i,Y-1)}^n = Ez_{(i,Y-1)}^{n-1} + (Ez_{(i,Y-2)}^{n-1} - Ez_{(i,Y-1)}^{n-1}) / \sqrt{\varepsilon_{(i,Y-1)}}$$

$$Ez_{(i,0)}^n = Ez_{(i,0)}^{n-1} + (Ez_{(i,1)}^{n-1} - Ez_{(i,0)}^{n-1}) / \sqrt{\varepsilon_{(i,0)}}$$

One can see, that when $\varepsilon = 1$, last expressions become $Ez_X^n = Ez_{X-1}^{n-1}$, $Ez_0^n = Ez_1^{n-1}$: here X, Y – the boundary of the investigated region. It's mean, that on the boundary we not recalculate the field but set it by program. In such way perfectly matched layer has been introduced. After that we can

calculate by recurrent algorithm Eq.(4) and, as a result, we can obtain the field distribution in space for any time moment.

Result of numerical calculation

Now we can represent the dispersion curve for radiation, passed through periodic medium (Fig.1). We investigate light propagation through the following system: in free space with $\epsilon_1 = 1$ we have isotropic linear dielectric waveguide with $\epsilon_2 = 4$. We can assume that, in any way, we produce grating (with $\epsilon_{max} = 6.25$ and $\epsilon_{min} \equiv \epsilon_2 = 4$) at certain part of this waveguide (Fig.1). The thickness of the grating is $\lambda_0 / (4n)$, where $\lambda_0 = 1.7 \mu m$ ($f_0 = 177 THz$). Using method, explained above, we can calculate the distribution of field for any frequency for any time moment with certain step on frequency and as a result – we can obtain spectral dependence of transmission factor T (Fig.2, curve 1).

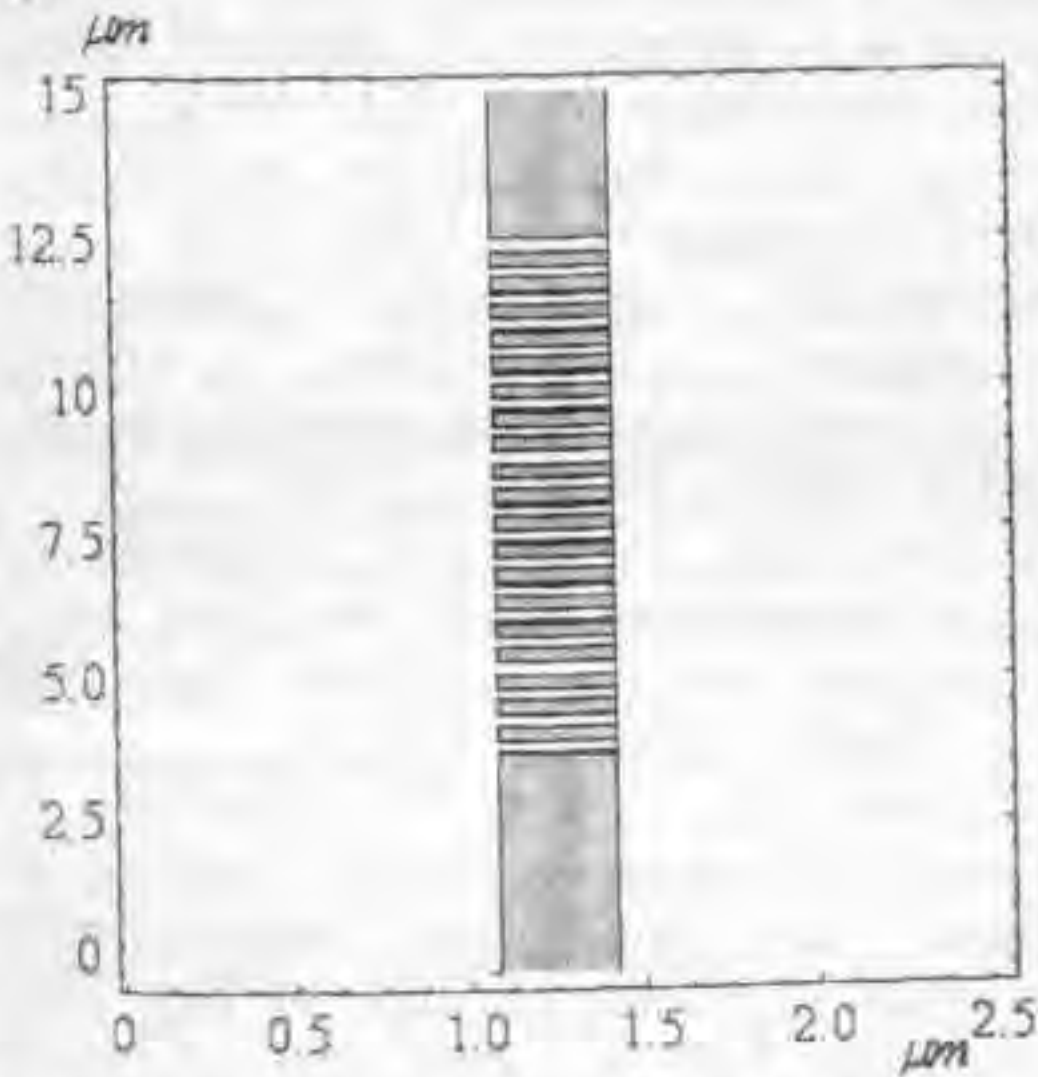


Fig.1 Contour plot of the ϵ distribution in the investigated structure

We choose for the investigation the 2D-space $2.5 \times 15 \mu m$ points; at the middle of the plate we have symmetrically situated waveguide with width $0.375 \mu m$. We use the following space and time steps:

$$\Delta x = \Delta y = 0.025 \mu m / dot; \Delta t = 5.9 \cdot 10^{-17} \text{ sec},$$

$$\text{which give us } C \equiv \left(\frac{c_{max} \Delta t}{\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}} \right)^2 = 0.5, \text{ that}$$

satisfy exact the Currant ratio. This gives us an

opportunity to make very simple boundary conditions, which marked above.

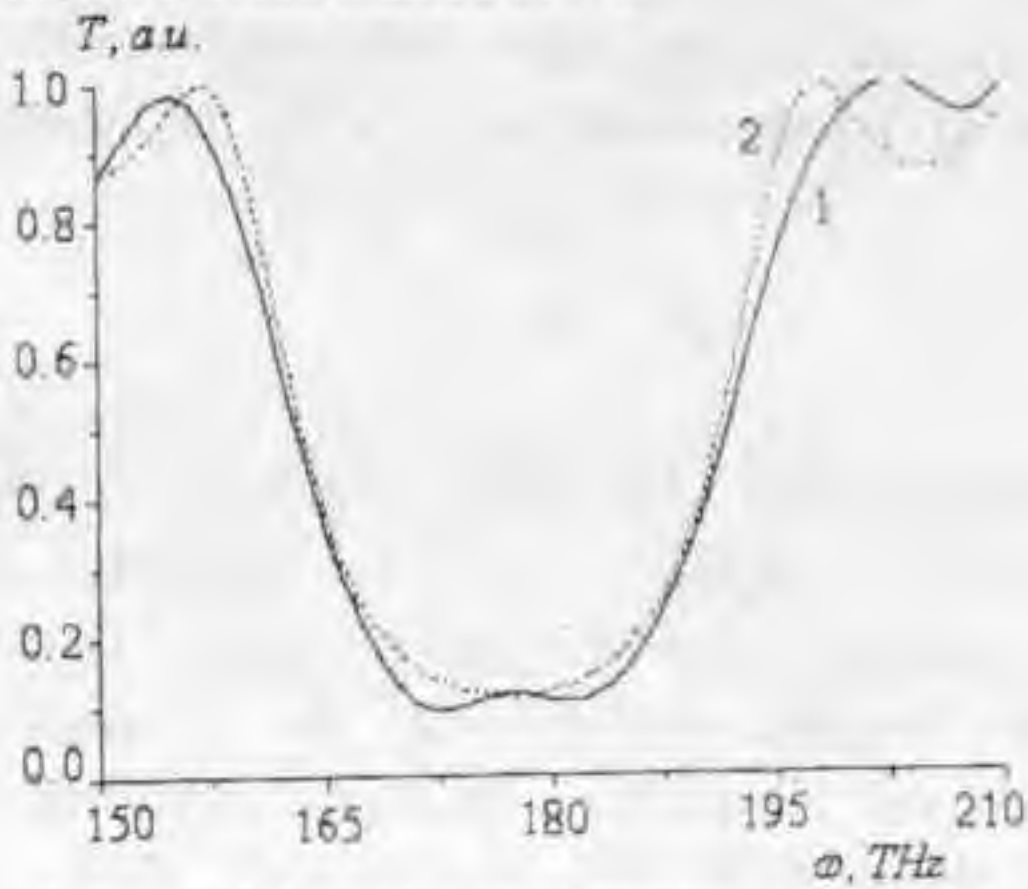


Fig.2 Spectral dependence of transmission factor (curve 1 - numerical and curve 2 – analytical calculated). Curve 2 obtained for the follow parameters: $n_1 = 2$; $n_2 = 2.5$; $p = 10$.

Analytical calculation

For comparison of numerical calculation with existed analytical model we used the simplest case of the last one and analysed the case of light transmission through 1D periodical structure. Such assumption is valid only for phenomenological comparison of these two theories. Now we describe briefly analytically general purposes of the transmission factor properties in the structure, shown in Fig.3 (full description one can find in Ref.1).

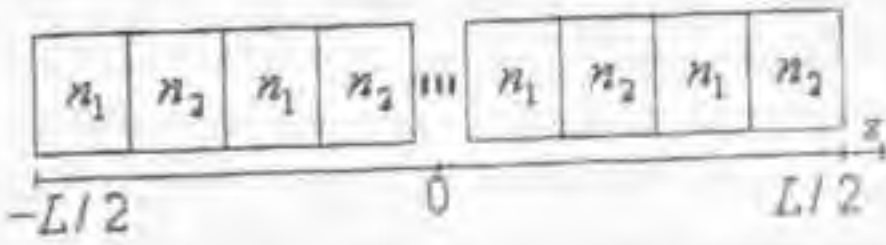


Fig.3 Schematical view of the investigated structure

The dependence of refraction index on coordinate is periodical, so we can expand function $n(z)$ into Fourier series. For simplification of calculations we will investigate the properties of the structure only near the first Bragg maximum, which gives the opportunity to take only first harmonic term from the expansion and approximate the changes of refraction index as:

$$n(z) = n_0 + \Delta n \cos(2\beta_0 z) \tag{5}$$

$$\text{where } n_0 = \frac{n_2 + n_1}{2}; \Delta n = \frac{n_2 - n_1}{2}; \beta_0 = \frac{m \cdot \pi}{\Lambda},$$

m – the Bragg lattice order (we will consider $m = 1$); Λ – period of refraction index changes.

As a result of periodical changes of refraction index the coupling between counter propagated forward and backward waves (with amplitudes $R(z)$ and $S(z)$ respectively) is appear for the radiation

$$R(z) = \frac{-\Gamma_1 e^{\gamma(z-L/2)} + \Gamma_2 e^{-\gamma(z-L/2)}}{\Gamma_2 e^{\gamma L} - \Gamma_1 e^{-\gamma L}} R(-L/2), \quad S(z) = \frac{-e^{\gamma(z-L/2)} + e^{-\gamma(z-L/2)}}{\Gamma_2 e^{\gamma L} - \Gamma_1 e^{-\gamma L}} j\chi R(-L/2) \quad (6)$$

where $\gamma = \sqrt{\chi^2 + (\alpha - j\delta\beta)^2}$; $\Gamma_1 = \gamma + \alpha - j\delta\beta$; $\Gamma_2 = -\gamma + \alpha - j\delta\beta$; α - damping (or amplification) coefficient (we assume $\alpha = 0$); $\delta\beta = 2\pi n_0(1/\lambda - 1/\lambda_0)$ and χ - coupling coefficient. At the case of harmonic approximation of spatial distribution of refraction index the coupling coefficient takes the form: $\chi = \pi \Delta n / \lambda$.

Obtained dependencies give the opportunity to analyse stationary spatial distribution of electric field in the system and spectral dependence of reflection (transmission) factors. The spectral dependencies of transmission factor on intensity $T = \left| \frac{R(L/2)}{R(-L/2)} \right|^2$ is shown in Fig.2 (curve 2).

Comparison of the numerical and analytical results

From the view of Fig.2 we see that both curves have the similar (not only phenomenological but quantitatively) behaviour, especially at the area of the main minimum, where the analytical formalism is correct. In this region we can mark the matches of amplitude and width, which are the main characteristics of the curve. So, for forecasting of the basic lobe parameter values of transmission factor curve it is possible to use simple analytical expressions, which allow to obtain the result very quickly. But for obtaining general information about main and secondary maximums we have to use numerical methods.

From the other side, we have to mark, that such complete matches, obtained here, connected only to the simplicity of analytically investigated structure (simple stack of isotropic layers infinite in two directions): for much complex systems analytical evaluations is in general impossible.

III. Conclusions

We discussed the advantages of usage numerical methods for investigation of light passing through periodically-inhomogeneous planar waveguide. From the other side, some problems don't give the opportunity of analytical (even approximate) solution, so the numerical method is

with $\lambda \approx \lambda_0$ (λ_0 - Bragg wavelength). This coupling can be described with the set of coupled waves equations, which solution has the form [1]:

single possible method of system properties investigation for 2-D and 3-D configuration.

We have to mark, that investigation of such isotropic nongyrotropic structure is the basic element of investigation of the behaviour of gyrotropic structure in external magnetic or electric field; so it is the way to the correct and full investigation of the tunable properties of the multilayered structures.

References

1. Akiba S., Utaka K. Dynamically unfrequent semiconductor lasers - Moscow: Mir, 1989 - 365 p.
2. Kuharkin E.S. Electrophysics of informational systems - Moscow: High School, 2001 - 287 p.
3. Barnoski M. Introduction to Integrated Optics - New York: Plenum Press, 1974 - 466 p.
4. Herman M.A. Semiconductor superlattices - Berlin: Akademie-Verlag, 1986 - 337 p.
5. Бритун Н.В., Данилов В.В. Электронное управление параметрами структур с фотонной запрещенной зоной // Письма в ЖТФ. - 2003. - 29, № 7- с.27-32.
6. Makarov D.G., Danilov V.V., Kovalenko V.F. Light transmission through the band gap of bigyrotropic structures // Physica Status Solidi (a). - 2004. - №201. - P. 130-138.
7. Makarov D.G., Danilov V.V., Kovalenko V.F. Controlled by magnetic field ferrimagnetic laser based on multilayered two-componental structure // Bulletin of Univ. of Kiev Series: Radiophys. & Electr. - 2004. - №4. - P.245-249.
8. Yee K.S. Numerical solutions of initial boundary value problems involving Maxwell's equation in isotropic media // IEEE Trans. Antennas and Prop. - 1966. - AP-14. - P. 302-307.

Надійшла до редколегії 25.05.2007

УДК 535.3:538.221

Гайдай* Ю.О., канд. фіз.-мат. наук, доц.,
Ковторов А.М., студ., Сидоренко В.С., канд.
фіз.-мат. наук, с.н.с., Сирота А.В., інженер,
Ляшенко О.С., студент

Невзаємний фазовий зсув для ТМ-мод у плівках ферит-гранатів

Наведено результати теоретичного аналізу невзаємного фазового зсуву для ТМ-оптичних мод у магнітному планарному хвилеводі. Визначено параметри магнітного хвилеводу, за яких фазовий зсув буде максимальним.

Ключові слова: невзаємний фазовий зсув, магнітний планарний хвилевід, ТМ-оптична мода.

*E-mail: gayday@mail.univ.kiev.ua

Однією з важливих проблем сучасних оптичних інформаційних систем є створення невзаємного оптичного елемента в хвилеводному виконанні. Її вирішення дозволить поліпшити характеристики невзаємних оптичних пристроїв, таких як ізолятори та циркулятори, що є невід'ємними складовими волоконних ліній зв'язку. На сьогодні такі пристрої виготовляють лише в мікрооптичному виконанні.

Однією з можливих технологій створення хвилеводного невзаємного оптичного елемента є використання невзаємного фазового зсуву оптичних хвилеводних мод, що розповсюджуються в намагнічених плівках феритів-гранатів (ФГ). Використання ФГ обумовлене наявністю в останніх невзаємних властивостей (ефект Фарадея) та низькими оптичними втратами в ближньому інфрачервоному діапазоні. Невзаємний фазовий зсув – явище, яке полягає в залежності сталої поширення β_z хвилеводної моди від напрямку поширення. Дійсно, якщо стала поширення в одному напрямку $\beta_z^{(+)}$, а в протилежному – $\beta_z^{(-)}$, то при проходженні моди вперед-назад виникає додатковий набіг фази $\Delta\varphi = (\beta_z^{(+)} - \beta_z^{(-)})l$, де l – довжина хвилеводу. Величину невзаємного фазового зсуву будемо характеризувати безрозмірним параметром:

$$\Delta N_{ef} = N_{ef}^{(+)} - N_{ef}^{(-)} = (\beta_z^{(+)} - \beta_z^{(-)})/k_0, \quad (1)$$

де $N_{ef} = \beta_z/k_0$ – ефективний показник заломлення, $k_0 = \omega/c$.

Yu.O. Gayday*, associate professor, A.M. Kovtorov, student, V.S. Sidorenko, Ph.D., A.V. Syrota, engineer, Liashenko O.S., student

Nonreciprocal TM mode phase shift in ferrite-garnet films

The results of the theoretical analysis of nonreciprocal TM optical mode phase shift in a magnetic planar waveguide are presented.

The parameters of a magnetic waveguide, at which the phase shift will be maximum are defined.

Key Words: nonreciprocal phase shift, planar magnetic waveguide, TM optical mode.

Головною проблемою, яку слід розв'язати для створення невзаємного оптичного елемента є розробка хвилеводу, що забезпечить, з одного боку, достатні невзаємні властивості при невеликій довжині магнітного хвилеводу (оскільки при збільшенні довжини зростають втрати і втрачається мініатюрність), а з іншого боку – матиме порівняно просту конструкцію, що забезпечить його масове і дешеве виготовлення. Незважаючи на численні дослідження [1], її ще не вирішено.

В статті наводяться результати теоретичного дослідження невзаємного фазового зсуву для ТМ-мод в оптичному планарному хвилеводі та визначаються параметри хвилеводу, при яких фазовий зсув буде максимальним. Раніше подібне дослідження проводилося лише частково [2].

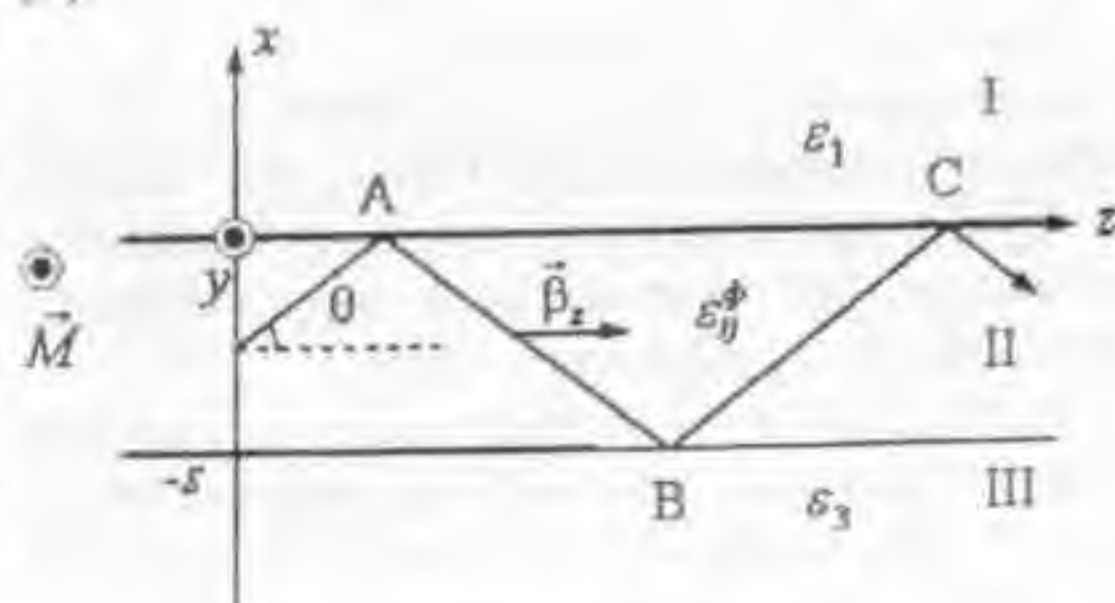


Рис. 1. Планарний оптичний хвилевід з хвилеводним шаром з ферит-гранату.

Розглянемо найпростішу хвилеводну структуру – тришаровий оптичний планарний хвилевід (рис. 1), що вважається необмеженим

вздовж осі y . Він складається з покрівельного шару I, підкладинки III, що є ізотропними прозорими діелектриками з діелектричними проникностями ε_1 та ε_3 відповідно. Хвильоводний шар II є плівкою кубічного ферит-гранату (ФГ) товщиною s . Він однорідно намагнічений вздовж осі y , оскільки саме при такому намагнічуванні спостерігається невзаємний фазовий зсув для ТМ-мод. Тензор діелектричної проникності плівки ФГ, вирощеної в площині $\langle 100 \rangle$, у системі координат пов'язаній з головними кристалографічними осями, має вигляд (без урахування втрат) [3]:

$$\varepsilon_{ij}^{\phi} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & \varepsilon_{xz}^* \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ \varepsilon_{xz} & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

де $\varepsilon_{xx} = i\xi$, $\xi = \alpha_0 M_0$, α_0 – лінійний магнітооптичний коефіцієнт, $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = n_0^2$ – діелектрична проникність ФГ за відсутності намагніченості; а n_0 – відповідно показник заломлення ФГ, M_0 – намагніченість. Причому вважаємо, що $n_1 \leq n_3 < n_0$, тобто реалізується хвильоводний режим.

Розв'язок системи рівнянь Максвелла

$$\text{rot} \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad \text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad \vec{D} = \hat{\varepsilon} \vec{E}, \quad (3)$$

де $\hat{\varepsilon}$ – тензор діелектричної проникності; для хвильоводних ТМ-мод

$$\begin{aligned} \vec{E}(x, z, t) &= \sum_m \vec{E}_m(x) \exp(i(\omega t - \beta_{z,m} z)), \\ \vec{H}(x, z, t) &= \sum_m \vec{H}_m(x) \exp(i(\omega t - \beta_{z,m} z)), \end{aligned} \quad (4)$$

де $m = 0, 1, 2 \dots$ – номер моди, дозволяє вирішити задачу про поширення m -тої ТМ-моди у хвильоводі [4]. Однак, тут можна застосувати променеву модель поширення світла хвильоводом, що яскраво демонструє природу явища невзаємного фазового зсуву.

Відповідно до променевої моделі хвильоводна мода утворюється плоскою монохроматичною хвилею, яка поширюється у хвильоводному шарі зигзагоподібно, зазнаючи повного внутрішнього відбиття від покрівельного шару та підкладинки (див. рис.1). Суттєво, що при хвильоводному розповсюдженні променя, стала поширення β_z (або кут θ) не може набувати будь-які неперервні значення, а тільки такі (дискретні), які призводять до утворення картини

самоузгодженого розподілу поля, що відповідає певній хвильоводній моді. Просумувавши всі зміни фази, що мають місце під час руху хвилі $\exp[i(\omega t - \beta_x x - \beta_z z)]$ від точки А до точки В і далі, при русі відбитої хвилі до точки С, тобто до вихідної ситуації, і врахувавши, що для утворення самоузгодженого розподілу поля необхідно, щоб поле в точці С було таким, як і в точці А, тобто сумарна зміна фази повинна бути кратною 2π , одержимо умову поширення ТМ-моди у хвильоводі:

$$2\beta_z s - \varphi_1^{\text{TM}} - \varphi_3^{\text{TM}} = 2\pi m, \quad (5)$$

де $\beta_z = \sqrt{\beta_x^2 - n_0^2 k_0^2}$ – поперечна компонента хвильового вектора, φ_1^{TM} та φ_3^{TM} – набіги фази, які одержує хвиля при відбитті у точках А та В відповідно.

Величини φ_1^{TM} та φ_3^{TM} одержуємо з аналізу повного внутрішнього відбиття плоскої монохроматичної хвилі від плоскої межі ферит-гранат – однорідний діелектрик:

$$\begin{aligned} \varphi_1^{\text{TM}} &= 2 \cdot \arctg\left(\frac{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_1} \sqrt{\beta_z^2 - k_0^2 \varepsilon_1} + \chi \beta_z}{\sqrt{k_0^2 \varepsilon_0 - \beta_z^2}}\right), \\ \varphi_3^{\text{TM}} &= 2 \cdot \arctg\left(\frac{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_3} \sqrt{\beta_z^2 - k_0^2 \varepsilon_3} - \chi \beta_z}{\sqrt{k_0^2 \varepsilon_0 - \beta_z^2}}\right), \end{aligned} \quad (6)$$

де $\chi = \xi/n_0^2$.

Як видно, набіги фази є невзаємними, тобто залежать від напрямку поширення хвилі і напрямку намагніченості. Саме ця невзаємність і призводить до явища невзаємного фазового зсуву для ТМ-мод. З рівняння (5) видно, що величина невзаємного фазового зсуву є тим більшою, чим більше змінюватиметься сумарний набіг фази $\varphi_1^{\text{TM}} + \varphi_3^{\text{TM}}$ при зміні напрямку поширення хвилі.

Підставляючи (6) до (5), остаточно одержуємо дисперсійне рівняння, яке описує поширення m -тої ТМ-моди:

$$\begin{aligned} &\frac{n_0^2}{2} \sqrt{N_{\text{ef},m}^2 - n_1^2} + \chi N_{\text{ef},m} \\ &\arctg\left(\frac{\frac{n_0^2}{2} \sqrt{N_{\text{ef},m}^2 - n_1^2} + \chi N_{\text{ef},m}}{\sqrt{n_0^2 - N_{\text{ef},m}^2}}\right) + \\ &\frac{n_0^2}{2} \sqrt{N_{\text{ef},m}^2 - n_3^2} - \chi N_{\text{ef},m} \\ &+ \arctg\left(\frac{\frac{n_0^2}{2} \sqrt{N_{\text{ef},m}^2 - n_3^2} - \chi N_{\text{ef},m}}{\sqrt{n_0^2 - N_{\text{ef},m}^2}}\right) - \end{aligned}$$

$$-k_0 s \sqrt{n_0^2 - N_{ef,m}^2} + m\pi = 0, \quad (7)$$

де $N_{ef,m} = \beta_{ef,m}/k_0$ - ефективний показник заломлення для m -тої ТМ-моди, $n_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$, $n_3 = \sqrt{\varepsilon_3}$ - показники заломлення покрівельного шару та підкладинки відповідно.

Оскільки дисперсійне рівняння (7) містить лінійні по N_{ef} доданки, то розв'язок буде залежати від напрямку поширення світла, тобто присутнє явище невзаємного фазового зсуву. Також N_{ef} залежить від величини та знаку ξ (фактично намагніченості). Зміна напрямку намагніченості еквівалентна зміні напрямку поширення. У випадку симетричного хвильоводу $n_1 = n_3$ невзаємний фазовий зсув відсутній.

Далі наведемо результати аналізу залежностей величини невзаємного фазового зсуву ΔN_{ef} (1) від параметрів хвильоводу: $k_0 s$, ξ , n_0 , n_1 , n_3 та m . Зокрема, цікавили такі значення цих параметрів, при яких реалізується максимальний невзаємний фазовий зсув, тобто розглядалася задача оптимізації хвильоводу. Аналіз здійснювався методом чисельного розв'язання рівняння (7) при різних значеннях параметрів.

Параметр $\xi = \alpha_0 M_0$ характеризує магнітооптичні властивості ФГ і лінійно пов'язаний з його питомим фарадеевським обертанням:

$$\Theta_F = \frac{k_0 \xi}{2\sqrt{\varepsilon_0}}. \quad (8)$$

Для типових матеріалів магнітооптики величина ξ в ближньому інфрачервоному діапазоні не перевищує за модулем 10^{-2} . В даних межах ΔN_{ef} лінійно залежить від ξ . При $\xi = 0$ (намагніченість відсутня) невзаємний фазовий зсув відсутній. Тому для збільшення фазового зсуву бажано вибирати для хвильоводного шару матеріал з найбільшим питомим фарадеевським обертанням. Це дозволяє значно зменшити довжину хвильоводу. У подальшому під невзаємним фазовим зсувом будемо розуміти величину $\Delta N_{ef}/\xi$, яка вже не залежить від ξ .

Добуток $k_0 s$ входить до рівняння (5) як один параметр. Типова залежність невзаємного фазового зсуву від $k_0 s$ для кількох перших ТМ-мод зображена на рис.2. Добре видно, що невзаємний фазовий зсув значний лише для перших мод і зменшується із зростанням номеру моди. Тобто, це типово хвильовдне явище. Найбільш перспективним є використання одномодового режиму хвильоводу. Також для кожної моди існує оптимальне значення $(k_0 s)_{opt}$

при якому реалізується найбільша (оптимальна) величина невзаємного фазового зсуву $(\Delta N_{ef}/\xi)_{opt}$. Реалізувати оптимальний режим можна вибором оптимальної товщини плівки.

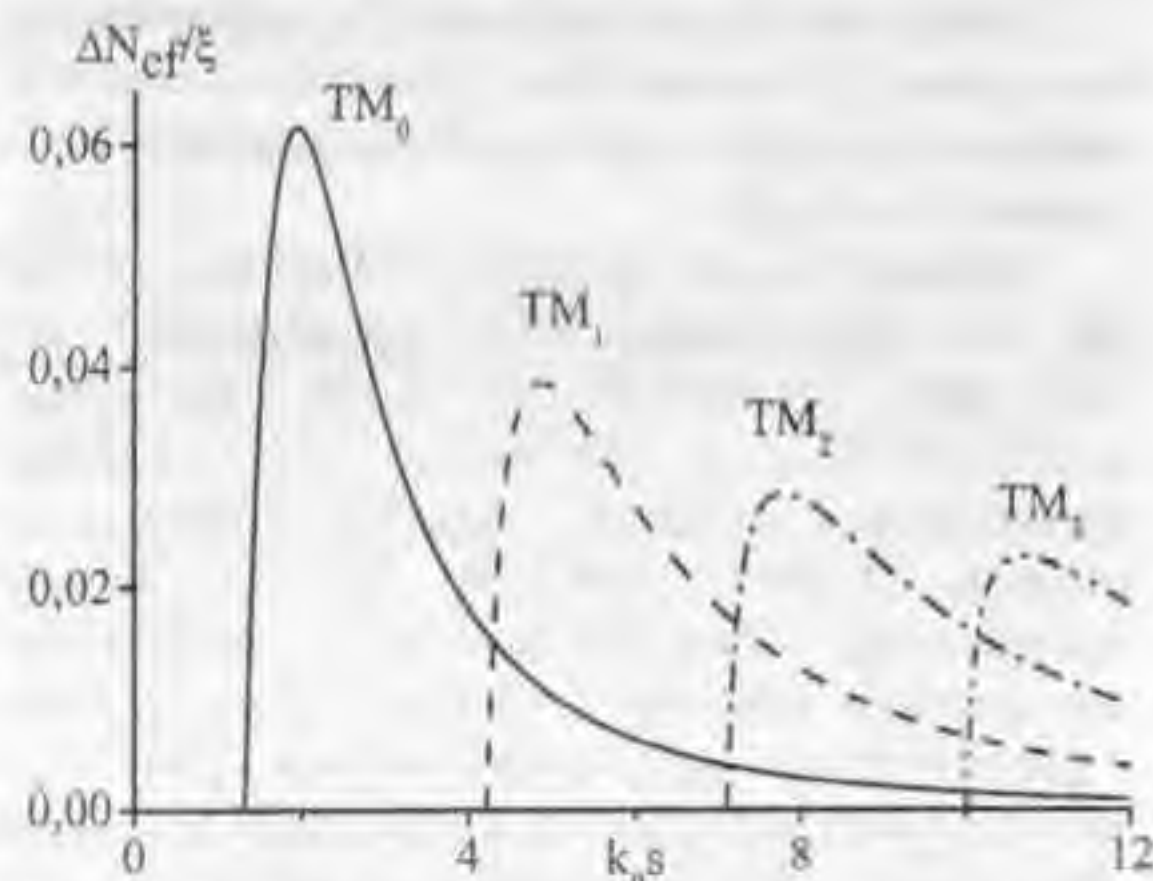


Рис. 2. Залежність невзаємного фазового зсуву від $k_0 s$ для кількох перших ТМ-мод плівки ЗПГ: $n_1 = 1.0$; $n_0 = 2.228$; $n_3 = 1.945$.

Далі було досліджено залежність оптимального фазового зсуву від показників заломлення хвильоводу. Виявилось, що фазовий зсув значний для асиметричних хвильоводів, а саме, коли $n_1 = 1.0$. Сімейство кривих, що відображає залежності $(\Delta N_{ef}/\xi)_{opt}$ від n_3 для різних n_0 , зображено на рис.3. Для слабконаправляючих хвильоводів (коли $(n_0 - n_3) \ll n_0, n_3$) фазовий зсув малий. Також він стає малим, коли хвильовід наближається до симетричного ($n_1 = n_3$). Для даного номеру моди існує набір значень показників заломлення, при якому оптимальний фазовий зсув стає максимальним (відповідна крива зображена на рис.3 суцільною лінією).

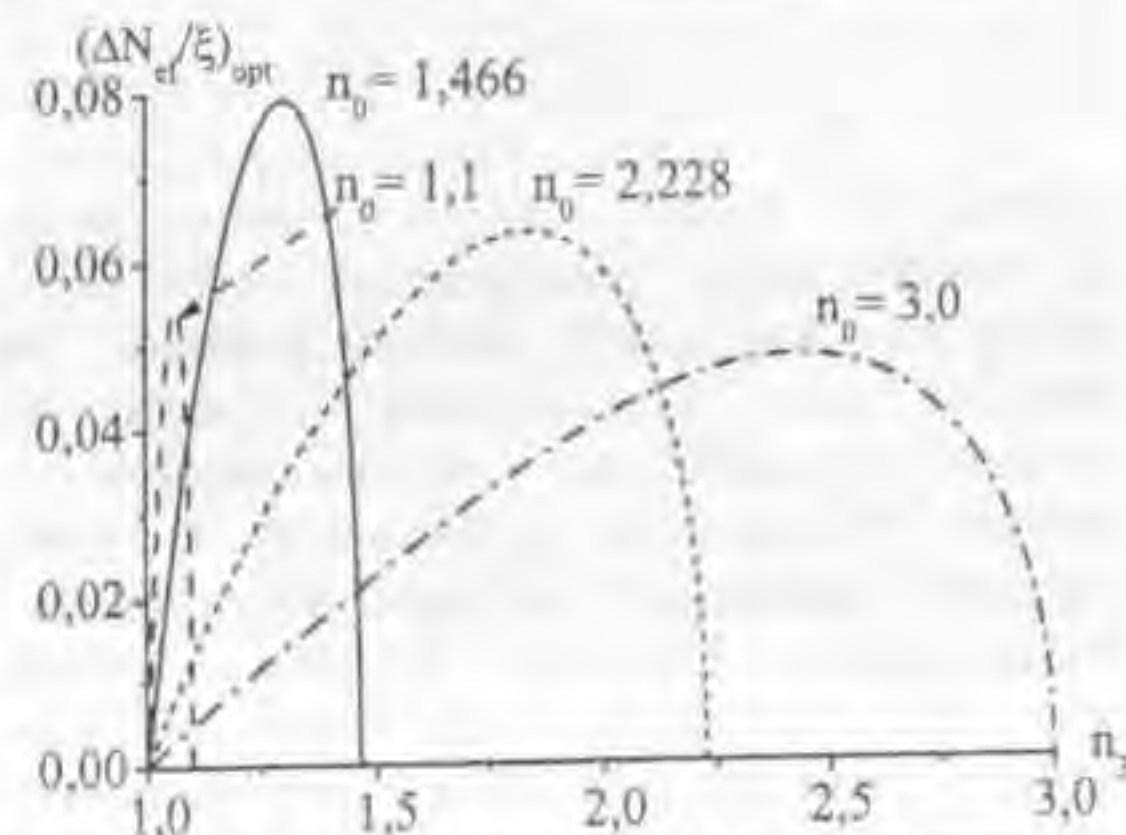


Рис.3. Залежності $(\Delta N_{ef}/\xi)_{opt}$ від n_3 для різних значень n_0 . Крива, намальована суцільною лінією, відповідає значенню n_0 , при якому реалізується максимальне значення невзаємного фазового зсуву.

Для нульової ТМ-моди оптимальні параметри набувають наступні значення:

$n_1 = 1.0$; $n_0 = 1.466$; $n_2 = 1.3$; $(k_0 s)_{opt} = 2.763$; $(\Delta N_{eff}/\xi)_{opt} = 0.0794$.

Вибір матеріалів хвилеводу з параметрами, близькими до оптимальних, дозволить збільшити величину фазового зсуву, а, отже, зменшити його довжину та втрати.

Наприклад, для нульової ТМ-моди у плівці ЗІГ на підкладинці ГТГ намагніченій до насичення : $n_1 = 1.0$, $n_0 = 2.228$, $n_2 = 1.945$, $\alpha_0 = 2.72 \cdot 10^{-6} \text{ Гс}^{-1}$, $M_0 = 140 \text{ Гс}$, $\lambda = 1.1528 \text{ мкм}$ оптимальна товщина $s_{opt} = 0.355 \text{ мкм}$, а $(\Delta N_{eff}/\xi)_{opt} = 0.0617$, що на 22 % менше оптимального. Фазовий зсув на π реалізується при довжині хвилеводу $l = 2.454 \text{ см}$. Така довжина є неприйнятною через значні втрати. Тому слід застосовувати матеріал з більшим фарадєївським обертанням або конструкції хвилеводів, що забезпечують більшу величину фазового зсуву.

Розглянемо два можливі експериментальні методи, що дозволяють виміряти величину невзаємного фазового зсуву. В першому для вимірювань використовується інтерферометр Маха-Цендера [2]. Одне з плечей інтерферометра містить намагнічену феритову плівку, в якій розповсюджується ТМ оптична хвилеводна мода. Друге плече інтерферометра є опорним. На виході інтерферометра промінь, що вийшов з намагніченого хвилеводу суміщається з когерентним опорним променем, і на екрані спостерігаються інтерференційні смуги. За зміщенням смуг при намагнічуванні хвилеводу визначається невзаємний набіг фази для хвилеводної моди, що досліджується:

$$\Delta\varphi = \frac{\Delta X}{|X_1 - X_2|} \pi, \quad (9)$$

де $|X_1 - X_2|$ – відстань між темною та світлою смугами, ΔX – зміщення інтерференційної смуги.

Інший метод вимірювання полягає у визначенні поляризації випромінювання, що пройшло крізь намагнічений хвилевід [5]. Лінійно поляризоване випромінювання з азимутом θ , уводиться до хвилеводу. В такому випадку в хвилеводі одночасно збуджуються і поширюються ТМ- та ТЕ-моди. Вихідне випромінювання буде поляризоване еліптично, причому величина осей еліпсу визначатиметься

різницею набігу фази для ТМ- та ТЕ-моди. Наприклад, для випадку $\theta = 45^\circ$;

$$a^2 = (1 + \cos \delta) E^2, \quad b^2 = (1 - \cos \delta) E^2, \quad (10)$$

де a, b – осі еліпсу поляризації, E – амплітуда електричного поля для ТМ- та ТЕ-мод, δ – різниця набігу фази для ТМ- та ТЕ-мод.

За зміною δ при намагнічуванні хвилеводу визначається величина невзаємного фазового зсуву для ТМ-моди. Розглянуті методи дозволяють експериментально перевірити результати теоретичного аналізу.

Таким чином, теоретично визначено набір параметрів магнітного планарного хвилеводу (товщина, діелектричні проникності підкладинки, хвилеводного та покрівельного шарів, питоме фарадєєвське обертання феритового шару), за яких реалізується максимальна величина невзаємного фазового зсуву ТМ оптичних мод.

Список використаних джерел

1. Dötsch H., Bahlmann N., Zhuromskyy O., Hammer M. et al. Applications of magneto-optical waveguides in integrated optics: review // Journal of the Optical Society of America B. – 2005. – 22, №1. – P. 240-253.
2. Mizumoto T., Naito Y. Nonreciprocal propagation characteristics of YIG thin film // IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques. – 1982. – 60, № 6. – P. 922-925.
3. Прохоров А.М., Смоленский Г.А., Агеев А.Н. Оптические явления в тонкопленочных магнитных волноводах и их техническое использование // Успехи физических наук. – 1984. – 143, №1. – С. 33-72.
4. Соломко А.А., Гайдай Ю.А., Довженко А.В. и др. Свойства и особенности взаимодействия мод в тонкопленочных ферритовых волноводах // Квантовая электроника. – 1990. – вып.39. – С. 65-78.
5. Okamura Y., Inuzuka H. et al. Nonreciprocal propagation in magneto-optic YIG rib waveguides // Journal of Lightwave Technology. – 1986. – 4, №7. – P.711-714.

Надійшла до редколегії 24.05.07

УДК 621.315.592

Жарких Ю.С., д. ф.-м. н., проф., Лисоченко* С.В., к. ф.-м. н., ст. наук. співр., Третяк О.В., д. ф.-м. н., проф., академік АПН України

Формування плівок аерогелю кремнезему на поверхні кремнію

Запропоновано новий метод формування тонких заряджених діелектричних плівок аерогелю кремнезему на поверхні кремнію. Проведені дослідження складу і зарядового стану таких плівок. Зроблені оцінки товщини і ступеню поруватості синтезованих плівок. Показана можливість застосування таких плівок в напівпровідниковій мікроелектроніці, зокрема для створення сонячних елементів і сенсорів.

Ключові слова: аергель кремнезему, динамічний конденсатор, структури напівпровідник-діелектрик.

*E-mail: lys@univ.kiev.ua

1. Вступ

Аергель кремнезему завдяки своїм видатним властивостям, а саме тепло і електроізоляційним властивостям, легкості і поруватості знаходять все більше застосувань і може бути одним з перспективних матеріалів сучасних технологій [1,6]. Можна очікувати, що такий матеріал знайде застосування в мікроелектронних технологіях, де плівки кремнезему в неаергельній структурній формі вже давно і широко застосовуються. В поданій роботі запропоновано простий спосіб синтезу заряджених плівок аерогелю на поверхні кремнію в одному технологічному циклі. На відміну від існуючих способів [1,6] формування плівок проходить з використанням матеріалу підкладки таким чином, що утворюється типова для мікроелектронних структур система діелектрик-напівпровідник.

2. Експериментальні зразки і методи досліджень

Синтез діелектричних плівок кремнезему на поверхні кремнію в структурному стані аерогелю проводився на монокристалічних пластинах кремнію з питомою провідністю 4,5 Ом·см. Поверхня пластини була орієнтована в кристалографічній площині (100). Пластини

Zharkikh Y. S., dr. sci., prof., Lysochenko* S. V., ph. d., s. s. w., Tretyak O. V., dr. sci., prof., academician APS of Ukraine.

Silica aerogel films formation on silicon surfaces

A new technique of formation of thin charged silica aerogel films upon a Si surface is suggested. Degree of porosity of the synthesized films is estimated. Their composition and charge state of the dielectric-semiconductor system are studied. Possibility is shown of using such films in the semiconductor microelectronics, in particular, for creation of sensors and solar cells.

Key Words: silica aerogel, dynamic capacitor method, dielectric-semiconductor structures.

проходили стандартну хімічну обробку, що застосовується при виробництві інтегральних схем перед операцією термічного окислення. Надалі пластини розміщувались на столику центрифуги і вмикалось обертання зі швидкістю (3000-3500) обертів на хвилину. Дозатором на поверхню пластини подавали розчин КОН з мольною концентрацією $M=(10^{-5}-10^0)$. Об'єм розчину підбирався таким чином, щоб виключити його стікання з пластини при обертанні. В усіх дослідах він був постійним і дорівнював одному мілілітру. Обертання пластини проводилось до повного висушування розчину, на час, що не перевищував 2-3 хвилини.

Одержані плівки мали двошарову структуру. Залишки КОН і силікату калію, що утворювався в процесі реакції, разом утворювали верхній шар, що легко змивався при промивках в деіонізованій воді. На поверхні пластини, що слугувала матрицею, залишалась стійка плівка. При зберіганні в лабораторних умовах вони не змінювали своїх характеристик на протязі року, а також при повторних промивках в деіонізованій воді і висушуванні при температурі -100°C .

Утворення таких плівок на пластинах кремнію без проведення операції центрифугування, а також при простому зануренні пластин в розчин КОН не спостерігалось.

Склад плівок досліджувався методами Оже-спектрометрії і лазерної мас-спектроскопії. Першим методом визначались характеристики тонкого поверхневого шару, товщиною $\sim 1\text{nm}$ і показали наявність зв'язків SiO_2 . У лазерному мас-спектрометрі товщина шару речовини, що випаровувалась лазером і вивчалась складала $\sim 1000\text{nm}$. Сполуки і домішки, нехарактерні для системи Si-SiO_2 , двома вищезгаданими методами досліджень виявлені не були.

При притисканні до поверхні плівки індієвого зонду і подачі постійної напруги та високочастотного тестуючого сигналу вимірювався імпеданс плівок. Отримані залежності мали типовий вид високочастотних C-V характеристик структур метал-напівпровідник-діелектрик. Це свідчило, що сформовані плівки являються діелектричними. Їх пробивна напруга залежала від концентрації розчину лугу.

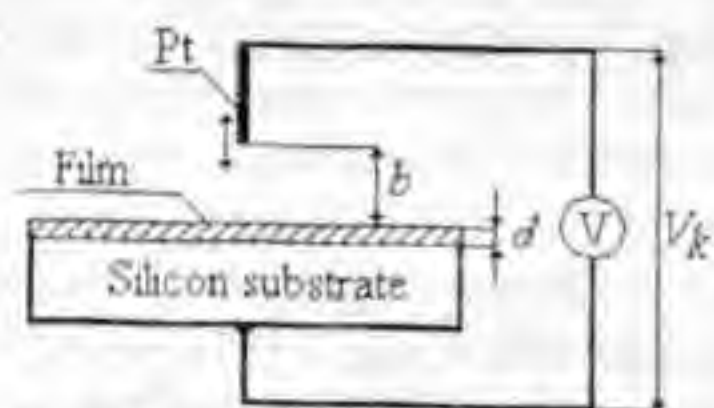


Рис. 1. Схема вимірювань за методом динамічного конденсатора.

Зарядовий стан структури діелектрик-напівпровідник досліджувався методом динамічного конденсатора [4-5]. Для цього вимірювалась напруга V_k , що виникає між віброуючим пробним електродом і напівпровідниковою пластиною (рис. 1). На відстані $b=0,1\text{mm}$ від досліджуваного напівпровідника розміщується платиновий електрод діаметром $0,5\text{mm}$. Електрод приводиться в зворотно-поступальний рух у напрямку нормальному поверхні напівпровідника і разом вони утворюють динамічний конденсатор. Змінна напруга $V_k \neq 0$ на обкладках динамічного конденсатора виникає у випадках наявності різниці термоелектронних робіт виходу між матеріалом пробного електроду і напівпровідником, а також при наявності заряду Q_d , вбудованого в діелектричну плівку, що знаходиться на поверхні напівпровідника. Вимірювання V_k проводились в темноті і при освітленні, що дозволяло відокремити вплив зарядів в діелектрику і напівпровіднику на величину V_k . Для освітлення зразка в точці вимірювання застосовувався лазер з довжиною хвилі $\lambda=0,63\text{mkm}$.

Вимірювання V_k проводились в 200 точках поверхні кожної пластини, а результати усереднювались. Розкид вимірюваних значень V_k становив приблизно (5-10)% як в межах однієї пластини, так і для кожної партії, що складалась з 4 пластин. Аналогічні виміри проводились також у вакуумі при тиску $P=0,133\text{Па}$. Результати вимірювань V_k у вакуумі були аналогічними до тих, що були одержані на повітрі.

Для визначення товщини плівки d проводились дослідження на промислову еліпсометрі з лазерним джерелом світла з $\lambda=0,63\text{mkm}$. Спочатку визначались оптичні характеристики кремнію, а потім товщина плівки d . Зв'язок між зміною фази променя δ (в градусах), що викликане проходженням світла світла через плівку дається формулою $d=\delta\lambda/360(\epsilon-\text{Sin}^2\varphi)^{1/2}$, де φ – кут падіння променя [2].

Зазначимо, що наведені дослідження проводились і з використанням розчину NaOH . Їх результати були аналогічними до отриманих при використанні лугу KOH .

3. Результати і їх обговорення

Типові результати вимірювань напруги V_k в залежності від концентрації розчину M , що застосовувався при формуванні плівки, наведені на рис. 2. В темноті $V_k=V_{kd}$ – величині, що характеризує зарядовий стан системи в рівновазі (крива 1). При достатньо інтенсивному освітленні зразка, зони на поверхні напівпровідника спрямляються, а провідність приповерхневого шару кремнію наближається до металічної. В цьому випадку $V_k=V_{kl}$ – напрузі вимірюваній між пробним електродом і кремнієм за умови, коли приповерхневий вигин зон φ_s і ширина області просторового заряду l дорівнюють нулю (крива 2). Крива 3 рис. 2 розрахована по формулі $V_{kl}=V_{kd}-V_{kl}$ є величиною рівною φ_s . При освітленні $\varphi_s \approx 0$, а значення $V_k=V_{kl}$ що даються кривою 3 є величиною поверхневої фотоелектрорушійної сили.

На залежностях $V_k(M)$ рис. 2 спостерігається два виражених відрізки. Перший, це полиця в інтервалі $M=(0-10^{-4})$. На ньому величина $V_{kl}(M)=V_{kd}-V_{kl} \approx 0$ (крива 3) і тому вигин зон $\varphi_s \approx 0$. На другому відрізку, при $M > 10^{-3}$, величини V_{kd} і V_{kl} починають змінюватися в сторону від'ємних значень, а абсолютна величина $V_{kl}(M)=V_{kd}-V_{kl}$ різко зростати. Це є свідченням швидкого зростання φ_s (вигин зон вниз), що можуть відбуватися тільки внаслідок зростання заряду Q_d , вбудованого в діелектричну плівку. Його

величина починає значно переважати заряд в поверхневих станах на межі поділу плівка-підкладина, а знак є позитивним. Таким чином залежності $V_k(M)$ рис. 2 відображають зміни величини Q_d при зростанні концентрації розчину M . Причиною цього є вбудовування іонів K^+ в об'єм плівки при її формуванні в розчині КОН.

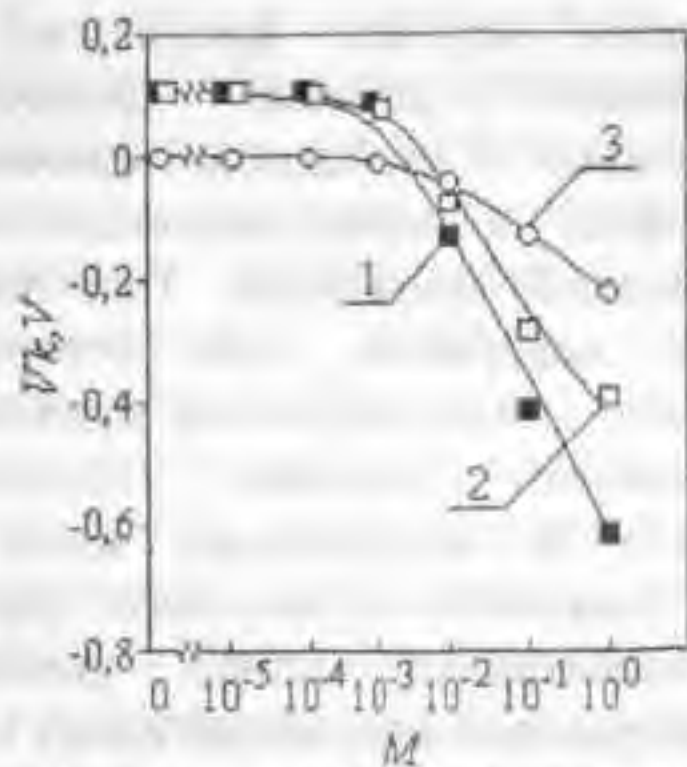


Рис. 2. Залежності $V_k(M)$. Криві 1 (■) і 2 (□) відповідають $V_k=V_{kl}$ і $V_k=V_{kf}$ відповідно. Крива 3 (○) відповідає $V_{kf}=V_{kl}$.

Залежності $V_{kl}(M)$ і $V_{kf}(M)$ могли змінювати своє положення відносно осі ординат для різних партій пластин. Причиною цього були неконтрольовані зміни концентрації легуючої домішки бору в кремнії. Форма кривих при цьому змінювалась мало, а їх початок при $M=0$ лежав в області значень $V_k=\pm 0,2V$.

Дані отримані при вимірюваннях товщини плівки на еліпсометрі показані на рис. 3. кривою 1. Оскільки величина діелектричної проникності плівки була невідома, то при визначенні товщини d приймалось значення $\epsilon=4$, тобто таке, що характеризує термічно вирошений SiO_2 . Порівнюючи криву 1 рис. 3 з кривою 1 рис. 2 можна бачити, що як товщина плівки, так і заряд в ній зростають приблизно за одним і тим самим законом зі зростанням M . Вважаючи розподіл іонів K^+ по товщині плівки рівномірним можна провести оцінку товщини плівки на основі експериментальних даних одержаних методом віброуючого конденсатора. Знаючи V_{kl} і $V_{kf}=V_{kl}$ можна розрахувати ємність C_{sc} і заряд Q_{sc} області просторового заряду. Нехтуючи зарядом в поверхневих станах, в порівнянні з вбудованим в плівку, можна вважати $Q_{sc} \approx Q_d$ і оцінити товщину діелектричної плівки за формулою для плоского конденсатора з врахуванням тієї обставини, що заряд Q_d є рівномірно розподіленим по товщині плівки. За найменшу

відстань, на яку іони K^+ віддалені від межі поділу плівка-кремній, в розрахунку приймалась постійна градки кремнезему.

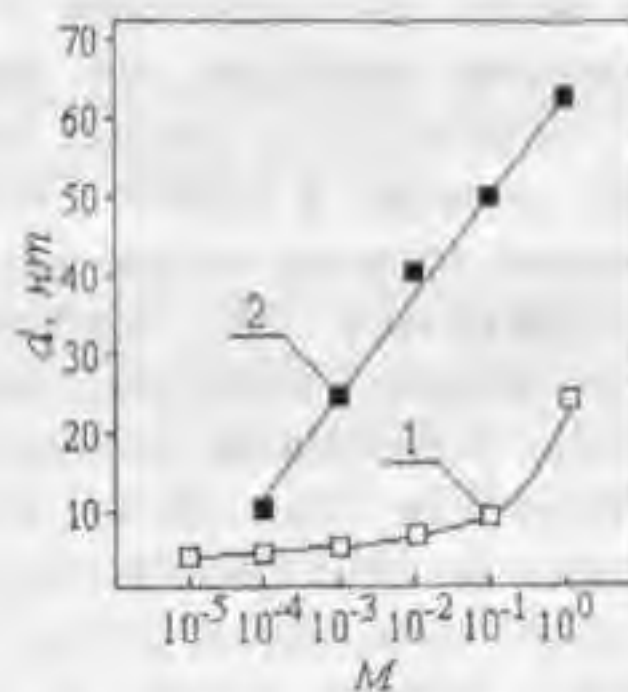


Рис. 3. Залежність товщини плівки кремнезему d від концентрації розчину M . Крива 1 (■) отримана при вимірюваннях на еліпсометрі, а крива 2 (□) розрахована по даним рис.1.

Результат розрахунку величини $d(M)$ представлений на рис. 3 кривою 2. На відрізку, що відповідає $M=(10^{-4}-10^0)$ така залежність приблизно описується емпіричною формулою $d=klgM$, де k - коефіцієнт пропорційності. З порівняння кривих 1 і 2 видно, що товщина плівки d отримана при вимірюваннях $V_k(M)$ приблизно в 3-6 раз перевищує значення отримані при еліпсометричних дослідженнях за одних і тих самих значень ϵ . Оскільки при розрахунках товщини плівки за формулою плоского конденсатора $d=\epsilon$, а при вимірюваннях на еліпсометрі $d=1/(\epsilon \sin^2 \phi)^{1/2}$, то пояснити таку відмінність можна тільки порушенням плівки і відмінністю ефективної величини діелектричної проникності ϵ_{eff} від прийнятої в розрахунках. Підбором величини ϵ можна досягти приблизного співпадання залежностей $d(M)$ по рис. 3 на частині дослідженого інтервалу концентрації M за величини $\epsilon_{eff} \approx 1,5$. У випадку наявності пор ефективна діелектрична проникність ϵ_{eff} поруваного матеріалу може бути визначена за формулою Ліхтенекера для двокомпонентних діелектриків. В разі, коли напрямок електричного поля є нормальним до напрямку в якому розташовані пори $1/\epsilon_{eff}=(1-\alpha)/\epsilon_1+\alpha/\epsilon_2$, де α - об'ємна концентрація пор, ϵ_1 і ϵ_2 відповідно діелектричні проникності твердого матеріалу і пор. Приймавши $\epsilon_2=1$ (пори заповнені повітрям) і $\epsilon_1=4$, одержимо $\alpha \approx 0,5$. Разом це дозволяє зробити висновок, що структура досліджуваних плівок є поруватою і наближеною до структури аерогелю.

На наш погляд найбільш ймовірним механізмом утворення плівок кремнезему в структурному стані аерогелю на поверхні пластини кремнію є механізм епітаксiально-деструктивного росту [3]. Кремнезем і його гідратовані молекули, необхідні для синтезу мокрого гелю, утворюються в процесі відомої реакції взаємодії кремнію з водою. Спочатку проходить окислення кремнію киснем води, яка каталітично розкладається при взаємодії з кремнієм і надалі кремнезем взаємодіє з водою з утворенням гідратів. Гідролітична полімеризація цих сполук з утворенням силосанових зв'язків призводить до появи молекул гідратів з більшою молекулярною вагою нитковидної форми різної довжини. Структура розчину набуває колоїдної будови. В подальшому міцели колоїдного розчину утворюють хімічні зв'язки між собою, внаслідок чого змінюється структура розчину і він загусає. Поява силосанових зв'язків стимулюється калієм, позитивно заряджені іони яких втримують кисень і виступають деструкторами силанольних і відповідно промоутерами силосанових зв'язків. Відбувається полімеризація гідратів і утворюється гель кремнезему. Процес відбувається при кімнатній температурі з виділенням енергії в процесі хімічних реакцій. Структура утвореного гелю і ступінь його поруватості обумовлюється елементарними острівними тетраедрами $[\text{SiO}_4]^{4-}$ і їх складними просторовими утвореннями, а також залежить від енергетичного стану поверхні зразка кремнію, її складу і умов проведення реакції. Пори просторової структури гелю заповнені водою, а також адсорбованими позитивними іонами калію. Частина гідратів кремнезему взаємодіє з цими іонами і утворює силікат K_2SiO_3 , який добре розчиняється у воді і дифузійний масообмін якого в розчині є значно полегшеним. Ця реакція сприяє збільшенню поруватості зростаючої плівки гелю, а силікат надалі відтісняється на поверхню плівки гелю.

Обертання зразка призводить до утворення тонкого шару розчину лугу насиченого продуктами хімічних реакцій і стимулює хід названих процесів. Пришвиджуються реакції полімеризації міцел і створення просторової структури гелю, внаслідок зменшення можливості дифузійного масообміну гідратів з об'ємом розчину. Інтенсивна дегідратація гелю і перетворення його на аергель кремнезему відбувається при кімнатній температурі за рахунок зменшення тиску парів розчину над

поверхнею пластини при швидкому обертанні. Дегідратації гелю також сприяє поглинання рідини утворюваним силікатом K_2SiO_3 і залишками лугу KOH , що випадає з розчину при висушуванні і залишається на поверхні аерогелю.

4. Висновки

Досліджений в роботі новий спосіб одержання плівок аерогелю кремнезему на поверхні кремнію дозволяє формувати діелектричні плівки з необхідною величиною вбудованого заряду в одному технологічному циклі при кімнатній температурі. Такі плівки можуть бути використані для створення елементів ізоляції мікроелектронних приладів і пасивації поверхні кремнію. Додаткові можливості для їх використання надає їх поруватість і наявність вбудованого заряду. Заряд в діелектричній плівці дозволяє створювати поверхневий інверсійний вигин зон в напівпровіднику і на основі таких структур сонячні елементи з поверхневим бар'єром.

Список використаних джерел

1. Куколев Г.В. Химия кремния и физическая химия силикатов. – М.: Высшая школа, 1966. – 463с.
2. Резвый Р.Р. Эллипсометрия в микроэлектронике. – М.: Радио и связь, 1983. – 120с.
3. Алесковский В.Б. Стехиометрия и синтез твердых соединений. – Л.: Наука, 1976. – 142с.
4. Жарких Ю.С., Лисоченко С.В., Третьяк О.В., Новіков С.С. Контроль стану поверхні кремнієвих пластин після хімічних обробок // Нові технології.- 2004.- №1-2 (4-5). С. 18-20.
5. Лисоченко С.В., Безякін В.О., Жарких Ю.С., Третьяк О.В. Автоматизована установка безконтактного контролю якості технологічних обробок напівпровідникових пластин // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2006. – № 4. – С. 308–317.
6. 6th ISA: Albuquerque, N.M., USA October 8-11, 2000 Proceedings // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2001. – Vol. 285.

Надійшла до редколегії 07.09.07

УДК 621.38

Зубков В.В.^{*}, студент
Баужа О.С., асистент

Магнітні властивості квантових точок із врахуванням спин-орбітальної взаємодії.

В роботі представлені теоретичні розрахунки впливу спин-орбітальної взаємодії на намагніченість та магнітну сприйнятливість електронів у малорозмірних квантових точках. Отримані характеристики демонструють стрибкоподібну поведінку при наднизьких температурах. Різкі зміни намагніченості при малих магнітних полях пов'язані з перетином енергетичних рівнів електронів. Ці перетини виникають за рахунок спин-орбітальної взаємодії. Детальні розрахунки, проведені для InAs квантових точок, демонструють зміну діамagnetичних властивостей на парамагнітні, а також згладжування характеристик намагніченості та магнітної сприйнятливості зі збільшенням температури.

Ключові слова: квантові точки, спин-орбітальна взаємодія, унітарна трансформація, намагніченість, магнітна сприйнятливість.

^{*}E-mail: zubkoff@i.ua

1. Вступ

На сьогоднішній день нанотехнології досягли такого рівня, що дозволяють створювати системи квантових точок (КТ), які можуть відрізнятися одна від одної розміром, величиною хімічного потенціалу в них, кількістю точок у системі, тощо [4]. Отже, проблема ретельного дослідження енергетичних спектрів у КТ стала більш актуальною. Також, в останні роки, достатньо жваво проводяться дослідження процесів намагнічування КТ [1]. Такі дослідження важливі для напрямку науки – спинтроніки і проводяться з метою отримання інформації щодо спинових властивостей структур з КТ у зовнішньому магнітному полі.

Так існує можливість використання таких наносистем для створення кубіт-масивів пам'яті у квантових комп'ютерах [3]. Отже, дослідження енергетичного спектра в КТ можуть допомогти запропонувати принципи роботи нових приладів спинтроніки.

Мета даної роботи полягає у дослідженні впливу спин-орбітальної (СО) взаємодії на намагніченість та магнітну сприйнятливість

V.V. Zubkov^{*}, student
O.S. Bauzha, assistant fellow

Magnetic properties of quantum dots with spin-orbit interaction.

We present a theoretical study of the effect of the spin-orbit interaction on the electron magnetization and magnetic susceptibility of small semiconductor quantum dots. Those characteristics demonstrate interesting behaviour at a low but finite temperature. The strident changes of the magnetization at low magnetic fields are attributed to the alternative crossing between the spin-split electron levels in the energy spectrum, essentially due to the spin-orbit interaction. Detailed calculation using parameters of InAs semiconductor quantum dot demonstrates changes from diamagnetic to paramagnetic susceptibility and also smoothing magnetization and magnetic susceptibility characteristics with growth temperature.

Key Words: quantum dots, spin-orbit interaction, unitary transformation, magnetization, magnetic susceptibility.

квантових точок у слабких магнітних полях. В даній роботі було розглянуто модель циліндричної квантової точки з параболічним обмежувачим потенціалом за наявності СО взаємодії. Використання методу унітарного перетворення гамільтоніана для розгляду такої моделі КТ дозволило знайти енергетичні рівні в аналітичному вигляді. Розрахунки спектра, намагніченості та магнітної сприйнятливості проведені для напівпровідника InAs. Показано, що при малих магнітних полях існує перетин енергетичних рівнів, що в свою чергу призводить до стрибкоподібної зміни намагніченості.

2. Аналіз проблеми

СО взаємодія відіграє суттєву роль при формуванні спектра електрона в напівпровідникових структурах типу $A^{\text{III}}-B^{\text{V}}$. Ця взаємодія знімає спінове виродження в нульовому магнітному полі.

Ми розглядаємо квантову точку, сформовану у двовимірному електронному газі, що обмежений вздовж осі z , з параболічним ефективним потенціалом:

$$V_c(\rho) = \frac{1}{2} m(E) \omega_c^2 \rho^2, \quad (1)$$

знаходження аналітичного розв'язку необхідно використати унітарне перетворення [4,5]. Магнітне поле прикладається вздовж осі симетрії квантової точки.

Гамільтоніан такої системи в циліндричних координатах $\{\rho, \varphi\}$ має наступний вигляд [2]:

Стационарне рівняння Шредінгера без урахування спин-орбітальної взаємодії з потенціалом такого вигляду має аналітичний розв'язок [4]. При врахуванні СО взаємодії для

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \left[\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m(E)}{8} \omega_c^2 \rho^2 + V_c + H_{Dress} + \frac{1}{2} \Sigma_z \mu_B g(E) B, \quad (2)$$

де

$$H_{Dress} = \lambda_D \left[\Sigma_\varphi \left(k_\varphi + \frac{e}{2\hbar} B \rho \right) + \Sigma_\rho k_\rho \right] \quad (3)$$

$$\lambda_D = \gamma_c \cdot \left(\frac{\pi}{z_0} \right)^2, \quad (5)$$

– спин-орбітальна взаємодія в представленні Дресельхауса [7, 8], де

$$k_\varphi = -\frac{i}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad k_\rho = -i \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (4)$$

– проекції оператора хвильового числа на осі φ та ρ , λ_D – параметр Дресельхауса, який визначається наступним чином:

де γ_c – константа матеріалу [9], визначається для напівпровідника, з якого утворена квантова точка, z_0 – висота квантової точки;

$\Sigma_\rho, \Sigma_\varphi, \Sigma_z$ – матриці Паулі в циліндричних координатах [10], $\omega_c = eB/m(E)$ – циклотронна частота, $\mu_B = e\hbar/2m_0$ – магнетон Бора.

Для ефективної маси використовується вираз [4]:

$$\frac{1}{m(E)} = \frac{1}{m(0)} \cdot \frac{E_g(E_g + \Delta)}{3E_g + 2\Delta} \cdot \left[\frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right], \quad (6)$$

де $m(0)$ – ефективна маса електрона на дні зони провідності, E_g – ширина забороненої зони напівпровідника, Δ – спин-орбітальне розщеплення валентної зони в напівпровіднику.

g -фактор задається формулою [4]:

$$g(E) = 2 \left[1 - \frac{m_0}{m(E)} \cdot \frac{\Delta}{3(E_g + E) + 2\Delta} \right], \quad (7)$$

Стационарне рівняння Шредінгера з таким гамільтоніаном не має аналітичного розв'язку. Тому використовуємо унітарну трансформацію [5,6], в результаті чого отримаємо трансформований гамільтоніан:

$$\hat{H} = U^{-1} \hat{H} U, \quad (8)$$

Візьмемо оператор U у такому вигляді:

$$U = \exp(-i\lambda_D G), \quad (9)$$

де $G = \frac{m}{\hbar^2} \rho \Sigma_\rho$. Розклавши трансформований гамільтоніан за малим параметром λ_D ($\lambda_D \ll 1$) в ряд Тейлора і припускаючи, що $H_{Dress} \gg H_{Zeim}$, тоді, відкинувши члени вищих порядків, отримаємо:

$$\hat{H} = H + i\lambda_D [G, H] + \frac{i^2 \lambda_D^2}{2!} [G, [G, H]] + O(\lambda_D^3), \quad (10)$$

де $[G, H]$ – комутатор. Нехтуємо усіма членами вищих порядків ($O(\lambda_D^3)$).

Пропускаючи математичні викладки щодо знаходження комутаторів отримаємо вираз для трансформованого гамільтоніана:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \left[\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m(E)}{8} \omega_c^2 \rho^2 + \frac{m(E)}{2} \omega_0^2 \rho^2 - \frac{im\lambda_D^2}{\hbar^2} \Sigma_z \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{me\lambda_D^2}{2\hbar^3} B \rho^2 \Sigma_z + \frac{1}{2} \mu_B g B \Sigma_z - \frac{m\lambda_D^2}{\hbar^2} \quad (11)$$

Вибираючи хвильову функцію в такому і розв'язуючи стаціонарне рівняння Шредінгера для трансформованого гамільтоніана отримаємо енергетичний спектр [4]:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \Phi(\varphi) \cdot R_{n,l,\Sigma}(\rho), \quad (12)$$

$$E_{n,l,\Sigma} = \hbar \Omega_{\Sigma}(E_{n,l,\Sigma}, B) \cdot (2n + |l| + 1) + \frac{\hbar l \omega_c(E_{n,l,\Sigma}, B)}{2} + \Sigma_z \cdot \left(\frac{m\lambda_D^2 l}{\hbar^2} + \frac{\mu_B g B}{2} \right) - \frac{m\lambda_D^2}{\hbar^2} \quad (13)$$

Величина намагніченості, для нульової температури, визначається наступним чином [10]: де $f(E)$ – функція розподілу Фермі-Дірака, ξ – хімічний потенціал заданої системи, який визначається з рівності:

$$M = \sum_{n,l,\Sigma} \left(-\frac{\partial E_{n,l,\Sigma}}{\partial B} \right), \quad (14)$$

$$N = \sum_{n,l,\Sigma} f(E_{n,l,\Sigma} - \xi), \quad (16)$$

При ненульовій температурі вираз для намагніченості матиме наступний вигляд:

$$M = \sum_{n,l,\Sigma} \left(-\frac{\partial E_{n,l,\Sigma}}{\partial B} \right) \cdot f(E_{n,l,\Sigma} - \xi), \quad (15)$$

де N – кількість електронів у квантовій точці.

Магнітна сприйнятливість знаходиться за наступною формулою:

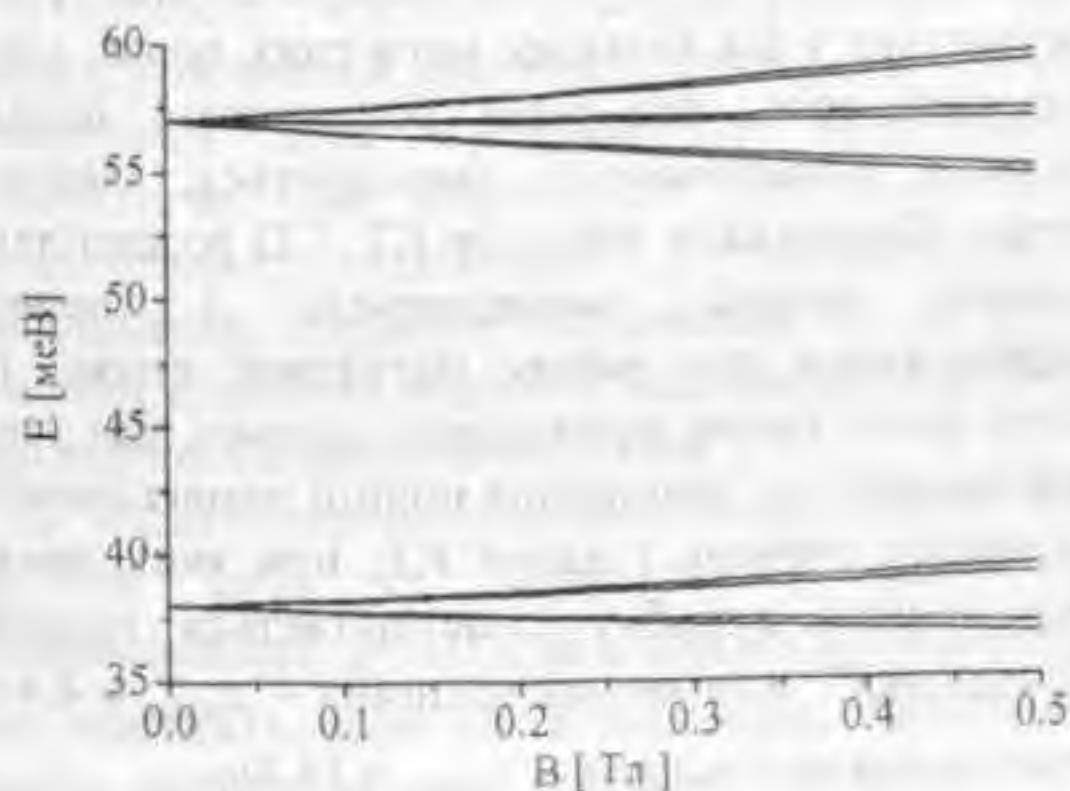
$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}. \quad (17)$$

3. Енергетичний спектр та магнітні властивості квантових точок у напівпровіднику InAs

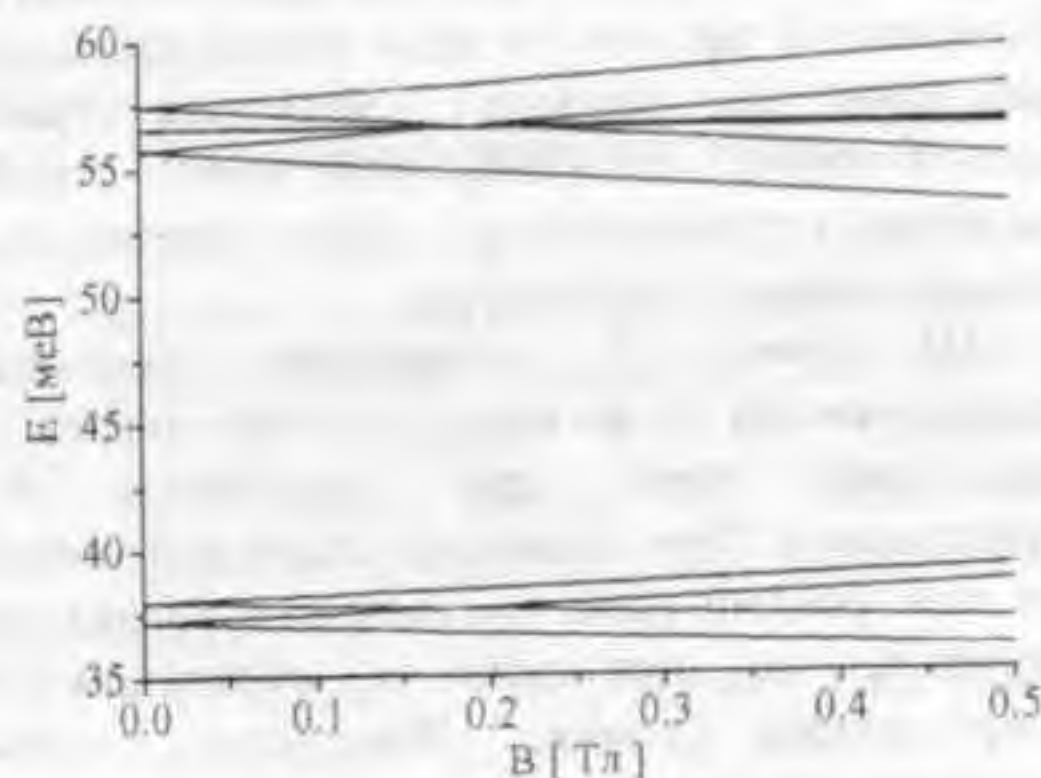
Для розрахунків використовувалися такі параметри напівпровідника InAs: $m(0)/m_0 = 0.04$, $E_g = 0.42 \text{ eV}$, $\Delta = 0.38 \text{ eV}$, характерна енергія зв'язку в КТ – $\hbar \omega_0 = 0.019 \text{ eV}$,

$\gamma_c = 130 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$ [10]. Товщина КТ $z_0 = 6 \text{ нм}$, середній радіус $r_0 \approx 18.5 \text{ нм}$.

На рисунку 1-а зображено залежність енергетичного спектра від прикладеного магнітного поля без спин-орбітальної взаємодії. На 1-б наведено ту саму залежність але із врахуванням спин-орбітальної взаємодії.



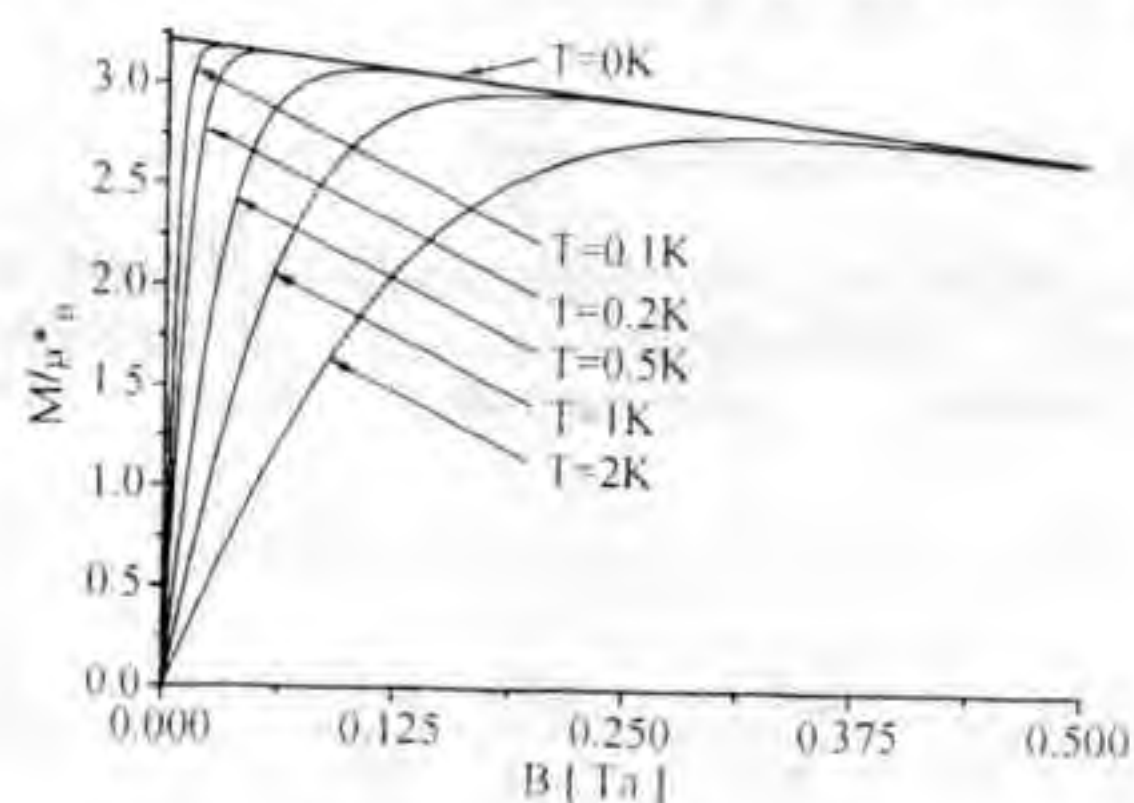
а



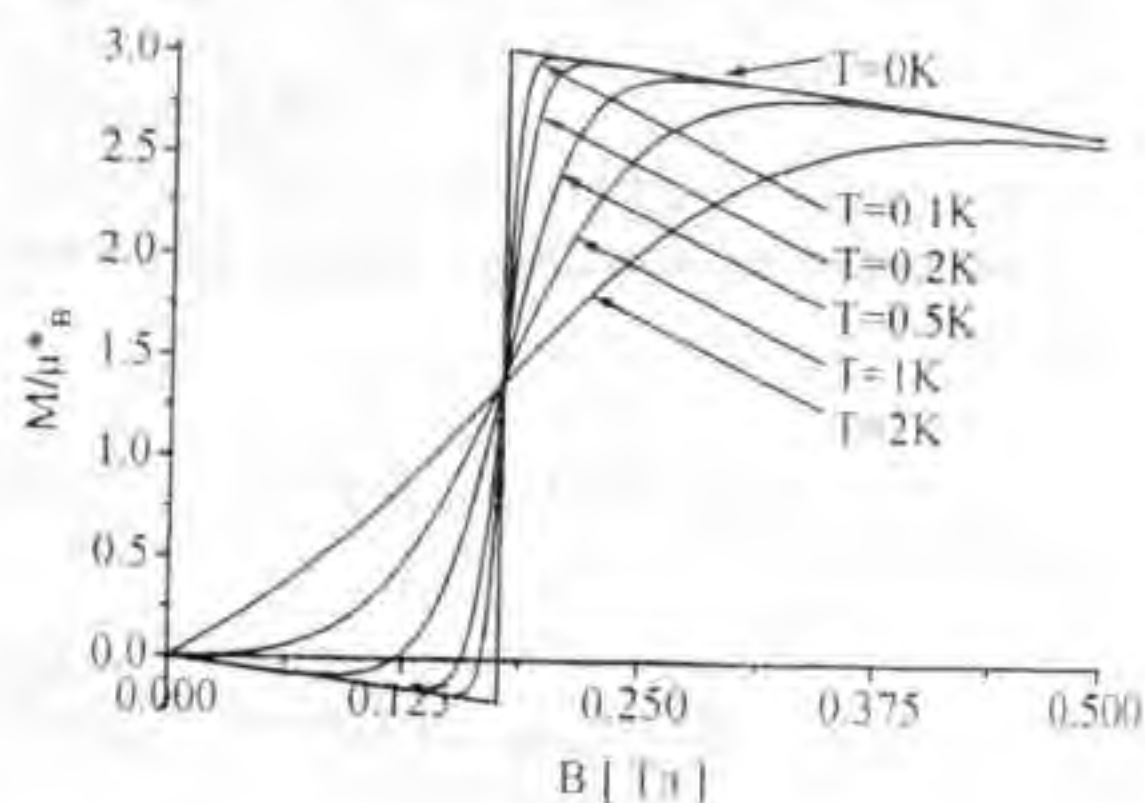
б

Рис. 1 Енергетичний спектр без (а) та зі спин-орбітальною взаємодією (б)

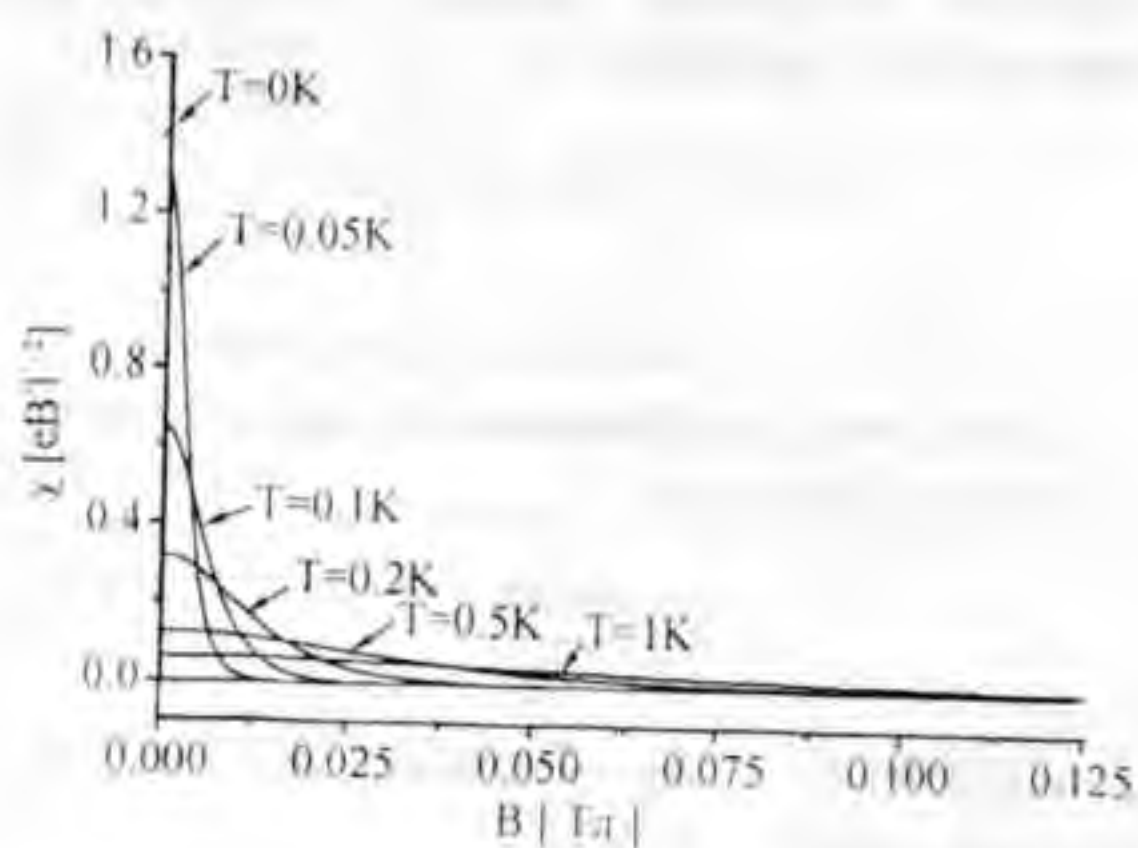
На рис. 2 представлені залежності від магнітного поля для квантової точки з 4-ма намагніченостями та магнітної сприйнятливості електронами.



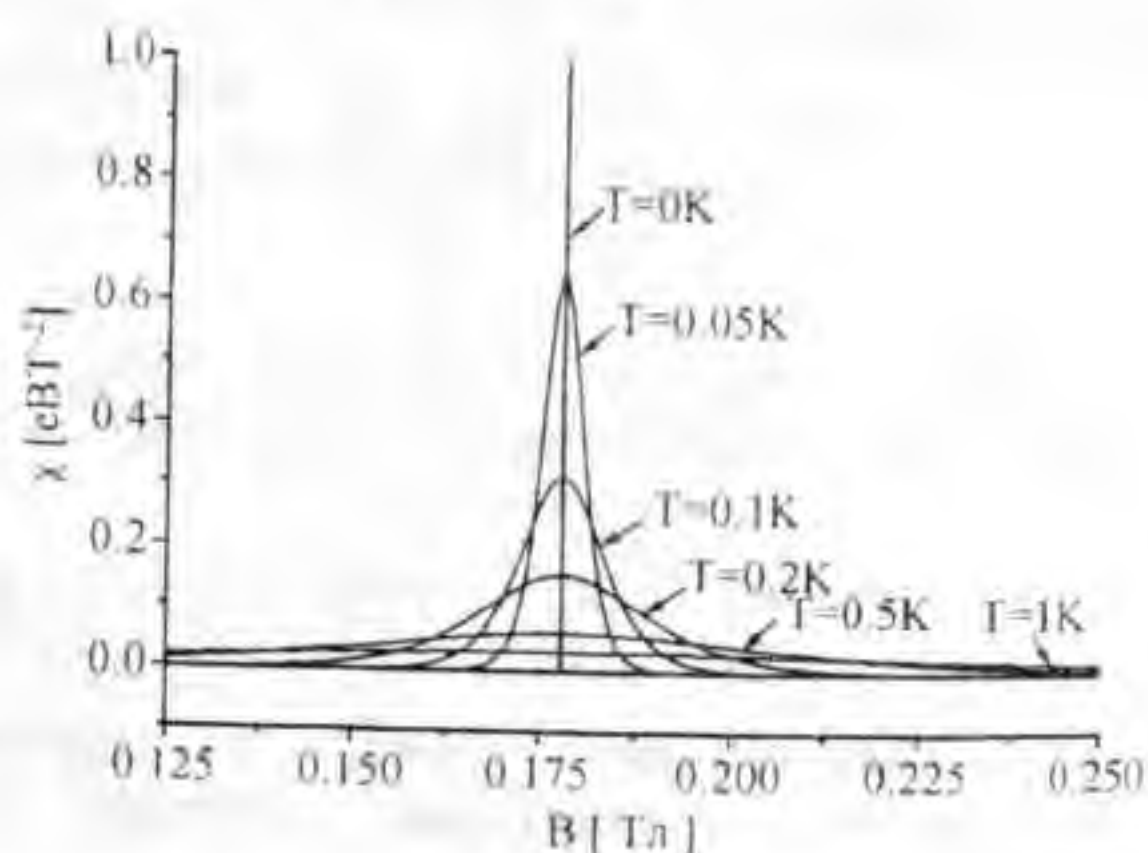
а



б



в



г

Рис. 2 Намагніченість КТ без СО та зі СО взаємодією – (а) та (б) відповідно та магнітна сприйнятливості КТ без СО та зі СО взаємодією – (в) та (г) відповідно при заповненні 4-ма електронами, де за μ_B^* позначено ефективний магнетон Бора $\mu_B^* = e\hbar/2m(0)$.

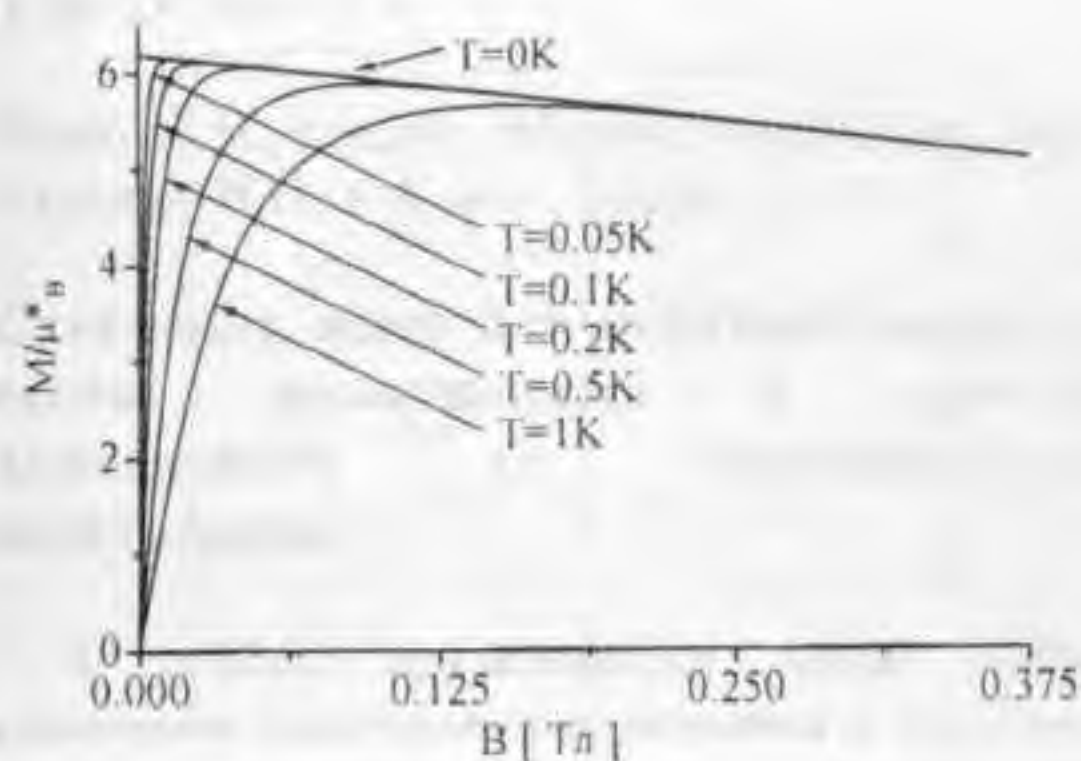
Для такої системи загальна намагніченість зі збільшенням магнітного поля зменшується. При врахуванні СО взаємодії з'являється стрибок намагніченості та, відповідний йому, стрибок магнітної сприйнятливості. Ефект зменшується при збільшенні температури.

На рис. 3 зображено залежності намагніченості та магнітної сприйнятливості від магнітного поля при заповненні 8-ма електронами. При заповненні квантової точки 8-ма електронами намагніченість має вигляд двох стрибків, це пов'язано з перетином 3-х енергетичних рівнів. Відповідно картина магнітної сприйнятливості має два піки.

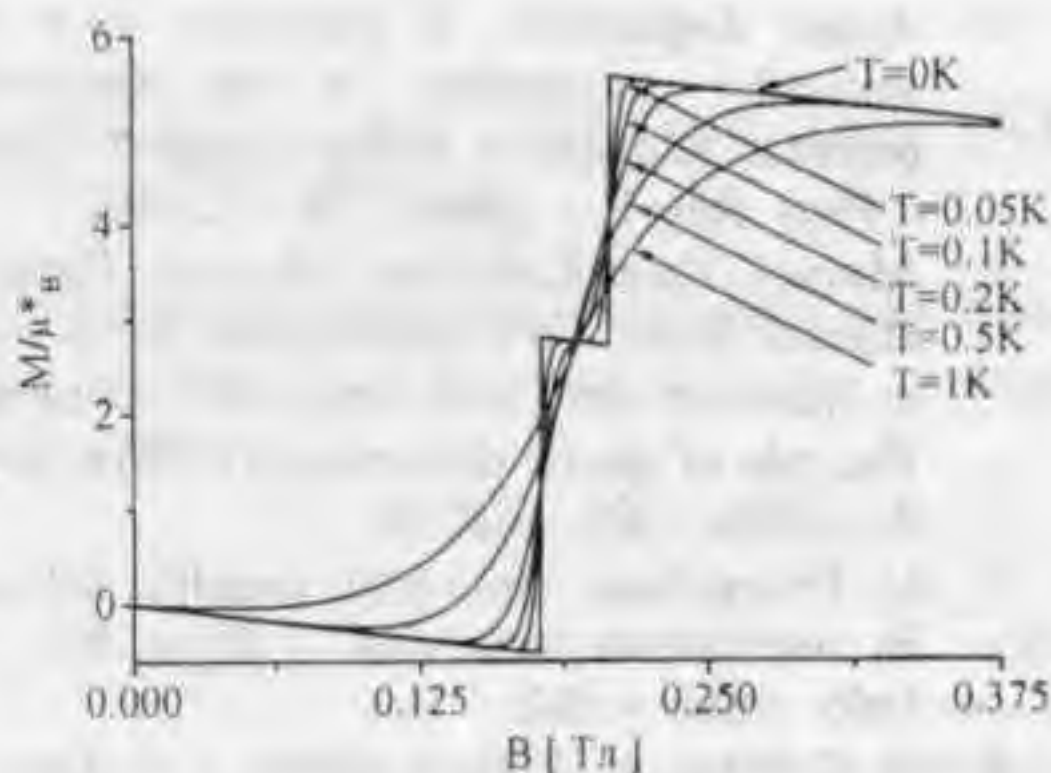
Наявність такої подвійної "сходинки" намагніченості залежить від товщини КТ. При зменшенні товщини КТ розщеплення рівнів

збільшується, і перетин енергетичних рівнів зсувається у бік більших магнітних полів, але за рахунок того, що рівні розташовані щільно, полиця намагніченості зменшується. Навпаки, якщо збільшувати товщину КТ, СО розщеплення рівнів енергії зменшується, і перетин відбувається при малих магнітних полях, при яких рівні також розташовані щільно, що також призводить до зменшення полиці намагніченості. Діапазон значень товщин КТ, при яких замість одиничного стрибку спостерігається подвійна "сходинка": мінімальна товщина – $z_{0Min} \approx 4.4 \text{ нм}$, максимальна товщина – $z_{0Max} \approx 14.8 \text{ нм}$.

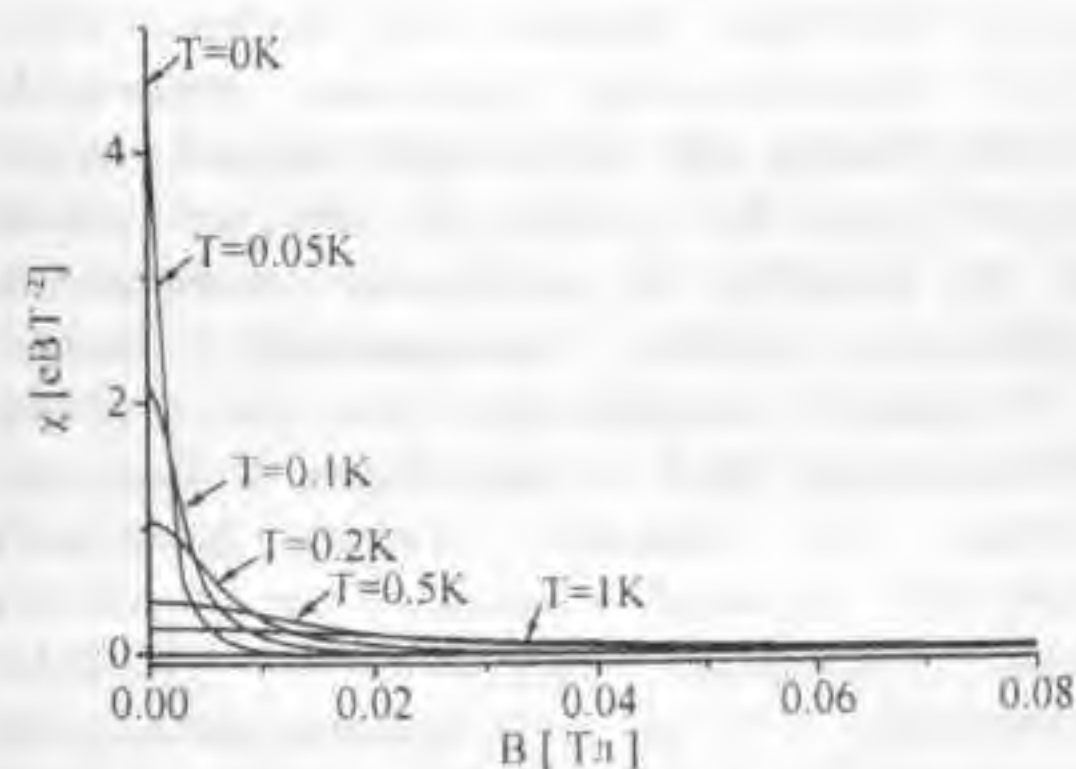
Також стрибки намагніченості спостерігаються при заповненні КТ п'ятьма, дев'ятьма та десятьма електронами.



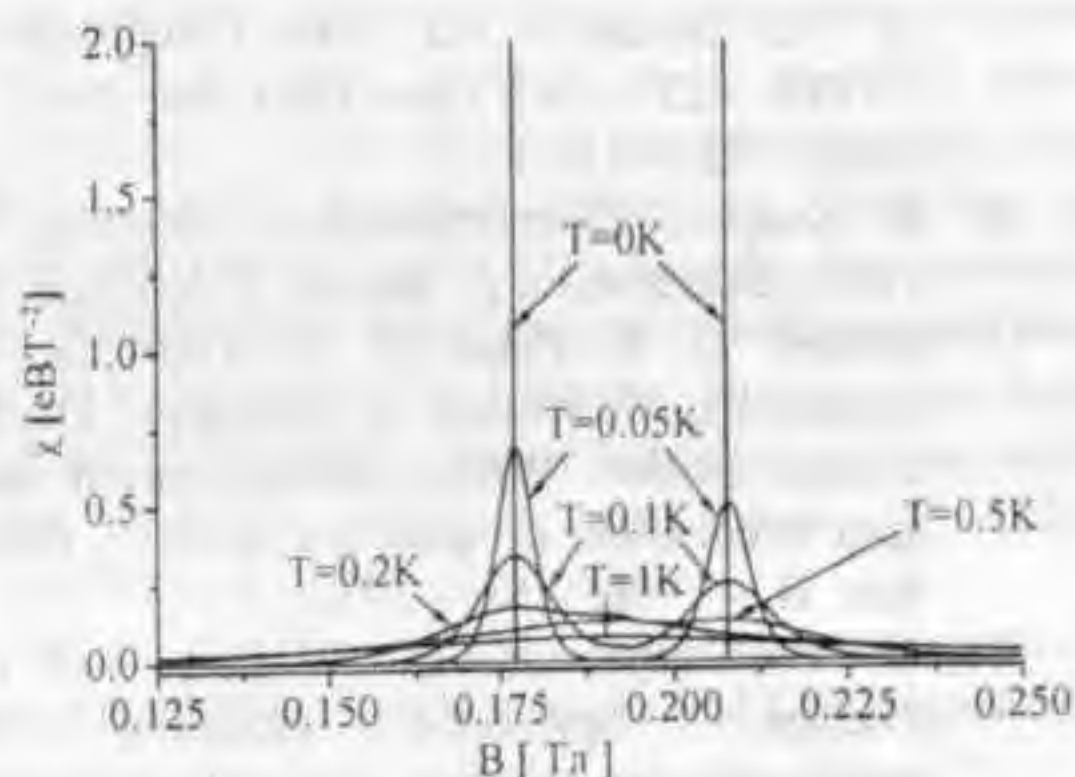
а



б



в



г

Рис. 3 Намагніченість КТ без СО та зі СО взаємодією – (а) та (б) відповідно та магнітна сприйнятливості КТ без СО та зі СО взаємодією – (б) та (г) відповідно при заповненні 8-ма електронами

4. Висновки

Розраховано енергетичні рівні, намагніченість та магнітну сприйнятливості для випадку заповнення квантової точки 4-ма та 8-ма електронами при нульовій та ненульових температурах. При розрахунках було враховано спин-орбітальну взаємодію в представленні Дресельхауса. Стрибки намагніченості та піки магнітної сприйнятливості є наслідком перетину енергетичних електронних рівнів.

В місцях перетину енергетичних рівнів КТ поводить себе як парамагнетик (магнітна сприйнятливості $\chi > 0$), за відсутності перетинів вона поводить себе як діамагнетик. Величина стрибку намагніченості залежить від квантових чисел тих рівнів, які перетинаються, а саме при зміні спінового квантового числа стрибок найменший, при зміні орбітального квантового числа стрибок середній, а при зміні головного квантового числа стрибок найбільший.

КТ мають низку особливостей, а саме: можливість керування енергетичним спектром й магнітними властивостями за допомогою зовнішнього електричного поля, або зміни товщини КТ.

Список використаних джерел

1. О.В. Третьак, В.А. Львов, О.В. Барабанов. Фізичні основи спінової електроніки. – Київ: Київський університет, 2002 – 315 с.
2. Л. Д. Ландау Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989 – 772 с.
3. К.А. Валиев, А.А. Кокин. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. – Ижевск: РХД, 2001 – 352 с.
4. O. Voskoboynikov, O. Bauga, C. P. Lee, O. Tretyak. Magnetic properties of parabolic quantum dots in the presence of the spin-orbit interaction // JAP. – 2003. – 94. – №9. – 5891.

5. *Agusti Emperador, E Lipparini*. Role of spin-orbit interaction in the chemical potential of quantum dots in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* – 2004. – **70**. – 125302.
6. *Manuel Valin-Rodriguez, Antonio Puente, Llorenc Serra*. Spin splitting and precession in quantum dots with spin-orbit coupling: The role of spatial deformation // *Phys. Rev. B.* – 2004. – **69**. – 085306.
7. *G. Dresselhaus*. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures // *Phys. Rev.* – 1955. – **100**. – 580.
8. *G. E. Pikus, V. A. Marushchak, A. N. Titkov*. Spin splitting of energy bands and spin relaxation of carriers in cubic $A^{III}-B^V$ crystals // *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* – 1988. – **22**. – 185. (*Sov. Phys. Semicond.* – 1988. – **22**. – 115.)
9. *W. Knap, C. Skierbiszewski, A. Zduniak, E. Litwin-Staszewska, D. Bertho, F. Kobbi, J. L. Robert, G. E. Pikus, F. G. Pikus, S. V. Iordanskii, V. Mosser, K. Zekentes, Yu. B. Lyanda-Geller*. Weak antilocalization and spin precession in quantum wells // *Phys. Rev. B.* – 1996. – **53**. – 3912.
10. *O. Voskoboynikov, C. P. Lee, and O. Tretyak*. Spin-orbit splitting in semiconductor quantum dots with parabolic confinement potential // *Phys. Rev. B.* – 2001 – **63**. – 165306.

Надійшла до редколегії 30.05.07

УДК 537.86:519.2

Зупко* А.В., студент, Мусатенко Ю.С., к.ф.-м.н.,
Курашов В.Н., к.ф.-м.н., доцент

Стиснення відео для втратних мереж на основі мультиописів у просторі хвильового та Карунена-Лоева перетворень

В роботі представлено новий метод стиснення відео для використання у втратних мережах передачі даних на основі алгоритму KLSEZW та методу мультиописів. Показано, що алгоритм дозволяє відтворювати стиснене відео навіть при втраті частини даних. Досягнуто значення максимального кроку втрат якості відновлення при втраті пакету даних на рівні не менше 5 дБ, що є добрим результатом, зважаючи на переваги, які дає метод. Моделювання роботи алгоритму показує, що він спроможний працювати в мережах з втратами, і його ефективність стиснення дуже близька до високої ефективності стиснення базового алгоритму KLSEZW. Розроблений алгоритм може використовуватися в практичних застосуваннях передачі відео в реальному часі через втратні мережі.

Ключові слова: квантування сильним деревом нулів, метод мультиописів, алгоритм KLSEZW.

*E-mail: tmac@ukrpost.ua,

Вступ

Важливість досліджень в області обробки відео в наш час обумовлена стрімким розвитком цифрових технологій та сфер використання цифрового відео. Хоча пропускна здатність цифрових каналів неуклінно зростає, проте і обсяги відео інформації, що передаються через ці канали, також збільшуються.

Оскільки пропускна здатність мережі постійно змінюється зі зміною кількості її користувачів і зміною обсягів інформації, яка передається, то постійно існує можливість втрати певної частини пакетів, а також можливий довільний порядок надходження пакетів. Через високу швидкість пакетної передачі, порівняно з потоковою, алгоритми стиснення відео, які є пакетно орієнтованими та стійкими, і гнучкими до всіх цих умов, мають ряд переваг. А саме, вони дають 1) вищу швидкість передачі відео; 2) більш ефективне використання доступної пропускної здатності; 3) забезпечення максимально

Zupko* A.V., stud., Musatenko Yu.S., Ph.D.,
Kurashv V. N., Ph.D.

Video compression for lossy networks based on wavelet and Karhunen-Loeve multiple descriptors

Paper presents new method of video compression for use in lossy data transmission networks based on KLSEZW algorithm and multiple descriptors approach. It is shown that proposed method allows successful video decompression even with partial data loss. Method provides maximum step of loss equal 6 dB in terms of PSNR when losing data packet. This is a good result taking into account other method advantages. Modeling of algorithm operation in lossy network demonstrates method ability to work in such conditions and that his compression performance is close to base KLSEZW algorithm. The developed algorithm could be used in practical applications of video transmission over lossy networks.

Key Words: Strong zerotree quantization, multiple descriptors approach, KLSEZW algorithm.

можливої якості відновлення відео при доступній пропускній здатності мережі.

Метою даної роботи була розробка нового методу стиснення відео для передачі через втратні мережі на основі базового алгоритму KLSEZW з використанням методу мультиописів. Головною вимогою, що ставиться до методу є якнайменший крок втрат якості відновлення при втраті пакету даних.

Для виконання цієї вимоги пропонується розбиття загального потоку даних на описи шляхом окремого кодування підпросторів, у які проектується відео. На підпростори пропонується розбивати в такий спосіб: шляхом розбиття частотно-просторового представлення відео в хвильовому базисі на окремі частотно-просторові канали; додаткове розбиття на описи кожного каналу шляхом розбиття його дерева на певну кількість піддерев; розбиття простору власних зображень К/І на підпростори.

1. Опис алгоритму

В даній роботі метод мультиописів[3] застосовується до алгоритму стиснення відео KLSEZW[3]. В алгоритмі стиснення KLSEZW [4] використовується схема розрізнення 1D КЛ x 2D ДХП, де перетворення Карунена-Лоева(КЛ) [3] застосовується вздовж осі часу, а дискретне хвилькове перетворення(ДХП) [6,7] – за просторовими осями певної групи зображень відео. Звичайно група містить 4-32 зображення. Стиснення відео відбувається через розбиття його на групи зображень і стиснення кожної групи окремо. Авторами цього алгоритму було показано, що дана схема розрізнення ефективніша для стиснення і позбавлена ряду недоліків, які притаманні схемі 3D ДХП, де хвилькові перетворення застосовуються як до часової, так і до просторових осей [6]. Структура розрізнення в такому випадку наведена на рис. 1.

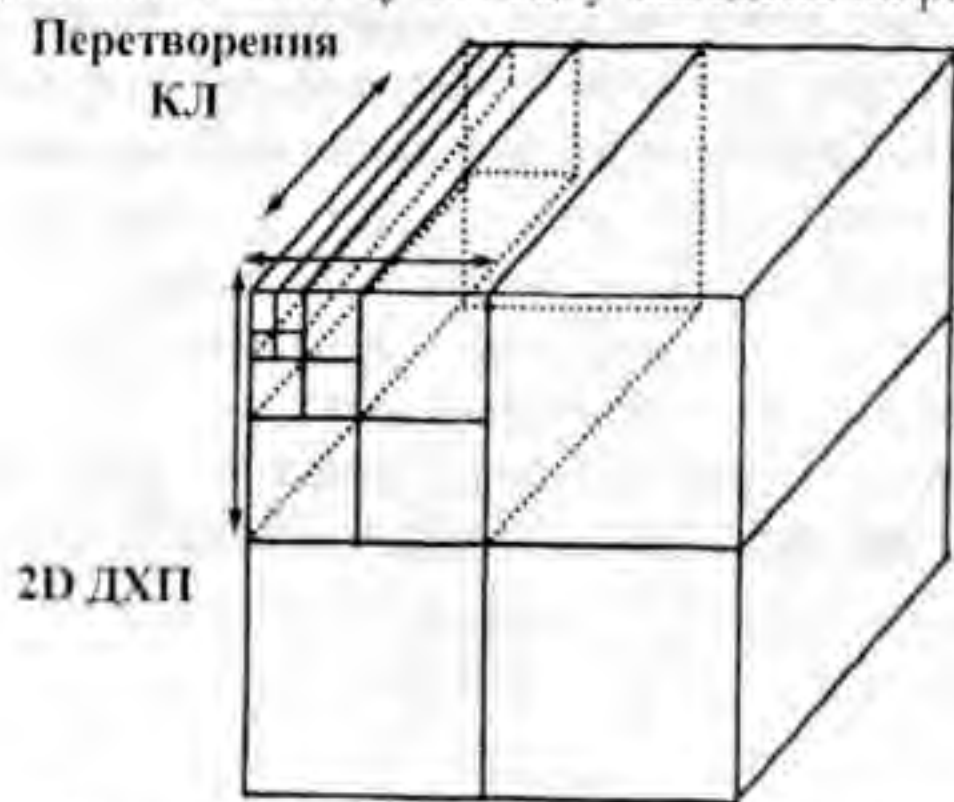


Рис. 1 Схема розрізнення групи зображень відео при застосуванні перетворення КЛ за часовою віссю і 2D ДХП за просторовими.

Розбиття на описи виконується в просторі власних зображень КЛ та в частотно-просторовій структурі хвилькового базису.

2. Розбиття частотно-просторового представлення відео в хвильковому базисі на окремі частотно-просторові канали

В першому методі розбиття на описи було використано особливість хвилькового представлення сигналу, яке можна подати як сукупність частотно-просторових каналів [1,2], які зображено на рис. 2. Множини блоків $LL^i, \{HL^i\}, \{LH^i\}, \{HH^i\}$ утворюють відповідно канали 1, 2 та 3. Самий низько-частотний блок, видно, приєднано до каналу 1.

Таку структуру має кожне власне зображення кубу на рис. 2.

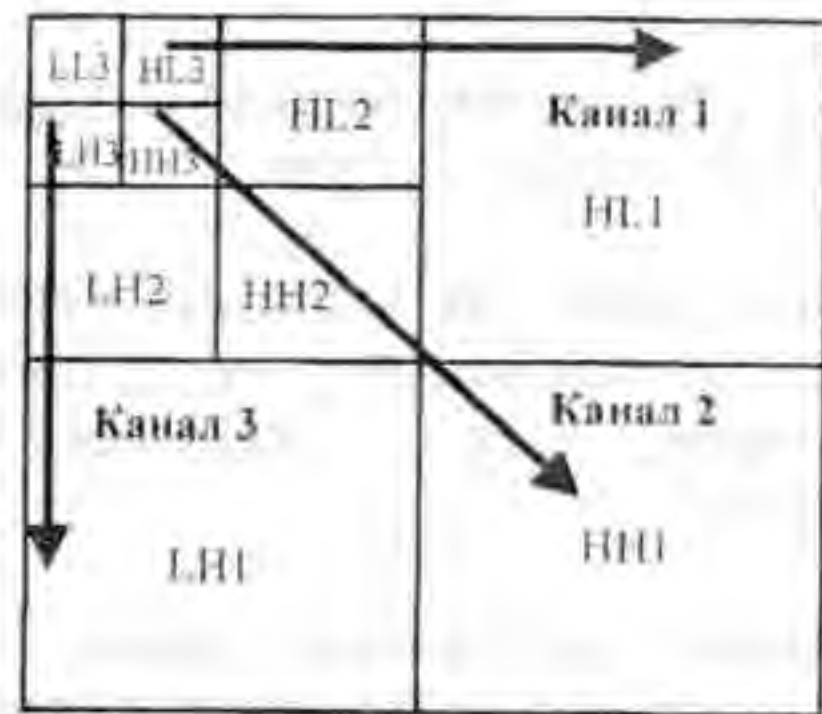


Рис 2 Блочна структура 2D ДХП.

У базовому методі KLSEZW здійснюється квантування кубу з рис.1. При цьому утворюється три потоки даних: SS1, куди записуються символи PS, NS, ZT, JT та ST для кожного коефіцієнта; SS2, куди записується карта уточнень; та ще один додатковий потік SS3, в який пишуться символи при квантуванні останнього рівня дерева розрізнення – на останньому рівні не може бути символів ZT, ST, бо вони не мають нащадків, тому є можливість скоротити алфавіт арифметичного кодера та збільшити рівень стиснення.

На відміну від базового методу KLSEZW, було вирішено куб на рис. 1 розбити на три частини, відповідно до часово частотних каналів і для кожного частотного каналу створювати свої потоки SS1, SS2 та SS3 і незалежно ці потоки стискувати та передавати. В результаті ми отримуємо 9 потоків – по три на кожен канал.

$$\{SS1^i, SS2^i, SS3^i\}, i = \overline{1,3} \quad (1).$$

Дані блоку LL3 вирішено було не виносити в окремі потоки і записувати разом з одним із трьох каналів. Фактично такий підхід є розбиттям на описи на основі відокремлення хвилькових підпросторів з різною просторово-частотною орієнтацією. Зі згаданих потоків SS1 і SS3 є незалежними, а SS2 є залежним від SS1 і SS3 і може використовуватися в присутності двох попередніх. Це дещо зменшує гнучкість, але при правильній логіці все ж дозволяє втрачати їх при передачі незалежно і врахувати залежність на етапі відновлення.

Розглянуте розбиття на описи та їх стиснення можна позначити як дію певного оператора $\tilde{W}$, який перетворює множину частотно-просторових каналів на множину описів, кожний з яких являє собою бітовий потік.

$$S = \bar{W}C, \quad (2)$$

де $C = \{LL \cup \{HL^i\}, \{LH^i\}, \{HH^i\}\}$ - множина блоків в каналах, $S = \{\{SS1^i, SS2^i, SS3^i\}, i = \overline{1,3}\}$ - множина бітових потоків.

Далі множина бітових потоків перепакується у пакети і передається через втратну мережу, і втрати при передачі позначаються нами оператором $\bar{N}$. В даній роботі він був змодельований як випадкова втрата певної частини пакетів.

$$U = \bar{N}S, \quad (3)$$

де $U \subset S$ - множина, що містить в собі коректно передані бітові потоки. Якщо передані всі потоки, то вона повністю співпадає з множиною S .

На етапі декодування здійснюється зворотній хід модифікованого алгоритму KLSEZW, що можна позначити як застосування до множини U оператора, оберненого до $\bar{W}$.

$$C^{res} = \bar{W}^{-1}U, \quad (4)$$

який на виході дасть множину часово-просторових каналів $C^{res} \subset C$, яка при отриманні всіх бітових потоків повинна співпадати з множиною C .

Після застосування до множини C оператора оберненого перетворення ДХП та оберненого КЛ отримується множина всіх зображень групи. Якщо було втрачено деякі бітові потоки при передачі – якість отриманих зображень буде дещо гіршою ніж при отриманні та декодуванні всіх потоків. Але кількість зображень буде дорівнювати кількості вхідних зображень.

3. Розбиття на описи частотно-просторового каналу шляхом поділу його дерева на певну кількість піддерев

Розбиття частотно-просторового представлення відео на окремі частотно-просторові канали дало можливість використання методу у втратних мережах за рахунок утворення певної кількості потоків даних та можливості їх незалежної передачі і відтворення. Проте, максимальний крок втрати якості при втраті потоку, як показано далі в результатах, складав більше 10дБ, що є незадовільним результатом.

Тому нами було вирішено додатково розбити на описи кожен частотно-просторовий канал

шляхом розбиття його дерева на певну кількість піддерев.

Розбиття здійснюється таким чином. У самому низькочастотному блоці коефіцієнт з координатами y та x поміщається у блок i , якщо

$$y \& 1 = (i >> 1) \& 1, \quad x \& 1 = i \& 1. \quad (5)$$

Де $\&$ - це операція побітового ТЛК, а $>>$ - це операція побітового зсуву праворуч. Коефіцієнти - нащадки цього дерева по хвильковому перетворенню - також поміщаються у те ж дерево, що і предок.

Результатом такого розбиття є утворення з одного кубу рис. 1 чотирьох таких кубів, з вдвічі меншим розрізненням в площині зображень. До кожного такого кубу тоді можна застосовувати часово-частотне розбиття, описане в попередньому розділі. З іншого боку запропоноване в цьому розділі розбиття можна представити як поділ кожного каналу кубу на рис. 1 на 4 частини, проте з різних каналів знов таки можна скомпонувати 4 зменшені куби, описані вище. Це є різні представлення одного й того ж розбиття і реальний спосіб його здійснення можна вибрати відповідно до зручності реалізації.

Описане розбиття на окремі описи можна представити як дію деякого оператора $\hat{R}^k$ на множину блоків C :

$$\tilde{C}^k = \hat{R}^k C, \quad (6)$$

де $\hat{R}^k$ - є оператором виділенням k -го кубу з кубу рис.1, описаного множиною блоків C , а $\tilde{C}^k$ є множиною блоків в каналах для k -го кубу

$$\tilde{C}^k = \{LL_k \cup \{HL_k^i\}, \{LH_k^i\}, \{HH_k^i\}\} \quad (7)$$

Далі схема кодування декодування є такою ж як і в попередньому розділі, з тією різницею, що оператор стиснення $\bar{W}$ застосовується не до множини блоків C , а до кожної множини блоків-піддерев $\tilde{C}^k$.

$$\tilde{S}^k = \bar{W} \tilde{C}^k \quad (8)$$

Тепер замість 9-ти бітових потоків отримаємо 36 потоків, що зменшить максимальний крок втрат при відновленні.

4. Розбиття простору власних зображень КЛ на підпростори

Впровадження описаних вище методів розбиття дало досить непогані результати.

Максимальний крок втрати якості, як буде показано в третій частині, був порядку 7 дБ. Проте, було вирішено покращити цей результат шляхом розбиття простору власних зображень КЛ на певну кількість підпросторів.

Правило розбиття на описи доцільно обирати так, щоб вся енергія була рівномірно розподілена за всіма описами. В даному випадку енергія в основному зосереджена в перших власних зображеннях і зі зростанням їх номера енергія сильно спадає. Нехай розбиття буде здійснюватися на K додаткових описів. З огляду на це, щоб розподілити енергію між описами рівномірніше, 0-е зображення буде поміщене в 0-й опис, 1-е в 1-й, 2-е в 2-й, $K-1$ в $K-1$. Далі K -е знову в 0-й, $K+1$ -е в 1-й, $2K-1$ -е в $K-1$ -й опис. В загальному випадку це можна описати так. Для i -го власного зображення, номер опису n , в який воно попаде визначається рівністю.

$$n = i \bmod K, \quad (9)$$

де $\bmod$ – є оператором взяття остачі по модулю K .

Якщо розглядати, яким чином дане розбиття впливає на куб перетворень рис. 1, то дане розбиття утворює з вхідного кубу K менших кубів, в яких кількість пікселів в площині зображень лишилася незмінна, а кількість власних зображень у кожному меншому кубі є в K разів меншою ніж у вихідному.

Розбиття, описане у даному розділі і попередніх розділах, можна застосовувати у будь-якому порядку. Тому ми для зручності викладу розбиття простору власних зображень КЛ будемо застосовувати до k -го кубу розвинень, отриманих у попередньому розділі – $\tilde{C}^k$. Нехай $\hat{Q}^r$ – оператор виділення r -го опису розбиття простору власних зображень КЛ. Тоді множини блоків $\tilde{C}^k$ можна кожен розбити на K підмножин позначивши це таким чином.

$$\tilde{\tilde{C}}^{rk} = \hat{Q}^r \tilde{C}^k \quad (10)$$

Далі схема кодування декодування є такою ж як і у попередньому розділі, з тією різницею, що оператор стиснення $\hat{W}$ застосовується не до множини блоків $\tilde{C}^k$, а до кожної множини блоків $\tilde{\tilde{C}}^{rk}$

$$\tilde{\tilde{S}}^{rk} = \hat{W} \tilde{\tilde{C}}^{rk} \quad (11)$$

Тепер при $K = 2$ замість 36-ти бітових потоків отримасмо 72 потоки, що ще зменшить максимальний крок втрат при відновленні.

5. Реалізація всіх методів розбиття на описи одночасно

Всі три вище описані методи розбиття на описи є незалежними перетвореннями, і тому можуть використовуватись незалежно один від одного. Проте, як показали тестування, окремо вони дають незадовільні результати. Так, наприклад, при використанні тільки розбиття простору власних зображень КЛ максимальний крок втрати якості при втраті пакету складає 15 дБ. А використання лише розбиття на окремі просторово-частотні канали дає максимальний крок в 10 дБ.

Тому доцільно використовувати всі ці методи розбиття на описи одночасно. Як показали результати тестування, описані нижче, це дозволяє зменшити максимальний крок втрати якості до 5 дБ, що є непоганим результатом.

Схема кодування з використанням всіх трьох описаних методів розбиття зображена на рис. 2.

До вхідного набору зображень застосовується перетворення КЛ вздовж часової осі. В результаті цього отримаємо множину власних зображень КЛ. Далі до кожного власного зображення застосовується дискретне хвилькове перетворення, результатом дії якого є деревовидна структура хвилькових коефіцієнтів. Дані коефіцієнти для всіх власних зображень утворюють набір блоків

$C = \{LL \cup \{HL^i\}, \{LH^i\}, \{HH^i\}\}$. Цей набір має структуру подібну до кубу перетворень (рис. 1)

До утвореного набору дерев хвилькових коефіцієнтів застосовується розбиття на описи вздовж часової осі – тобто розбиття простору власних зображень КЛ на підпростори. Кожен підпростір містить певну кількість дерев хвилькових коефіцієнтів, кожне з яких відповідає певному власному зображенню. Далі кожне дерево розбивається на окремі просторово-частотні канали. Після чого дерево коефіцієнтів кожного окремого просторово-частотного каналу розбивається на певну кількість піддерев. Весь цей процес можна подати як застосування вище описаних операторів $\hat{Q}^r$ та $\hat{R}^k$. Таким чином, ми маємо множину блоків $\tilde{\tilde{C}}^{rk}$, кожна з яких має структуру кубу на рис. 1

$$\tilde{\tilde{C}}^{rk} = \hat{R}^k \hat{Q}^r C \quad (12)$$

Потім кожна утворена множина блоків хвилькових коефіцієнтів квантується схемою KLSEZW і стискається арифметичним кодером.

що відповідно до наших позначень можна записати як:

$$\tilde{S}rk = \tilde{W}\tilde{C}rk \quad (13)$$

В результаті отримується множина бітових потоків, кожен з яких може бути окремо переданий через мережу та декодований.

Етап декодування повністю обернений до етапу кодування.

Розроблений алгоритм реалізовано на мові програмування C++ в середовищі Microsoft Visual Studio .NET.

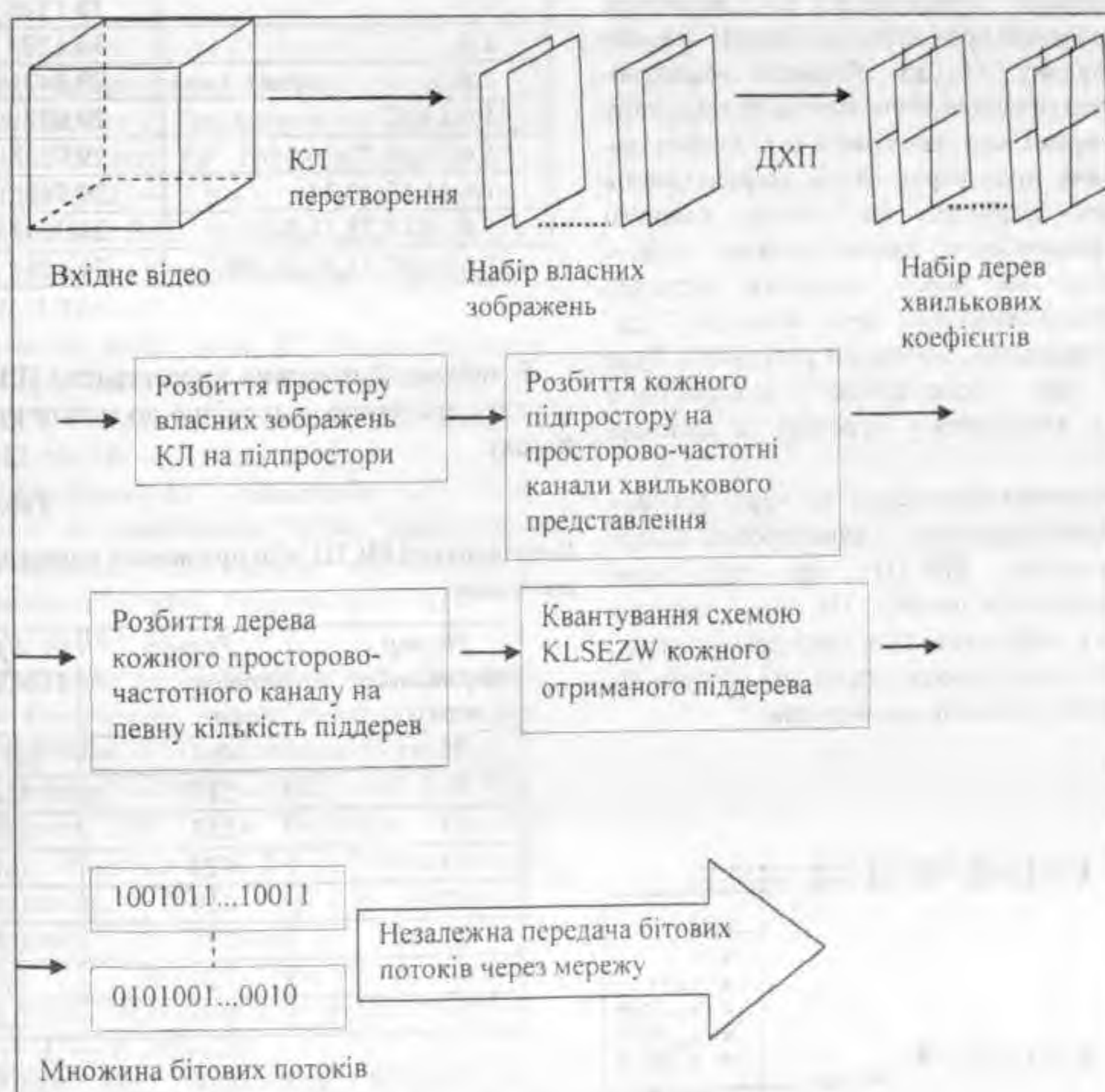


Рис.3. Одночасне використання трьох розроблених методів розбиття на описи.

6. Результати тестування розробленого алгоритму

Розроблений метод стиснення відео було протестовано на одній із стандартних відеопослідовностей «Tennis», що складається з 50 зображень. Було проведено порівняння з базовим алгоритмом KLSEZW. Тестування проводилось при ступені стиснення відповідному смугі пропускання 800 кілобіт на секунду та розрізненні 320x240 15 кадрів на секунду. При тестуванні було імітовано втрату певної кількості описів при передачі через мережу і отримано відповідні залежності пікового відношення

сигнал-шум (ПВСШ або PSNR) від номера зображення.

ПВСШ у роботі визначався в такий загальноприйнятий спосіб:

$$\text{ПВСШ} = 20 \log_{10}(255/\text{MSE}). \quad (14)$$

Тут MSE означає середньо квадратичну похибку, 255 - динамічний діапазон пікселів у зображенні. Було отримано такі результати, описані нижче.

Без розбиття ефективність розробленого алгоритму повністю співпадає з ефективністю базового алгоритму KLSEZW. З розбиттям на описи при отриманні декодером повної кількості

описів, на які розбивалось відео при кодуванні, ефективність відтворення є дещо гіршою за відповідні показники алгоритму KLSEZW.

Було протестовано ефективність трьох представлених методів розбиття та досліджено максимальний крок втрат якості відновлення при втраті одного опису. Використання розбиття простору власних зображень КЛ на підпростори дає максимальний крок втрат при втраті певного потоку порядку 15 дБ. Розбиття частотно-просторового представлення відео в хвильковому базисі на окремі частотно-просторові канали дає максимальний крок втрат 10 дБ. Впровадження додаткового розбиття на описи кожного частотно-просторового каналу шляхом поділу його дерева на певну кількість піддерев покращило максимальний крок втрат до 7 дБ. Але як і очікувалось, найкращі результати було отримано при одночасному використанні розбиттів у хвильковому просторі та просторі КЛ.

Для тестування втрачались по черзі довільні потоки та досліджувалось, з яким кроком спадає якість (величина ПБСШ) при збільшенні кількості втрачених потоків. На рис.3 наведена зміна якості зображень при послідовній втраті потоків. Розбиття проводилось на 160 потоків. На рис. 3 втрачені потоки пронумеровані.

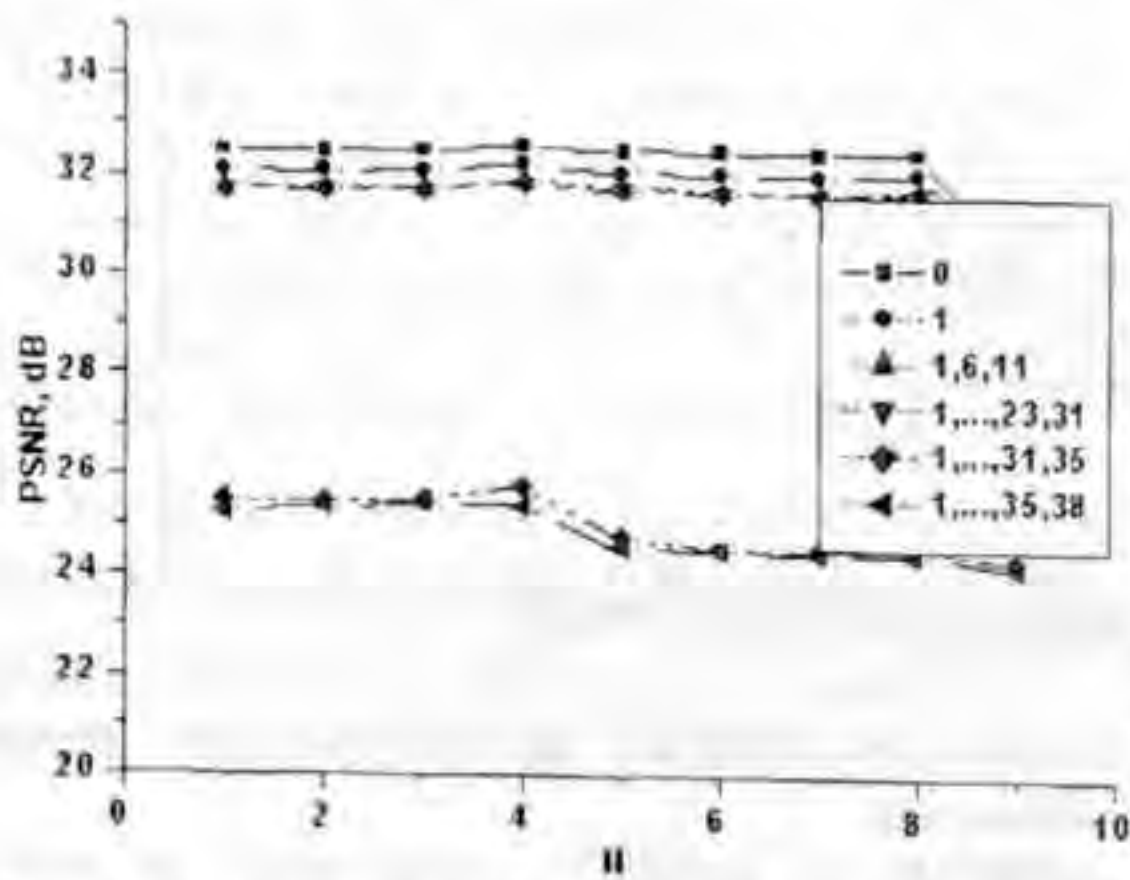


Рис.4 Зміна якості зображень при збільшенні кількості втрачених потоків.

В таблиці 1 наведені усереднені по повному набору зображень значення ПБСШ при послідовній втраті певних потоків. Видно, що максимальний крок втрат з'являється при втраті 35-го потоку і складає 5 дБ.

Таблиця 1.

Значення ПБСШ при втраті певної кількості довільних потоків.

Номери втрачених потоків	ПБСШ, дБ
Без втрат	30.3739
1	30.1346
1,6	30.1295
1,6,11	29.9471
1,6,11,17	29.937
1,6,11,17,23	29.9258
1,6,11,17,23,31	29.7485
1,6,11,17,23,31,35	24.3041
1,6,11,17,23,31,35,48	24.1751

В таблиці 2 наведено крок втрати ПБСШ в порядку зростання, відповідно до втрати певного потоку:

Таблиця 2

Крок втрати ПБСШ, відсортований в порядку спадання.

Номер втраченого потоку	Розмір потоку, байт	Крок ПБСШ, дБ
35	461	5,445
1	515	0,2393
11	553	0,1824
31	422	0,177
48	414	0,1289
23	77	0,011
17	22	0,0101
6	7	0,0051

З наведених результатів видно, що застосування розбиття в просторі КЛ функцій дозволяє зменшити максимальний крок втрати якості до 5.4 дБ, а мінімальний - до 0.005 дБ, тобто майже вдвічі. Також видно, що таке додаткове розбиття погіршує загальну якість відновлення десь на 0.9 дБ, що є цілком прийнятним.

Висновки

Розроблено алгоритм стиснення відео для передачі через втратні мережі на основі базового алгоритму KLSEZW з використанням методу мультиописів. Алгоритм дає рівномірну втрату якості з кроком не більше 6 дБ при послідовній втраті довільних пакетів стиснених даних. Розбиття на описи виконується трьома шляхами:

шляхом розбиття простору власних зображень КІ на підпростори; шляхом розбиття частотно просторового представлення відео в хвильковому базисі на окремі частотно-просторові канали з подальшим їх незалежним кодуванням і передачею через мережу; шляхом додаткового розбиття на описи кожного каналу через розбиття його дерева на певну кількість піддерев.

Список використаних джерел

1. *Daubechies I.* Ten lectures on wavelets, — Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1992. — P.358.
2. *Воробьев В.И., Грибунин В.Г.* Теория и практика вейвлет —преобразования, —М.: Наука, 1999. — С. 1-205.
3. *Ivan V. Bajic, John W. Woods.* Domain-based multiple description coding of images and video // IEEE Transactions on Image Processing. — 2003. — 12, No.10. — P. 1211-1215.
4. *O.M. Soloveyko, Musatenko Yu.S., V.N. Kurashov, V. A. Dubikovskiy* "Video compression based on enhanced EZW scheme and Karhunen-Loeve transform" // SPIE Proceedings — 2001. — 4041 — P. 180-191.
5. *Musatenko Yu.S., Kurashov V.N.* Correlated image set compression system based on new fast efficient algorithm of Karhunen-Loeve transform // SPIE Proceedings. — 1998. — 3527. — P. 518-529.
6. *Shapiro J.M.* An Embedded Wavelet Hierarchical Image Coder // IEEE Transactions on Signal Processing. — 1993. — 41. — P. 3445-3462.
7. *Antonini M., Barlaud M., Mathieu P., Daubechies I.* Image coding using wavelet transform // IEEE Transactions on Image Processing. — 1992. — 1. — P. 205-220.
8. *Witten I.H., Neal R.M., Cleary J.G.* Arithmetic coding for data compression // Communications of the ACM. — 1987. — 30. — No 6. — P.520-540.

Надійшла до редколегії 24.05.07

УДК 621.385.111, 615.014.075

Іванюта О.М., канд. фіз.-мат. наук,
Прокопенко О.В., канд. фіз.-мат. наук

НВЧ аналізатор біоактивних рідин

Розглянуто порівняльні вимірювання діелектричної проникності рідин з великими втратами в НВЧ-діапазоні за допомогою резонатора поверхневої хвилі в прямокутному хвилеводі.

На основі результатів вимірювань водневих розчинів показано, що високі чутливість і роздільна здатність ($\Delta\epsilon/\epsilon = 10^{-2} - 10^{-3}$) НВЧ аналізатора можуть дозволити застосовувати його для дослідження структури біорідин.

Ключові слова: резонатор поверхневої електромагнітної хвилі, біоактивна рідина, власна добротність.

*E-mail: mga@mail.univ.kiev.ua, wrld@mail.univ.kiev.ua

На сучасному рівні розвитку науки і техніки переважну частину біоактивних рідин отримують шляхом хімічного синтезу та методами генної інженерії. На ендокринних виробництвах та в хімічних лабораторіях їх отримують у вигляді витяжок, що утворюються або в результаті процесів екстрагування або з максимально очищених препаратів. Ці рідини не є стійкими при збереженні та транспортуванні навіть при наявності спеціальної тари, тому, зазвичай, їх консервують шляхом розчинення або занурення в фізіологічні або хімічні розчини, засолують за допомогою хлориду натрію та охолоджують. Але навіть ці заходи не є гарантією відповідності зазначених в сертифікаті біоактивної рідини фізико-хімічних властивостей її реальним параметрам. Тому перед початком біохімічних та інших досліджень необхідно провести атестацію основних параметрів біорідини неруйнівними експрес методами [1].

В зв'язку з цим в лабораторії мікрохвильової та оптичної обробки інформації та теорії середовищ КНУ ім. Т. Шевченка вже довгий час досліджуються перспективні методики неруйнівного експресаналізу різноманітних функціональних матеріалів. У першу чергу це ті з методик, що пов'язані з використанням резонатора поверхневої електромагнітної хвилі (РПХ). Відмітимо, що об'єктами застосування такої методики можуть бути різноманітні нелінійні елементи, зокрема, джозефсонівські

Ivanyuta O. M., Ph.D.
Prokopenko O. V., Ph.D.

Microwave analyzer of bioactive fluids

Comparative measurements of dielectric permittivity of high loss fluids by the use of surface wave resonator method in rectangular waveguide are examined.

On the base of measurement results for water solutions it is shown that microwave analyzer has enough high sensitivity and discrimination ($\Delta\epsilon/\epsilon = 10^{-2} - 10^{-3}$) that are enough for application for bioactive fluids.

Key Words: surface electromagnetic wave resonator, bioactive fluid, unloaded Q-factor.

контакти, феромагнітні та сегнетоелектричні матеріали [1, 11].

Метод НВЧ - спектроскопії водних розчинів широко використовується для дослідження їх фізико-хімічної структури та найбільш слабких міжмолекулярних взаємодій. Цей метод дозволяє реєструвати зміни обертальних переходів молекул суміші, оскільки довжини хвиль обертальних ступенів вільності молекул рідини ($\lambda = 10^{-4} - 10^{-1}$ м) якраз лежать в діапазоні НВЧ. Насамперед, процеси перебудови водневих зв'язків в розчині призводять до зміни діелектричної проникності розчину та до появи дисперсії. Неповне використання можливостей НВЧ спектроскопії зараз обумовлено, в першу чергу, відсутністю широко доступної високочутливої вимірювальної апаратури [12].

В даній роботі не приводиться детальний математичний аналіз резонансних явищ та оцінка кількісних співвідношень між параметрами резонансів та відповідними електрофізичними характеристиками біорідин. Замість цього експериментально показано можливість використання високодобротного резонатора (яким може бути РПХ) для збудження характерних резонансів в біорідинах. На основі отриманих при цьому експериментальних результатів можна шляхом теоретичного розрахунку визначити діелектричну проникність (більш суворо коефіцієнт заломлення) біоактивної рідини.

Хвиеводні методи вимірювання параметрів матеріалів, які вважаються найефективнішими, в той же час мають невисоку чутливість і роздільну здатність ($\Delta\epsilon/\epsilon = 10^{-1} \div 10^{-2}$), а тому практично не можуть бути використані для дослідження біоридин. Більш чутливі спеціальні методи потребують застосування багатокамерних кювет, балансних мостів і об'ємних резонаторів, що суттєво збільшує собівартість таких досліджень [18].

Як уже було показано в попередніх роботах [11, 13], для випадку РПХ основним джерелом втрат є втрати за рахунок розсіювання енергії у стінках хвиеводу та втрати в діелектричних підкладках. В системі збудження напівхвильового РПХ в нормально з'єднаному стандартному прямокутному хвиеводі з основною хвилею коливань H_{10} , ці втрати є сталою величиною, що залежать тільки від питомого опору матеріалу, з якого виготовлені хвиеводи [2, 13].

При роботі з РПХ можна застосувати резонансну методику вимірювань фізико-хімічних властивостей біоактивних рідин, що дозволить збільшити точність вимірів на порядок. РПХ в цьому випадку буде двошаровий (трёхшаровий), оскільки рідкий діелектрик (водний розчин) повинен мати геометричний фактор, що відповідає оптимальним умовам збудження резонатора. Перший шар в такій системі являє собою метал, вкритий еталонним діелектриком, з відповідними розмірами. Еталонний діелектрик повинен мати малий тангенс кута втрат (менше ніж 10^{-4}) та достатньо велику діелектричну проникність (зазвичай 4 – 80), що дозволяє використовувати методики вимірювань за умови малих збурень. Типова конструкція такої системи представлена на рис. 1. Видно, що найбільш придатною методикою вимірювання в цьому випадку може бути методика пробного тіла.

Для випадку контролю та синтезу біоактивних рідин необхідна циркуляція розчину крізь вимірювальну комірку. В цьому випадку напівхвильовий РПХ може мати вигляд проточного капіляра з або без еталонного діелектрика, що має відповідні розміри. Цей тип вимірювальної комірки істотно змінює розподіл електромагнітного поля в хвиеводі та в резонаторі, внаслідок суттєвого збільшення співвідношення перерізів капіляру до стандартних розмірів хвиеводу ($7,2 \times 3,4 \text{ мм}^2$). Типова конструкція такої вимірювальної комірки представлена на рис. 2. Цей тип вимірювальної

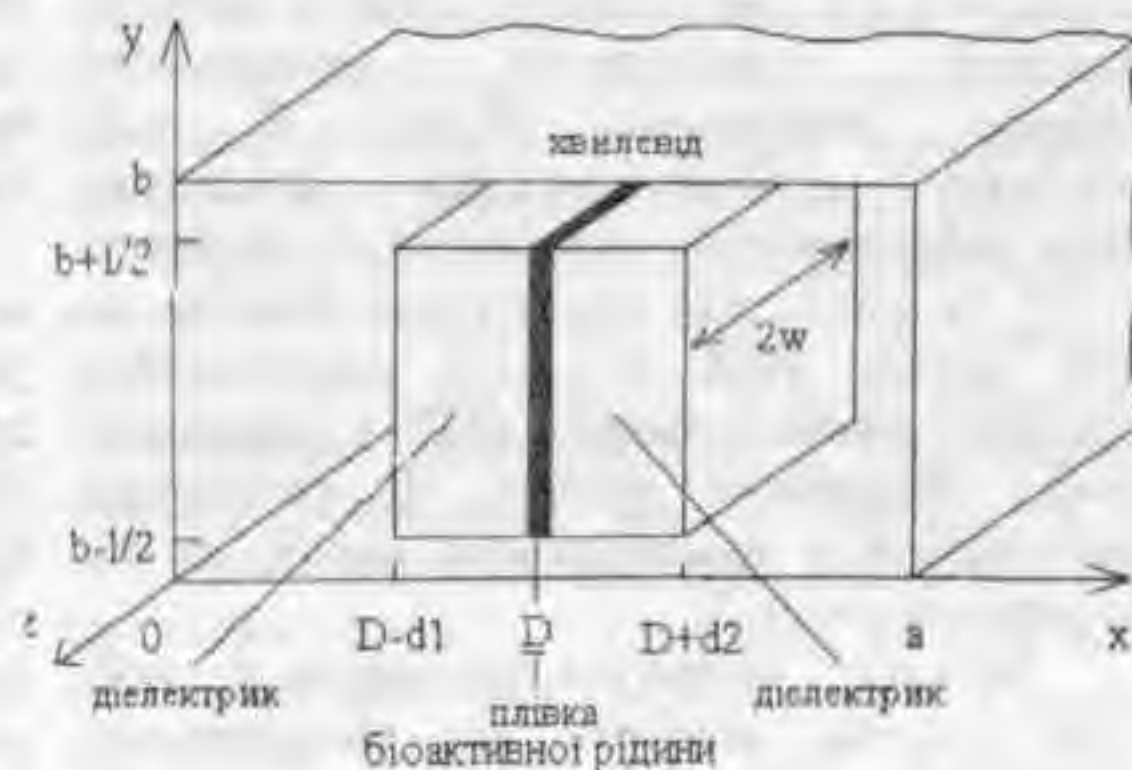


Рис. 1 Трёхшаровий напівхвильовий резонатор поверхневої електромагнітної хвилі з біоактивною рідиною.

комірки реалізує метод циліндричного стрижня, що широко використовується в подібних дослідженнях [14]. Недоліком такої системи є те, що стрижень вносить додаткові спотворення, за рахунок чого частина енергії трансформується в інші типи коливань та виходить назовні. Останнє призводить до зменшення чутливості і роздільної здатності, яка залишається на одному рівні з хвиеводними методами дослідження. Тому оптимізація умов збудження такої вимірювальної комірки потребує суттєвого вдосконалення.

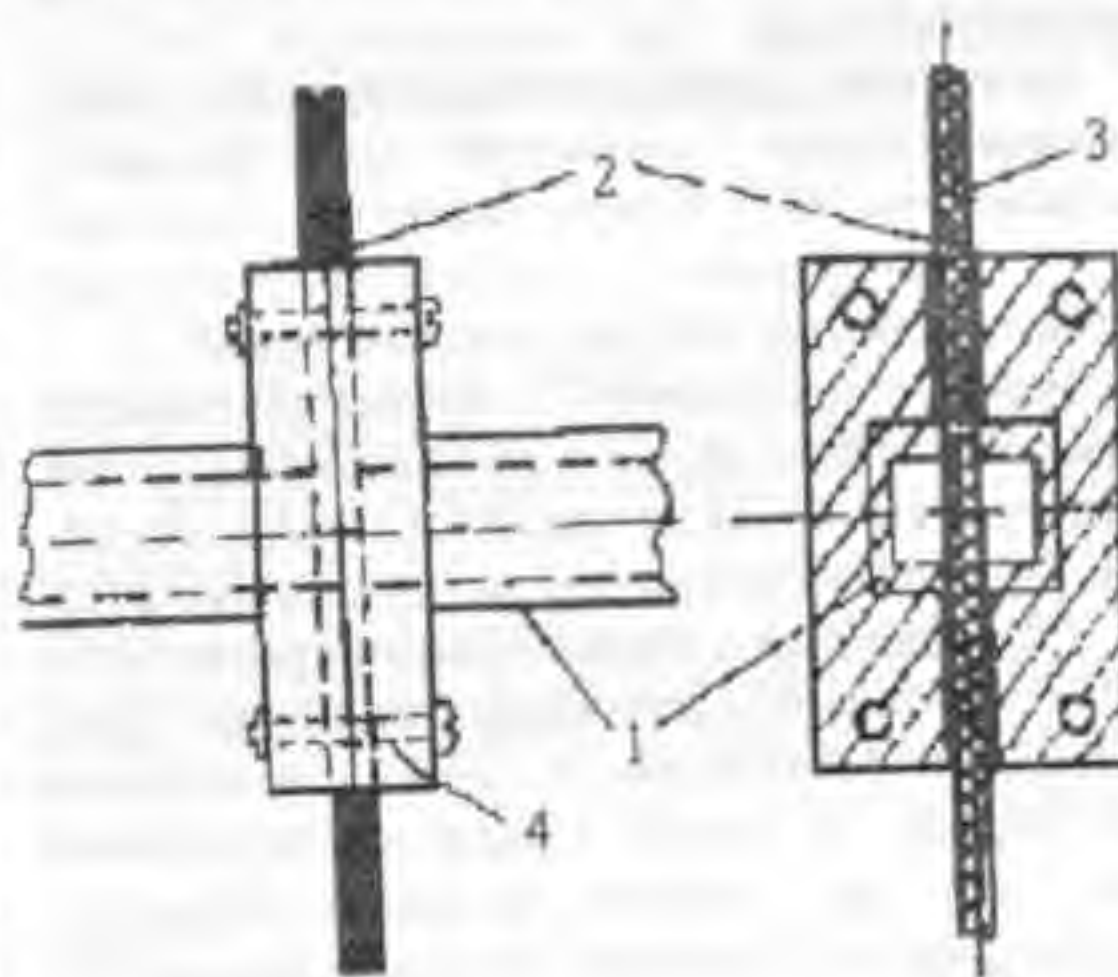


Рис. 2. Конструкція вимірювальної комірки з циркуляцією біоактивної рідини в напівхвильовому РПХ: 1 – хвиевід з перерізом $7,2 \times 3,4 \text{ мм}^2$; 2 – капіляр з кварцу; 3 – біоактивна рідина; 4 – фланцеве з'єднання.

Експериментальні дослідження проводилися в 8 - мм діапазоні довжин хвиль за допомогою стандартного панорамного скалярного вимірювача Р2 - 65. В ході вимірювань використовувалися стандартні методи рефлектометрії, ослаблення та пробного тіла [3]. За допомогою однієї з цих методик на основі методу РПХ [11, 13] вимірювалися добротності напівхвильового РПХ з нанесеною плівкою біоактивної рідини. Ці резонатори розміщувалися у вимірювальній секції, як це зображено на рис. 1, 2.

Частота і амплітуда резонансів у такій системі суттєво залежать від діелектричної проникності нанесеної рідини [4, 5]. Наприклад, було зафіксовано, що при заповненні капіляру біоактивною рідиною, виникають резонанси з власною добротністю $\sim 10^2$ і ослабленням НВЧ-сигналу до 50 дБ. В той же час при порожньому капілярі ослаблення НВЧ сигналу було досить незначне (до 1 дБ) у всьому діапазоні робочих частот Р2 - 65 (25,6 ÷ 37,9 ГГц). Зв'язок РПХ з системою збудження регулювався шляхом зміни кута нахилу α між ним та широкою стінкою прямокутного хвильоводу [1, 11]. На рис. 1 представлено випадок максимального зв'язку, тобто коли кут нахилу дорівнює 90° . Для практичного ж застосування РПХ найчастіше використовують кути $\alpha = 5^\circ \div 20^\circ$ залежно від мікрохвильових властивостей досліджуваних біоактивних рідин.

Як еталонні рідини використовувалися водні розчини спиртів з відомими діелектричними проникностями [5]. Типова залежність виміряної на експерименті амплітудно-частотної характеристики (АЧХ) представлена на рис. 3.

Набір аналогічних експериментальних характеристик був використаним для калібрування та безпосереднього знаходження геометричного фактору для напівхвильових РПХ [5 - 7]. Видно, що зміна концентрації розчинів на 0,1% призводить до зміни амплітуди НВЧ сигналу на 5 ÷ 10% або до зміни ослаблення на 0,2 ÷ 0,5 дБ. За зсувом коефіцієнта ослаблення $\Delta\alpha_{12}$ при зсуві частоти Δf можна визначити діелектричну проникність біоактивної рідини [3, 5].

На початковому етапі вимірювань, у першому наближенні, можна припустити, що частота резонансу визначається тільки дійсною частиною діелектричної проникності. Тоді експериментально виміряні АЧХ для водних розчинів з малою концентрацією етилового спирту можна нормувати на відповідні

характеристики для дистильованої води, отримані на тій же резонансній частоті, що дозволяє легко визначити діелектричну проникність розчину по відношенню до діелектричної проникності води [6, 7].

З рис. 3 видно, що при збільшенні концентрації розчину для широкого класу речовин (за рідкісним виключенням, наприклад, для речовин з «від'ємною» гідратацією [6, 7] (див. далі)) спостерігається зсув резонансної частоти Δf РПХ в бік більш високих частот з одночасним зменшення амплітуди резонансу. Для випадку малих концентрацій зсув резонансної частоти виявляється досить малим (див. рис. 3), що погіршує чутливість методу. В цьому випадку замість реєстрації малих зсувів резонансної частоти, що обумовлені зміною діелектричної проникності і відповідно концентрації розчину, зручно реєструвати значні зміни амплітуди вихідного НВЧ сигналу на обраній фіксованій частоті f . Ця методика може дозволити досягнути високої чутливості НВЧ аналізатора без залучення додаткових пристроїв та дозволить навіть при порівняно невисокій амплітудній і частотній стабільності серійних НВЧ генераторів ($10^{-3} \div 10^{-4}$) впевнено фіксувати зміни концентрації препаратів з точністю, достатньою для контролю відповідності зазначених у сертифікаті фізико-хімічних властивостей біоактивних рідин реальним параметрам рідини.

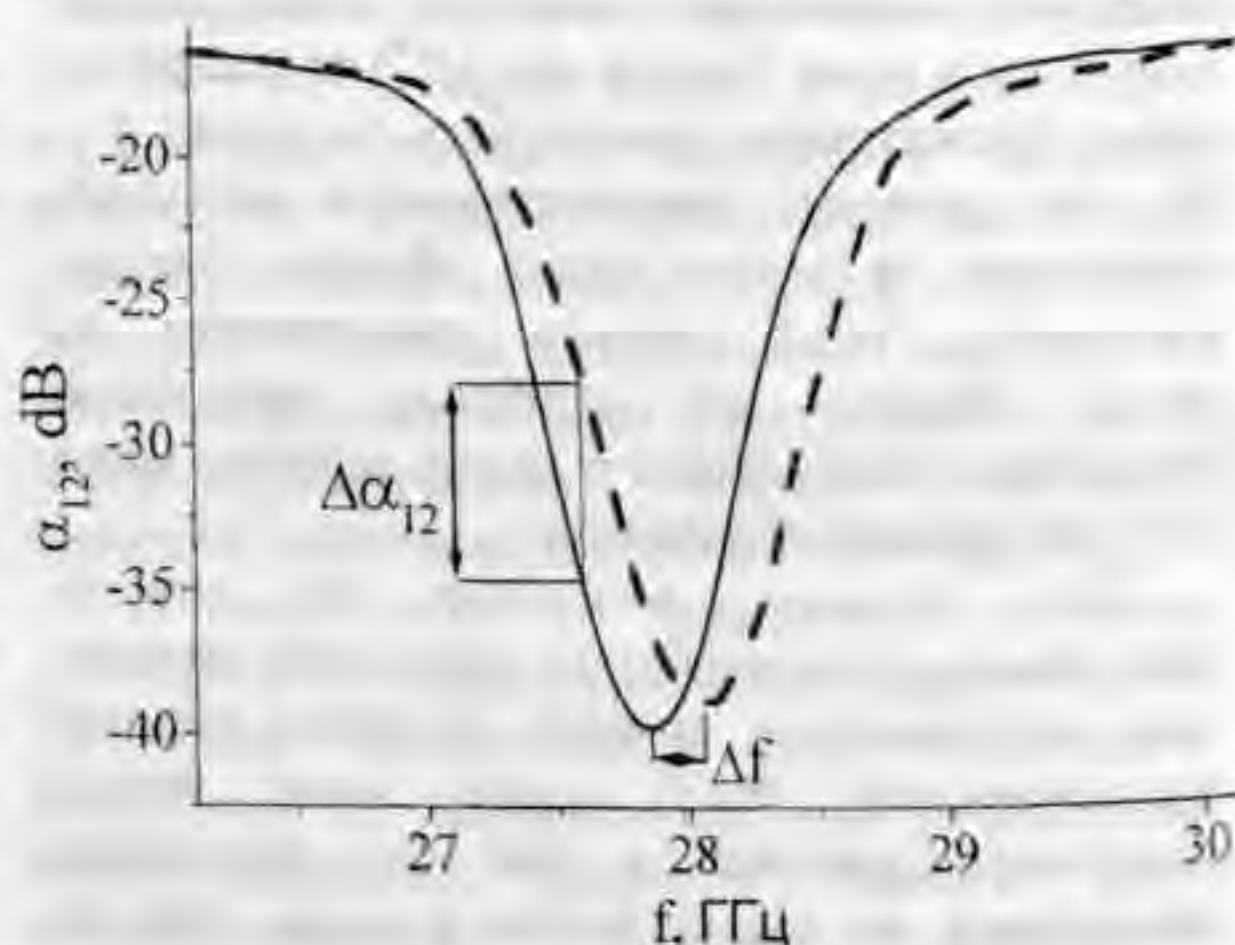


Рис. 3. Резонансне ослаблення НВЧ сигналу в вимірювальній комірці з водними розчинами етилового спирту: 1 – 10 % концентрація спирту в розчині з дистильованою водою; 2 – 12 % - концентрація спирту в розчині з дистильованою водою.

Але для застосування вище означеної методики необхідно враховувати особливості досліджуваних розчинів [1, 6 – 10]. Так в загальному випадку, наприклад, для водневих розчинів спирту (метанол, етанол, бутанол, ізопропанол) показано, що при таких методиках зміна концентрації розчину спирту на 1% призводить до зміни амплітуди вихідного сигналу на $5 \div 10\%$, а мінімальна зміна концентрації, що може бути зареєстрована, складає $0,1 \div 0,5\%$, що відповідає відносній зміні діелектричної проникності розчину $\Delta\epsilon / \epsilon \sim 10^{-2}$.

Для розчинених органічних речовин методика вимірювань ускладнюється, оскільки виникає задача попереднього дослідження ступеня ізотропності середовища [1, 6 – 8, 18]. Наприклад, рідкі кристали, потребують проведення попередньої серії вимірів для з'ясування кристалографічних напрямків органічних молекул. Для вимірюваних розчинів гідрофільних і гідрофобних органічних речовин (желатину, цукру, амінокислоти) роздільна здатність метода РПХ за концентрацією складає $0,5 \div 5\%$ залежно від кристалографічного напрямку цих молекул.

Ще однією характерною особливістю водних розчинів на основі електролітів (металів з різним знаком гідратації) є те, що НВЧ аналізатор виявляється чутливим до змін внутрішньої структури води в таких розчинах [10, 15, 16]. Так, для всіх хлоридів металів, що мають «додатній» знак гідратації, тобто, що упорядковують структуру води (Li^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Ba^{2+}), відповідні резонансні частоти зсовуються до області високих частот відносно резонансної частоти для дистильованої води, а для хлоридів металів з «від'ємним» знаком гідратації, що руйнують структуру води (K^+ , Cs^+ , Sr^+ , Rb^+), резонансні частоти навпаки зсовуються до області низьких частот. Виявлений ефект гідратації проявляється для електролітів з концентрацією $0,1 \div 5$ Моль. При більш високих концентраціях, вочевидь стає необхідно враховувати ступінь впливу електропровідності, зміни густини та інших ефектів [10 – 12] на чутливість і динамічний діапазон НВЧ аналізатора, що притаманно всім електролітам та значно ускладнює аналіз результатів дослідження.

Таким чином, вивчення вище означених особливостей водневих розчинів дозволяє перейти до питання про можливість застосування методики РПХ до досліджень, що пов'язані з біоактивними (фармакологічними) рідинами. Останні є складними, з точки зору

хімії, з'єднаннями, де фактично наявні всі вище означені особливості. Але враховуючи попередні відомості, зокрема результати еталонних вимірів, можливо визначити не тільки концентрацію розчинів, але й особливості структури молекул.

Відомо, що поверхневі електромагнітні хвилі є проявом двох ефектів – повного внутрішнього відбиття хвиль, що падають на розділ середовищ та брегівського відбивання [2, 5]. Тому можливі випадки геометрично «малого» середовища, де такі хвилі можуть не виникати, або мати великі радіаційні втрати, що ускладнює використання відповідної методики. Дисперсія хвилі в такому середовищі виникає під дією просторової неоднорідності та часової релаксації її власних параметрів. Зміна швидкості розповсюдження хвилі може викликати повну або часткову зміну спектрів для хвилі, що відбилася від поверхні біоактивної рідини. Зрозуміло, що за рахунок просторової неоднорідності та часової релаксації поверхневих електромагнітних хвиль може формуватися частотний діапазон поглинання, не сумірний з власними резонансними частотами та смугами поглинання водневих зв'язків.

Методика РПХ може бути з успіхом застосована для атестації кровозамінних з'єднань та визначення їх діелектричної проникності (рис. 4). В інтервалі малих концентрацій ($0,1 \div 5\%$) отримані нами дані співпадають з даними, відомими з літератури [1, 4, 12]. А, отже, при цих концентраціях можна застосувати методику дослідження РПХ для визначення основних властивостей біоактивних рідин

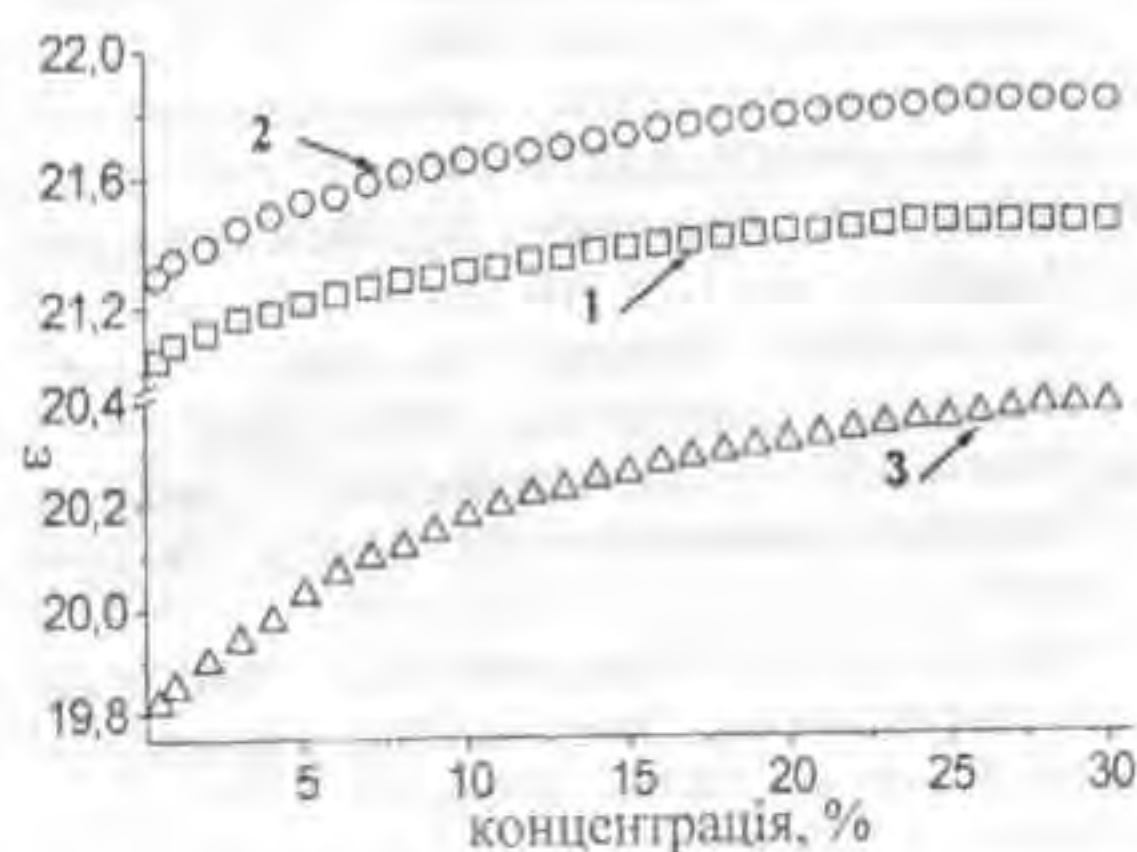


Рис. 4 Залежності діелектричної сталої для розчинів кровозамінних з'єднань від їх концентрації: 1 – α – амінокапронова кислота; 2 – трисамін; 3 – поліглюкін.

такого типу. При збільшенні концентрації кровозамінних з'єднань вже необхідно враховувати ступінь впливу інших чинників, зокрема тих, що вже були вже згадані, а також враховувати особливості розповсюдження поверхневої електромагнітної хвилі в нелінійному (багатошаровому) середовищі, яким і є, в переважній більшості, водняні розчини біоактивних молекул [8–10, 15, 16].

Таким чином, в результаті досліджень з водними розчинами встановлено, що розроблений НВЧ аналізатор дозволяє: 1) проводити порівняльні вимірювання діелектричної проникності сильно поглинаючих рідин ($\text{tg}\delta \approx 1$) з роздільною здатністю не гірше $\Delta\epsilon/\epsilon = 10^{-2} \div 10^{-3}$; 2) визначити знак і інтегральну величину гідратації в слабких водних розчинах; 3) контролювати зміни концентрації водних розчинів для широкого класу органічних речовин з роздільною здатністю не гірше $0,1 \div 1\%$. Конструкція резонансної проточної комірки і методика вимірювання за зміною амплітуди вихідного сигналу дозволяють автоматизувати процеси вимірювання. На основі цього пристрою можуть бути розроблені прилади для швидкого контролю технологічних процесів за участю біоактивних рідин, а також методи неруйнівного контролю складних матеріалів [17].

Список використаних джерел

1. Чуешов В.І., Ляпунова О.А., Сайко І.В., Рубан Е.А., Віник Л.М. Технология биологично активных веществ. – Х.: НФАУ: Золотые страницы, 2002. – 98 с.
2. Вайнштейн Л.А. Электромагнитные волны. – М.: Радио и связь, 1988. – 440 с.
3. Зайцев А.Н., Иващенко П.А., Мильников А.В. Измерения на СВЧ и их метрологическое обеспечение. Учебное пособие. – М.: Издательство стандартов, 1989. – 240 с.
4. Ахатов Я.Ю. Диэлектрические свойства бинарных растворов. – М.: Наука, 1977. – 170 с.
5. Кухаркин Е.С. Электрофизика информационных систем: Учеб. Пособие для вузов. – М.: Высш. шк., 2001. – 671 с.
6. Несынов Е.П. Живое глазами химика. – К.: Наукова думка, 1981. – 152 с.
7. Полищук В.Р. Как исследуют вещества. – М.: Наука. Гл. ред., физ.-мат. лит., 1989. – 224 с.
8. Франк-Каменецкий М.Д. Самая главная молекула. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1983. – 160 с.
9. Либерман Е.А. Живая клетка. – М.: Наука, 1982. – 160 с.
10. Силиныш Э.А., Тауре Л.Ф. Органические полупроводники. – М.: Знание, 1980. – 64 с.
11. Іванюта О.М., Кищенко Я.І., Прокопенко О.В., Ракша В.М. Система збудження джозефсонівських контактів у резонаторі поверхневої хвилі // Український фізичний журнал. – 2002. – 47, №6. – С. 592 - 593.
12. Девятков П.Д. Взаимодействие миллиметрового излучения с биологически активными соединениями и полярными жидкостями // Радиотехника и электроника. – 1978. – 23, № 9. – С. 1982.
13. Іванюта О.М., Прокопенко О.В., Ракша В.М., Ребіков А.І., Тягульский С.І. Вплив діелектричних підкладок на добротність напівхвильового резонатора поверхневої хвилі // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2002. – № 2. – С. 328 - 336.
14. Радин Ю.П. Об одном методе измерения диэлектрической проницаемости в сантиметровом диапазоне // Изд. высш. учебн. заведений. Сер. Радиофизика. – 1958. – 1, № 5-6. – С. 177.
15. Trounson A. A fluid means of stem cell generation // Nature Biotechnology. – 2007. – 25. – P. 62 - 63.
16. Trounson A. Liquid handling // Nature Biotechnology. – 2005. – 23. – P. 1445.
17. Familoni B.O., Rose J., Winders S., Ling F., Mitchell C. Bio-Impedance Measurement of Body Fluid As a Function of the Menstrual Cycle // Engineering in Medicine and Biology Society. Proceedings of the Annual International Conference of the IEEE. – 1992. – 5. – P. 1758-1759.
18. Девятков П.Д. и др. Нетепловые эффекты миллиметрового излучения // Использование мм спектроскопии для исследования межмолекулярных соединений в растворах. – М.: ИРЭ АН СССР. – 1981. – С. 137.

Надійшла до редколегії 25.05.2007

УДК 621.386

Кисіль* О.О., канд. біол. наук
Спориш І.М., аспірант

Фотоніка ДНК/ C_{60} супрамолекул в водних флюїдах для наномедицини

Визначено оптичні характеристики межі розподілу в ДНК/ C_{60} супрамолекулах, використовуючи розвинутий метод аналізу абсорбційних 200-800нм та фотолюмінесцентних 430-780нм спектрів цих супрамолекул та ДНК, C_{60} молекул у водних флюїдах. Запропоновано модель електростатичної взаємодії між ДНК та C_{60} молекулами в ДНК/ C_{60} супрамолекулі для пояснення особливостей оптичної абсорбції та фотолюмінесценції ДНК/ C_{60} супрамолекул у порівнянні з C_{60} молекулами. Виявлені особливості зумовляють використання ДНК/ C_{60} супрамолекул у наномедицині.

Ключові слова: ДНК, C_{60} супрамолекула, водний флюїд, абсорбція, фотолюмінесценція

*E-mail: lklk@univ.kiev.ua

Біосумісність фуллеренових молекул з ДНК молекулами дозволяє використати їх водні флюїди для фотодинамічної терапії та діагностики молекул у наномедицині [1, 2]. Це застосування водних флюїдів з фуллереновими молекулами визначається їх оптичними властивостями: абсорбційними та фотолюмінесцентними спектрами в ультрафіолетовому та видимому діапазонах довжин хвиль, відповідно [1-5].

В цій роботі вперше вивчено оптичні характеристики ДНК/ C_{60} супрамолекул з метою виявити вплив оточення ДНК молекулами на абсорбцію та фотолюмінесценцію фуллеренових молекул. Ці результати дозволять у подальшому визначати тип молекул ДНК та їх модифікації з оптичних характеристик ДНК/ C_{60} супрамолекул у водних флюїдах. Нами визначено оптичні характеристики межі розподілу в ДНК/ C_{60} супрамолекулах, використовуючи розвинутий метод аналізу абсорбційних (200-800)нм та фотолюмінесцентних (430-780)нм спектрів цих супрамолекул та ДНК, C_{60} молекул у водних флюїдах. Запропоновано модель електростатичної взаємодії між ДНК та C_{60} молекулами в ДНК/ C_{60} супрамолекулі для пояснення особливостей абсорбції та

Kysil* O.O., PhD
Sporysh I.M., post. grad. stud.

Photonics of DNA/ C_{60} supramolecules in aqueous fluids for nanomedicine

We provide the original information about interfacial optical characteristics of DNA/ C_{60} supramolecules using developed analysis of the absorption 200-800nm and the photoluminescence 430-780nm spectra of these supramolecules and DNA, C_{60} molecules in aqueous fluids. The model of electrostatic interaction between DNA and C_{60} molecules in DNA/ C_{60} supramolecule is proposed to explain the peculiarities of optical absorption and photoluminescence of DNA/ C_{60} supramolecules compared with C_{60} molecules. These peculiarities will allow the application of DNA/ C_{60} supramolecules in nanomedicine.

Key words: DNA, C_{60} supramolecule, aqueous fluid, absorption, photoluminescence

фотолюмінесценції ДНК/ C_{60} супрамолекул у порівнянні з C_{60} молекулами, які зумовляють їх використання в наномедицині в якості фотозондів.

Для приготування водних флюїдів змішували водні суспензії: а) іммобілізованих фуллеренів C_{60} з 2-3% кисневих та гідроксильних груп, а також з 5-11% епоксидних та кетонних груп (виготовлено з озонованих порошків нанокристалів C_{60} з домішкою 2% нанокристалів C_{70} в Хімічній лабораторії Технічного університету Ільменау, Німеччина); б) рослинних двоспіральних ДНК молекул, довжиною до 200нм.

Із спектрів абсорбції цих суспензій в діапазоні (200-400)нм розраховано концентрації ДНК при 258нм (1мМ) та C_{60} при 342нм (1мМ). Абсорбційні спектри вивчено в діапазоні (200-800)нм для цих суспензій та для водних флюїдів з різними співвідношеннями об'ємів суспензій. В результаті вибрано суміш у співвідношенні об'ємів 1:1, оскільки в її спектрі абсорбції виділяються максимуми поглинання, характерні як для ДНК, так і C_{60} молекул. На рис.1 наведено типові спектри абсорбції цієї суміші суспензій ДНК та C_{60} у водному флюїді.



Рис. 1 Типові спектри абсорбції ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді (співвідношення об'ємів відповідних суспензій – 1:1): спектр в діапазоні 200-1000нм відповідає водному флюїду після приготування; спектр в діапазоні 200-400нм - після 60 годин інкубації (наведено на вставці). Спектри апроксимовані набором Гауссін. Спектри зареєстровано при кімнатній температурі UV-vis-NIR спектрофотометром Jasco V-570.

В спектрах абсорбції ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді виявлено максимуми поблизу 260нм та 360нм, інтенсивність яких підвищується після інкубації. Положення цих максимумів є характерними для ДНК молекул [4] та C_{60} [1] (перший максимум) або для C_{60} молекул [1] (другий максимум). Тому припускаємо, що підвищення інтенсивності є свідченням формування ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді.

Базуючись на результати аналізу абсорбції ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді, вибрано діапазон довжин хвиль збуджуючого

світла для фотолюмінесцентної спектроскопії, а саме (348-425)нм. Цей діапазон довжин хвиль використано для збудження фотолюмінесценції фуллеренових молекул у ДНК/ C_{60} супрамолекулах у водному флюїді – в результаті поглинання переважно фуллереновими молекулами.

В типових фотолюмінесцентних спектрах ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді (рис.2) виявлено інтенсивну зону (430-650)нм фотолюмінесценції при довжинах хвиль збуджуючого світла 348, 396 та 408нм (відповідно криві а, б, в на лівому рисунку).

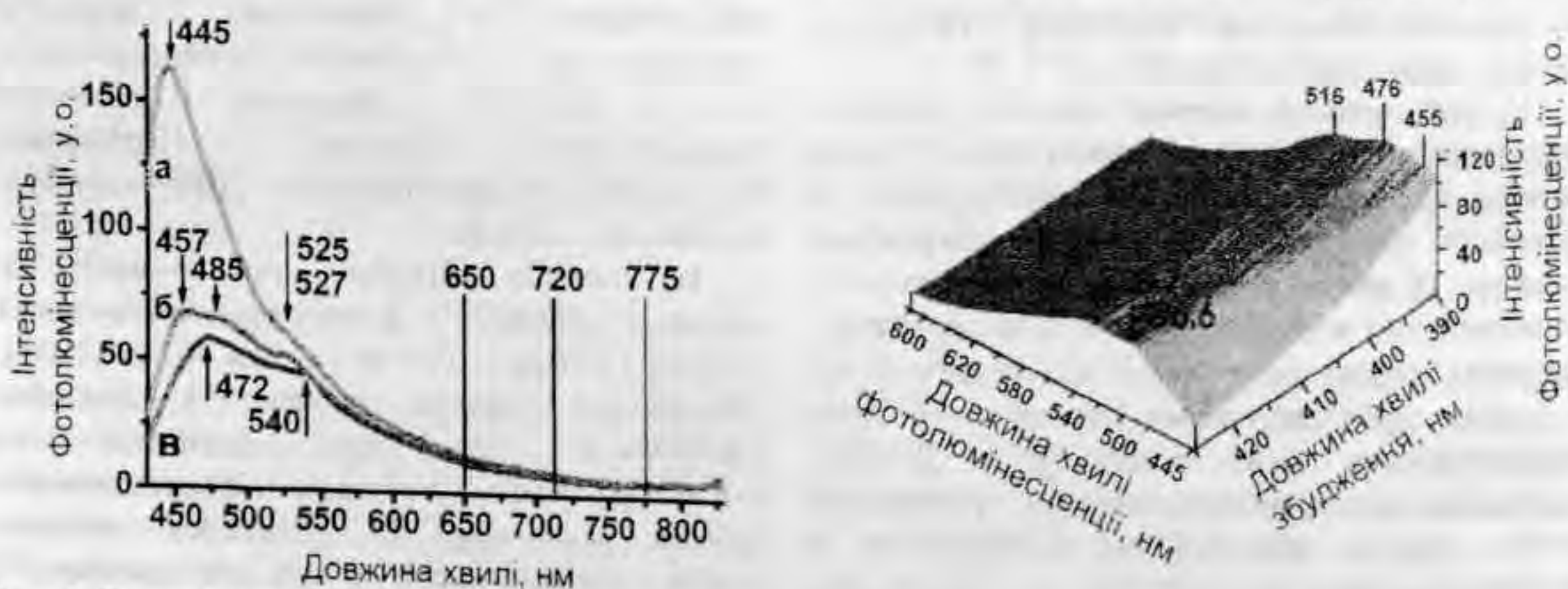


Рис. 2 Типові фотолюмінесцентні спектри ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді, зареєстровані при довжинах хвиль збуджуючого світла 348, 396 та 408нм (лівий рисунок, відповідно криві а, б, в) та набір фотолюмінесцентних спектрів, зареєстрованих при довжинах хвиль збуджуючого світла в діапазоні 390-425нм з інтервалом 6нм (правий рисунок, трьохвимірне зображення, довжина хвилі фотолюмінесценції – довжина хвилі збуджуючого світла – інтенсивність фотолюмінесценції). Спектри зареєстровано при кімнатній температурі спектрофотометром Perkin Elmer LS 55.

У цій фотолюмінесцентній зоні при довжинах хвиль збуджуючого світла 396 та 408 нм розпізнаються максимуми при 457, 485, 527 нм та 472, 540 нм, відповідно.

Вивчення фотолюмінесценції у цій зоні при довжинах хвиль збуджуючого світла в діапазоні (390-425) нм з інтервалом 6 нм підтвердило існування двох та трьох максимумів у спектрах. Положення цих максимумів при 497, 524 нм та 455, 476, 516 нм визначено для довжин хвиль збуджуючого світла 425 нм та 390 нм, відповідно (рис. 2, правий).

У зоні (430-650) нм виділено підзону (430-550) нм, в якій є максимум, центрований при 445 нм, тільки при довжині хвилі збуджуючого світла 348 нм (рис. 2, лівий).

Інтерпретація виявлених особливостей у спектрах фотолюмінесценції ДНК/ C_{60} супрамолекул при різних довжинах хвиль збуджуючого світла зроблено виходячи зі спектрів поглинання збуджуючого світла (рис. 1): C_{60} молекулами, на межі розподілу C_{60} – молекули води (348-425 нм); на межі розподілу ДНК – молекули води (348 нм) та на межі розподілу ДНК – C_{60} (348-420 нм) при електростатичній взаємодії між цими молекулами [4]. Тоді можемо припустити, що інтенсивна фотолюмінесценція в діапазоні (430-550) нм обумовлена фотолюмінесценцією на межі розподілу ДНК – молекули води (максимум при 445 нм), C_{60} – молекули води та ДНК – C_{60} в супрамолекулі (максимум при 540 нм, збудження при 408 нм, що відповідає абсорбції не іммобілізованих C_{60} [1] та максимум при 527 нм,

збудження при 390 нм, що відповідає поглинанню іммобілізованих C_{60} (рис. 1).

Для виявлення максимумів у фотолюмінесцентних спектрах, які зумовлені фотолюмінесценцією фуллеренів, на спектрах а, б, в для ДНК/ C_{60} супрамолекул позначено відомі з літератури положення максимумів при 650, 720, 775 нм для фотолюмінесценції: C_{60} , іммобілізованого кисневими групами, – 650 нм, з відповідним значенням 1.9 eV для енергетичного переходу між вищими заповненими (HOMO) та нижчими незаповненими (LUMO) молекулярними орбіталями; не іммобілізованого C_{60} – 720 нм, з відповідним значенням 1.7 eV для енергетичного переходу HOMO-LUMO; C_{70} – 775 нм, з відповідним значенням 1.6 eV для енергетичного переходу HOMO-LUMO [1, 2, 3]. Проте ці максимуми в а, б, в спектрах не розпізнано. Цей аналіз дозволяє стверджувати, що в досліджуваному водному флюїді відсутні фуллеренові молекули C_{60} , які не утворюють ДНК/ C_{60} супрамолекул. Тому, для ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді виділено характерні максимуми у фотолюмінесцентних спектрах при 525, 527 та 540 нм (відповідно криві а, б, в), які відповідають фотолюмінесценції за участю енергетичних рівнів іммобілізованої поверхні фуллерену на межі з ДНК молекулою.

Для підтвердження цих висновків вивчено фотолюмінесцентні спектри іммобілізованих кисневими групами фуллеренів C_{60} (0.5 мМ) та ДНК молекул (0.5 мМ) у водних флюїдах, які представлено на рис. 3 та рис. 4, відповідно.

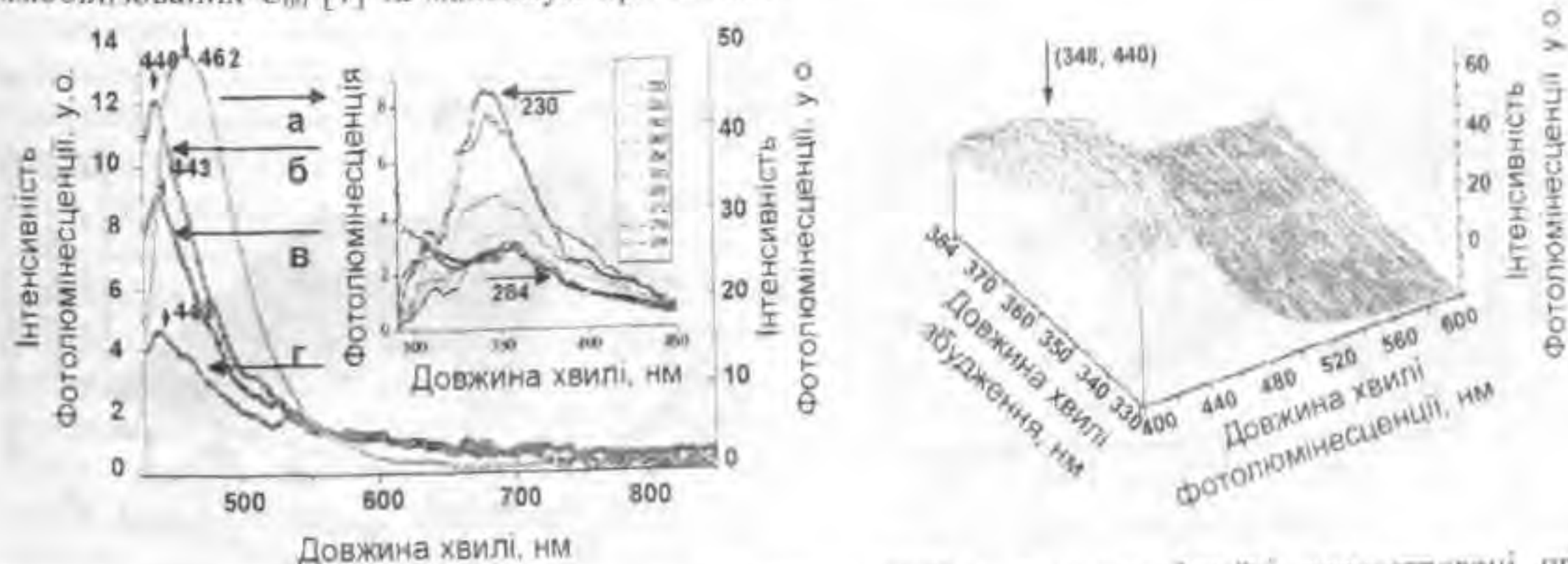


Рис. 3 Типові фотолюмінесцентні спектри молекул ДНК у водному флюїді, зареєстровані при довжинах хвиль збуджуючого світла 348, 388, 394 та 408 нм (лівий рисунок, відповідно криві а, б, в, г) та набір фотолюмінесцентних спектрів, зареєстрованих при довжинах хвиль збуджуючого світла в діапазоні 330-384 нм з інтервалом 6 нм (правий рисунок, трьохвимірне зображення, довжина хвилі збуджуючого світла – довжина хвилі фотолюмінесценції – інтенсивність фотолюмінесценції). На вставці до лівого рисунка представлено фотолюмінесцентні спектри при довжинах хвиль збуджуючого світла 230-284 нм (позначено стрілками) з інтервалом 6 нм. Спектри зареєстровано при кімнатній температурі спектрофотометром Perkin Elmer LS 55.

Як видно з рис.3, типові фотолюмінесцентні спектри ДНК молекул у водному флюїді мають зону (430-550)нм, з максимумами при 462, 440, 443 та 443нм при довжинах хвиль збуджуючого світла 348, 388, 394 та 408 нм відповідно (криві а, б, в, г, відповідно, на лівому рисунку). Визначена зона виявлена також при довжинах хвиль збуджуючого світла в діапазоні (330-384)нм (рис.3, правий).

Оскільки ДНК молекула не поглинає збуджуюче світло в цьому діапазоні довжин хвиль, припускаємо, що виявлені максимуми в фотолюмінесцентних спектрах обумовлені фотолюмінесценцією на межі розподілу ДНК – молекули води, а також на межі розподілу між двоспіральними ДНК молекулами, при поглинанні світла (348-408)нм. Підтвердженням цієї моделі є набір фотолюмінесцентних спектрів ДНК молекул у водному флюїді при довжинах хвиль збуджуючого світла (230-284)нм, яке поглинається молекулами ДНК. У цих спектрах виявлено зону фотолюмінесценції (300-410)нм з максимумом при 350нм, положення якого відрізняється від положення максимуму (440-462)нм фотолюмінесценції при довжинах хвиль збуджуючого світла (348-408)нм, яке не поглинається ДНК молекулами.

В типовому фотолюмінесцентному спектрі іммобілізованих кисневими групами молекул C_{60} у водному флюїді при довжині хвилі збуджуючого світла 348нм виявлено фотолюмінесцентну зону (430-700)нм з максимумом при 455нм (рис.4, лівий).

Аналогічна фотолюмінесцентна зона також є в спектрах для ДНК/ C_{60} супрамолекул – (430-550)нм з інтенсивним максимумом при 445нм (рис.2, лівий) та в спектрах для ДНК молекул – (430-600)нм з максимумом при 462нм (рис.3, лівий) при довжині хвилі збуджуючого світла 348нм для обох спектрів.

Для ДНК/ C_{60} супрамолекул у водних флюїдах при довжині хвилі 348нм світло, яке поглинається (рис.1) на межі розподілу ДНК – молекули води [4], C_{60} – молекули води [1] та ДНК – C_{60} молекули, збуджує фотолюмінесценцію з максимальною інтенсивністю в діапазоні (430-550)нм (рис.2, лівий). Ця фотолюмінесценція складається з фотолюмінесцентних спектрів цих меж розподілу, проте положення максимуму цієї зони має визначатися більш інтенсивною фотолюмінесценцією ДНК молекул у водному флюїді (рис.3, лівий) в порівнянні з фотолюмінесценцією молекул C_{60} у водному флюїді (рис.3, лівий) та фотолюмінесценцією на межі розподілу між поверхнею іммобілізованої кисневими групами C_{60} та фосфатними групами молекули ДНК [5]. Поглинання світла з довжиною хвилі 348нм не іммобілізованими та іммобілізованими молекулами фуллеренів, як відомо, збуджує фотолюмінесценцію в діапазоні (600-800)нм.

Відзначимо, що для C_{60} молекул у фотолюмінесцентній зоні (430-700)нм помічено слабкі максимуми при 468 та 539нм, які відповідають максимумам при 472 та 540нм

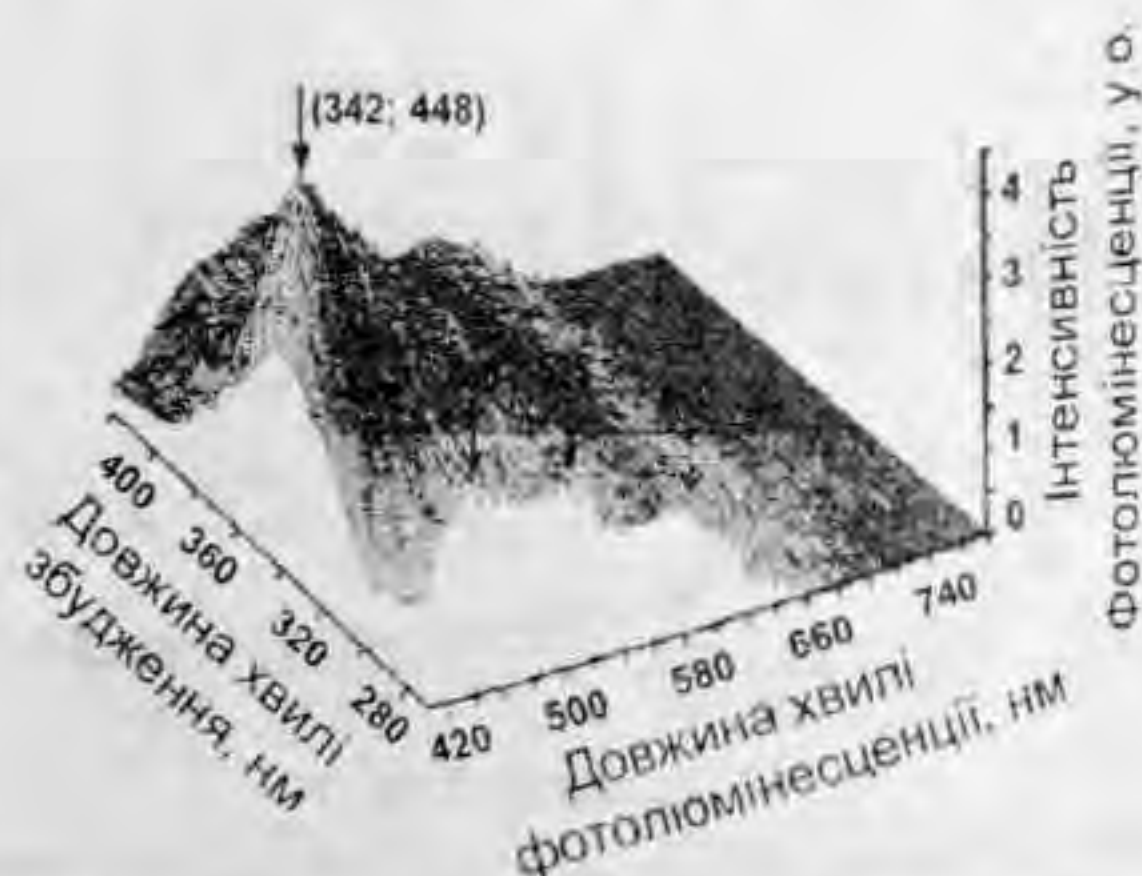


Рис. 4 Типові фотолюмінесцентні спектри іммобілізованих кисневими групами C_{60} молекул у водному флюїді, зареєстровані при довжинах хвиль збуджуючого світла 348, 394 та 408нм (лівий рисунок, відповідно криві а, б, в) та набір фотолюмінесцентних спектрів, зареєстрованих при довжинах хвиль збуджуючого світла в діапазоні 270-420нм з інтервалом 6нм (правий рисунок, трьохвимірне зображення, довжина хвилі збуджуючого світла – довжина хвилі фотолюмінесценції – інтенсивність фотолюмінесценції). Спектри зареєстровано при кімнатній температурі спектрофотометром Perkin Elmer LS 55.

в спектрах для ДНК/ C_{60} супрамолекул при довжині хвилі збуджуючого світла 408нм. Тобто, ці фотолюмінесцентні максимуми зумовлені фотолюмінесценцією на межі розподілу C_{60} – молекули води, а запропонована раніше інтерпретація як фотолюмінесценції на межі розподілу ДНК – C_{60} молекули не підтверджується.

Наявність іммобілізованих кисневими групами C_{60} молекул підтверджує додатковий максимум при 629нм для C_{60} молекул у водному флюїді (рис.4, лівий), який інтерпретуємо як фотолюмінесценцію іммобілізованих молекул C_{60} [5], оскільки фотолюмінесценцію не іммобілізованого C_{60} при 720нм не зареєстровано (рис.4, лівий). Проаналізовані особливості фотолюмінесцентних спектрів іммобілізованих C_{60} молекул підтверджено в діапазоні довжин хвиль збуджуючого світла (270-420)нм, що демонструє рис.4 (правий).

Проведений в роботі аналіз оптичних спектрів поглинання та фотолюмінесценції ДНК/ C_{60} супрамолекул у водному флюїді з оптимізованим складом (змішані водні суспензії іммобілізованих фуллеренів C_{60} з 2-3% кисневих, гідроксильних груп, а також з 5-11% епоксидних, кетонних груп та ДНК молекул у співвідношенні об'ємів 1:1) дозволив виявити особливості в спектрах поглинання (200-800)нм та фотолюмінесценції (430-780)нм у порівнянні зі спектрами цих окремих молекул:

- підвищення інтенсивності поглинання в зоні (350-700)нм за рахунок нових підзон поглинання, зумовлених електронними переходами між поверхнею C_{60} , іммобілізованою кисневими групами, та фосфатними групами молекули ДНК [5];

- інтенсивну червоно-блакитну фотолюмінесценцію ДНК/ C_{60} супрамолекул в діапазоні (425-650)нм, інтенсивність якої значно зростає, порівняно з інтенсивністю фотолюмінесцентних спектрів цих окремих молекул. На формування ДНК/ C_{60} супрамолекул вказує фотолюмінесцентний максимум при 445нм (довжина хвилі збудження 348нм), що свідчить про електростатичну взаємодію між іммобілізованими кисневими групами молекулами C_{60} та фосфатними групами молекули ДНК.

Автори вдячні науковим співробітникам Хімічної лабораторії Інституту фізики Технічного університету Ільменау, Німеччина, за виготовлення зразків, а також науковим

співробітникам Лабораторії факультету наук про матеріали Московського державного університету ім. М.В. Ломоносова, Росія, за допомогу у вивченні спектрофотометра Perkin Elmer LS 55 та наукові консультації.

Дослідження виконані при фінансовій підтримці Київського національного університету імені Тараса Шевченка для виробничої практики Спориш І.М. у Московському державному університеті ім. М.В. Ломоносова та Німецької служби академічних обмінів Спориш І.М. (Стипендійна програма Леонарда Ейлера для навчання та науково-дослідної роботи, 2006-2007), Кисіль О.О. (Наукова стипендія для аспірантів та молодих науковців, 2006-2007).

Список використаних джерел

1. Scharff P., Siegmund C., Risch K., Lysko I., Lysko O., Zhrebetsky D., Ivanisik A., Gorchinskiy A., Buzaneva E. Characterization of Water-Soluble Fullerene C_{60} Oxygen and Hydroxyl Group Derivatives for Photosensitizer // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2005. – 13, supplementary 1. – P. 497-509.
2. Vilenko B., Sienkiewicz A., Lekka M., Kulik A., Forro L. In vitro assay of singlet oxygen generation in the presence of water-soluble derivatives of C_{60} // Carbon – 2004. – 42, № 5-6. – P. 1195-1198.
3. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены // Успехи Физических Наук. – 1993. – 163, № 2. – С. 33-60.
4. Спориш И.М., Белеля О.П., Фролов В.В., Кисиль Е.А. Оптическая спектроскопия и циклическая вольтамметрия фуллеренов C_{60} и ДНК в нанофлуиде для тестирования молекулярного фото зонда // Тезисы док. Межд. конф. “Ломоносов 2007”, секция “Физика”. – Москва: Изд-во физического факультета МГУ. – 2007. – 1. – P. 30-31.
5. Sporysh I., Belelia O., Zhrebetsky D., Kysil O., Ivanyuta O., Erb T., Gobsch G., Weber L., Carta-Abelmann L., Ritter U., Scharff P. DNA-templated C_{60} , C_{70} derivatives in aqueous suspensions and on substrates: the route to design of fullerene nanophotoprobe in visible range // Abstract book of Ukrainian-German Symposium on Nanobiotechnology “Current State and Future Prospects for Cooperation” Kyiv, Ukraine. – 2006. – P. 144.

Надійшла до редакції 17.09.2007

УДК 534.84, 519.25, 616-073

Кононов М. В., канд. фіз.-мат. наук, доцент;
Радченко С. П., канд. фіз.-мат. наук, доцент;
Скрипаченко З. М., асп.; Айдоян Г. В., асп.

Застосування оцінок флуктуаційного розсіювання ультразвукових хвиль для класифікації статистично-неоднорідних середовищ

В роботі використано статистичне оцінювання для опису флуктуаційного розсіювання ультразвукових хвиль у статистично-неоднорідних середовищах, зокрема, у біологічних тканинах. В основу покладено залежності, отримані за допомогою математичного та фізичного моделювання процесів розсіювання ультразвукових хвиль такими середовищами. На основі вибраної моделі дискретних розсіювачів, параметри відгуку від якої мають K -розподіл та розподіл Накагамі, вивчено чутливість реконструйованих параметрів до зміни фізичних характеристик середовища. У роботі показано можливість застосування розробленого алгоритму реконструкції карт параметрів для класифікації та ідентифікації середовища.

Ключові слова: флуктуаційне розсіювання, статистична неоднорідність, реконструкція моментів, K -розподіл, розподіл Накагамі.

*e-mail: zoya@univ.kiev.ua

Методи і матеріали

Класифікація статистично-неоднорідних середовищ за інтроскопічними даними повинна враховувати процеси в імпульсних системах ультразвукового сканування. Одними із основних механізмів формування сигналу відлуння в таких середовищах є процеси розсіювання. Тому для зворотних задач реконструкції інтроскопічних зображень найбільш адекватною фізичною моделлю формування акустичного сигналу відгуку є подання статистично-неоднорідних середовищ у вигляді набору дискретних розсіювачів [1].

За основу опису взято модель дискретних розсіювачів з випадковими параметрами. Сигнал відлуння, отриманий від такої системи, має випадкову складову. Залежно від характеристик системи густина ймовірності амплітуди і фази сигналу відлуння підкоряється

Kononov M. V., Ph. D., associate professor;
Radchenko S. P., Ph. D., associate professor;
Skrypachenko Z. M., post grad. stud.;
Aydoyan G.V., post grad. stud..

Ultrasonic Backscattering Estimation Applied to Statistically Heterogeneous Medium Classification

The statistical estimation for ultrasonic backscattering description in heterogeneous media, especially biological tissues, was used. Dependencies obtained from mathematical and physical simulations of ultrasonic backscattering were used for this purpose. The reconstructed parameters sensitivity to medium physical characteristics has been studied on the basis of the point scatterers model with K and Nakagami distributions echo parameters. The usage possibility of worked out maps parameters reconstruction algorithm for medium classification and identification was demonstrated in this paper.

Key Words: statistically heterogeneous medium, moment of distribution, scattering, K -distribution, Nakagami distribution.

двопараметричному K -розподілу та розподілу Накагамі [3]. Статистичні методи оцінювання використані для відновлення параметрів розподілів. Зокрема, параметр K -розподілу M та параметр моделі Накагамі M/N , які відіграють роль ефективної густини розсіювачів і визначають розсіювальну здатність системи з врахуванням кількості розсіювачів та їх розмірів [3]. Крім параметрів моделі було перевірено можливість застосування співвідношення сигнал/шум SNR_v , розрахованого з використанням моментів дробових порядків $v < 1$, для класифікації статистично-неоднорідних середовищ [4, 5].

Методами математичного моделювання проведено розрахунок чисельних параметрів для ідентифікації різних станів розсіюючого середовища, зокрема, біологічної тканини. Фізичне моделювання застосовано для перевірки

теоретичних розрахунків [4].

Моделювання

Формування сигналу відлуння моделювалося як випадковий процес з функцією розподілу густини ймовірності К-розподілу $f(\alpha) = [2b/\Gamma(v+1)(b/2\alpha)^{v+1}K_v(b\alpha)]$ за допомогою пакету програмного забезпечення Matlab. Виміри проведено на створеному фантомі із акустичними характеристиками, близькими до м'яких тканин. Центри розсіювання відігравали дрібні частинки корунду $\alpha - Al_2O_3$ і карбіду кремнію SiC (середній розмір поперечного перерізу $- 36 \cdot 10^{-3} \text{ мм}^2$). Експериментальні дані знімалися з частотою дискретизації 25 МГц імпульсним методом на відбивання (частота несучої 257 кГц) за допомогою осцилографа PCS500. Відмінність гістограм амплітуди змодельованих та експериментально виміряних сигналів, наведених на рис. 1, пояснюється відхиленням параметрів фантому від характеристик розсіюючого середовища теоретичної моделі, зокрема, не було забезпечено сферичність форм розсіювачів у фантомі.

Реконструкція параметрів моделі M і b за характеристиками сигналу відлуння на основі К-розподілу [6] дозволяє проводити ідентифікацію та класифікацію статистично-неоднорідних середовищ за ультразвуковими зображеннями.

Вплив параметрів моделі, а саме умов розсіювання, на співвідношення сигнал-шум використано для пошуку додаткових чисельних характеристик. Теоретично розрахована і експериментально досліджена залежність співвідношення сигнал-шум SNR від ефективної густини елементарних розсіювачів. Отримано, що SNR є гарною чисельною мірою кількості розсіювачів, а його абсолютне значення змінюється в діапазоні від 0 до 1.91. Максимальне значення відповідає випадку дуже великої кількості розсіювачів в елементарній комірці [5] (SNR для релеївського розсіювання рис. 2 а, б). Однак такий вузький діапазон змін SNR , який відповідає різним станам тканин, не дозволяє проводити розпізнавання станів біологічних тканин із статистично значимою відмінністю результатів.

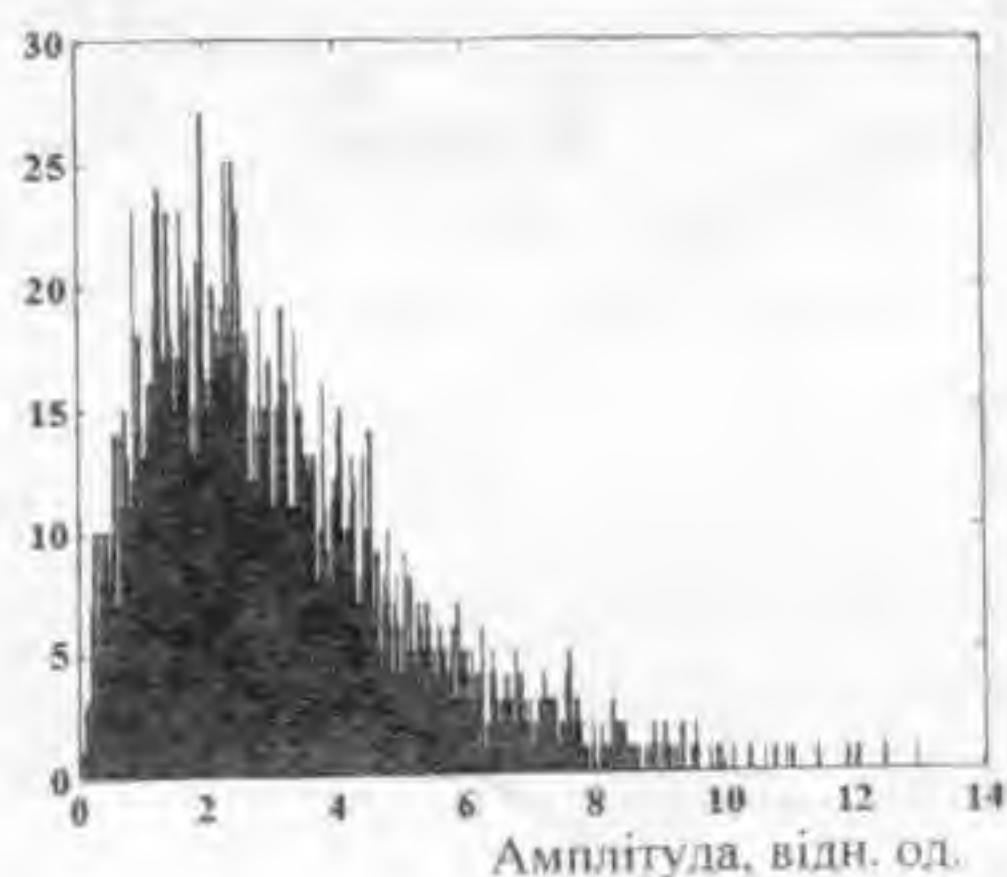
Для підвищення чутливості параметра SNR використано моменти E_v дробових порядків, для яких $v < 1$. Співвідношення SNR_v розраховувалось за формулою:

$$SNR_v = \frac{E(A^v)}{\sqrt{E(A^{2v}) - E^2(A^v)}}$$

З урахуванням виразів для моментів К-розподілу формула набуває вигляду

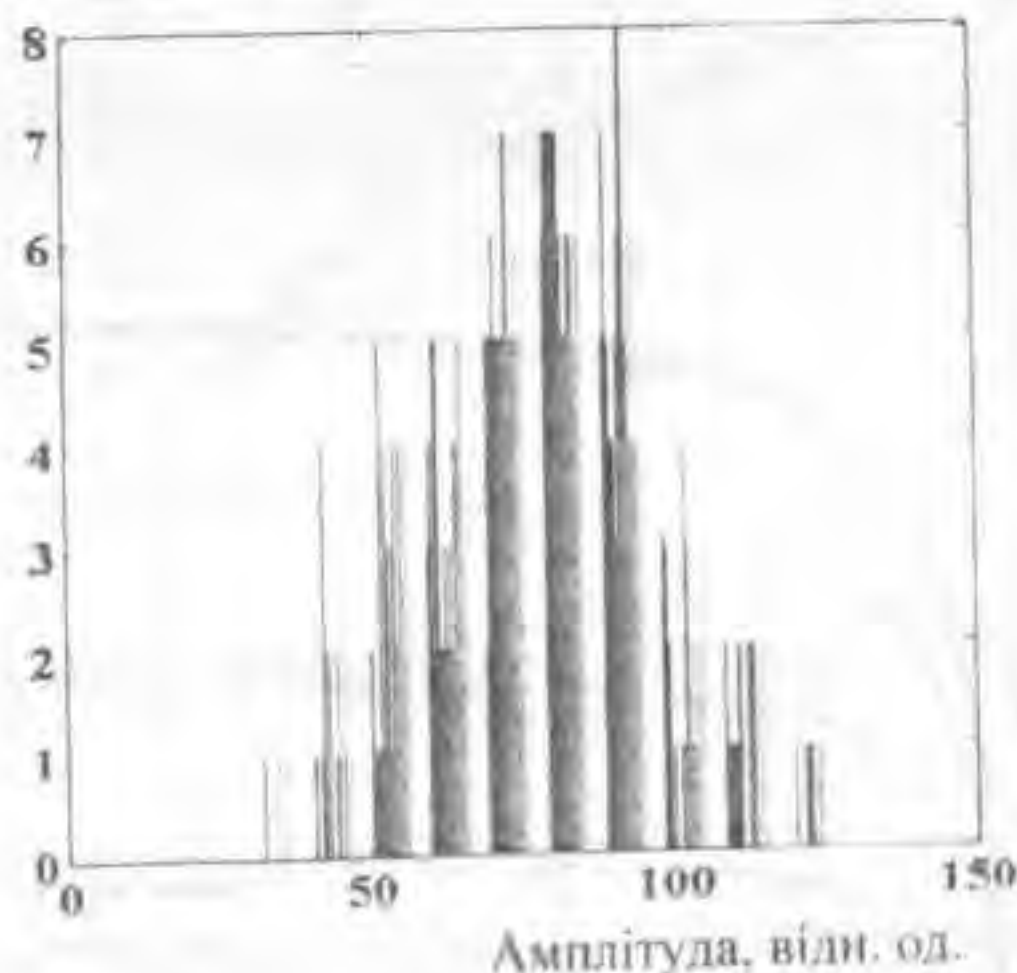
$$SNR_v = \frac{\Gamma(1+v/2)\Gamma(M+v/2)}{\sqrt{\Gamma(1+v)\Gamma(M+v)\Gamma(M) - \Gamma^2(1+v/2)\Gamma^2(M+v/2)}}$$

Частота, відн. од.



а)

Частота, відн. од.



б)

Рис. 1. Гістограми амплітуди розсіяного випромінювання: а) математичне моделювання при $M = 3$, $b = 1$; б) фізичний експеримент при концентрації розсіювачів $3.25 \cdot 10^8 \text{ м}^{-3}$

Результати розрахунків SNR_v з використанням моментів порядків $v = 0.23; 0.33$ та 0.5 наведені на рис. 2 в.

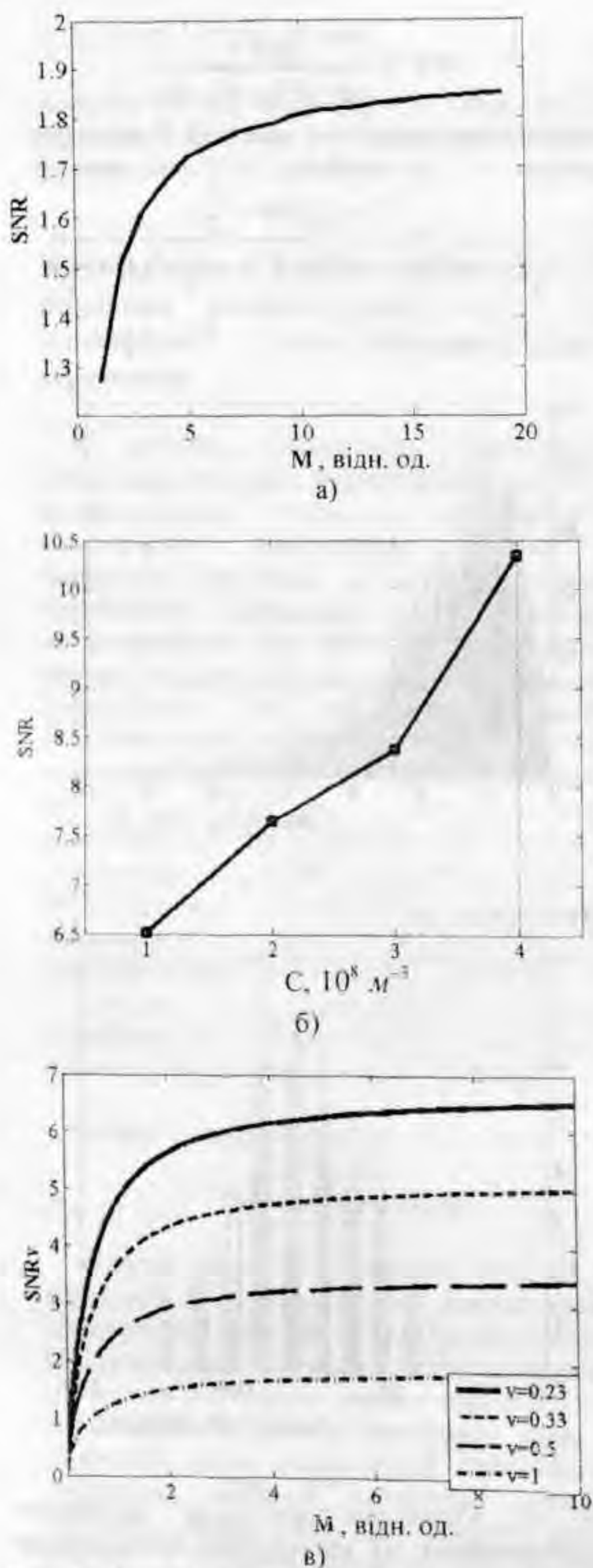


Рис. 2. Залежність SNR від ефективної густини розсіювачів M а) значення SNR , розраховані із використанням змодельованих даних; б) значення SNR , розраховані для фантому біологічних тканин для 4-х концентрацій розсіювачів; в) значення SNR_v , розраховані з використанням теоретичних формул для трьох

різних значень порядків моментів $\nu = 0.23; 0.33$ та 0.5

Як видно рис. 2 в, діапазон зміни SNR_v значно більший, ніж для SNR . Таким чином, SNR_v є кращою числовою мірою змін умов розсіювання і може бути використано для класифікації розсіюючого середовища поряд із параметрами моделі К-розподілу M та b та параметра моделі Накагамі M_N .

Методика реконструкції параметрів моделей

Амплітуда розсіяного випромінювання, що реєструється приймачем, є результатом суперпозиції хвиль, розсіяних на неоднорідностях середовища. Вона несе у собі інформацію про фізичні характеристики неоднорідностей середовища, зокрема їх кількість, площу поперечного перерізу, стисливість, густину та розподіл розсіювачів в елементарній комірці. На ультразвукових інтроскопічних зображеннях в В-режимах всі ці характеристики передаються за допомогою яскравості кожного з пікселів. Безпосереднє визначення характеристик середовища за ультразвуковими зображеннями є складною та суб'єктивною задачею. З метою зменшення суб'єктивності такої оцінки та введення чисельних параметрів для характеристики статистично-неоднорідних середовищ запропоновано методику відновлення чисельних параметрів моделі дискретних розсіювачів та побудови їх карт розподілу [4].

Для розробки алгоритму відновлення параметра К-розподілу M та параметра моделі Накагамі M_N , які відіграють роль ефективної густини розсіювачів і визначають розсіювальну здатність системи з урахуванням кількості розсіювачів та діапазону змін їх розмірів, та побудови їх карт використано залежності між моментами [3]:

$$M = \frac{2}{(r_4 - 2)}, \quad r_{2m} = \frac{E(R^{2m})}{(E(R^2))^m}.$$

$$M_N = \frac{[E(R^2)]^2}{E[R^2 - E(R^2)]^2}, \quad \text{де } E(R^m) - \text{момент розподілу } m\text{-го порядку.}$$

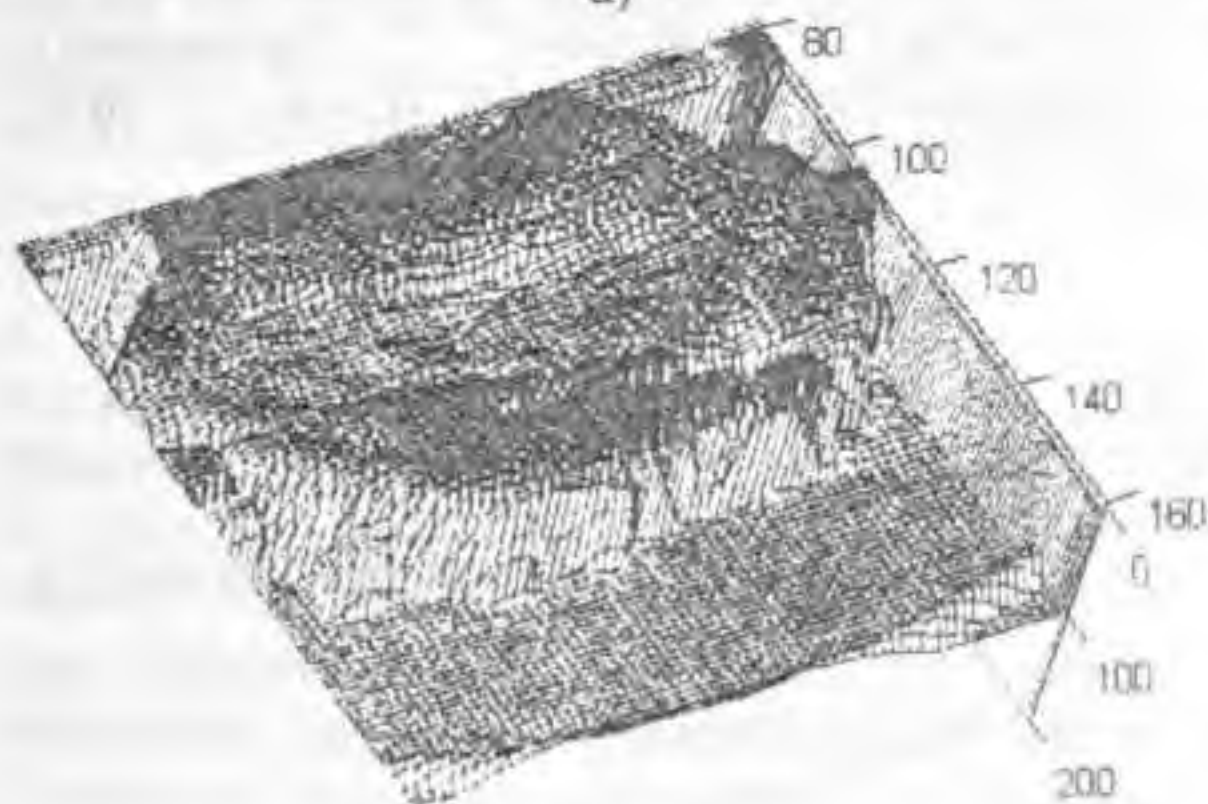
Біологічні тканини розглядалися статистично-неоднорідним середовищем. Для статистичного оцінювання взято ультразвукові зображення тканини щитовидної залози.

Структурно-функціональними одиницями паренхіми щитовидної залози є фолікули – замкнуті кулеподібні утворення з порожниною всередині. Їх середній розмір становить близько 40-50 мкм і може змінюватись від стану тканини (форми захворювання). Величину параметрів M та M_N було пов'язано зі зміною розмірів фолікул та їх кількості при різного роду захворюваннях, оскільки їх кількість та середній розмір змінюються від стану тканини у декілька разів [2].

Реконструйовані за розробленою методикою відновлення чисельних параметрів моделі дискретних розсіювачів карти поряд із ультразвуковими зображення, отриманими у В-режимі, несуть додаткову інформацію про середовище, що досліджується (рис. 3).



а)



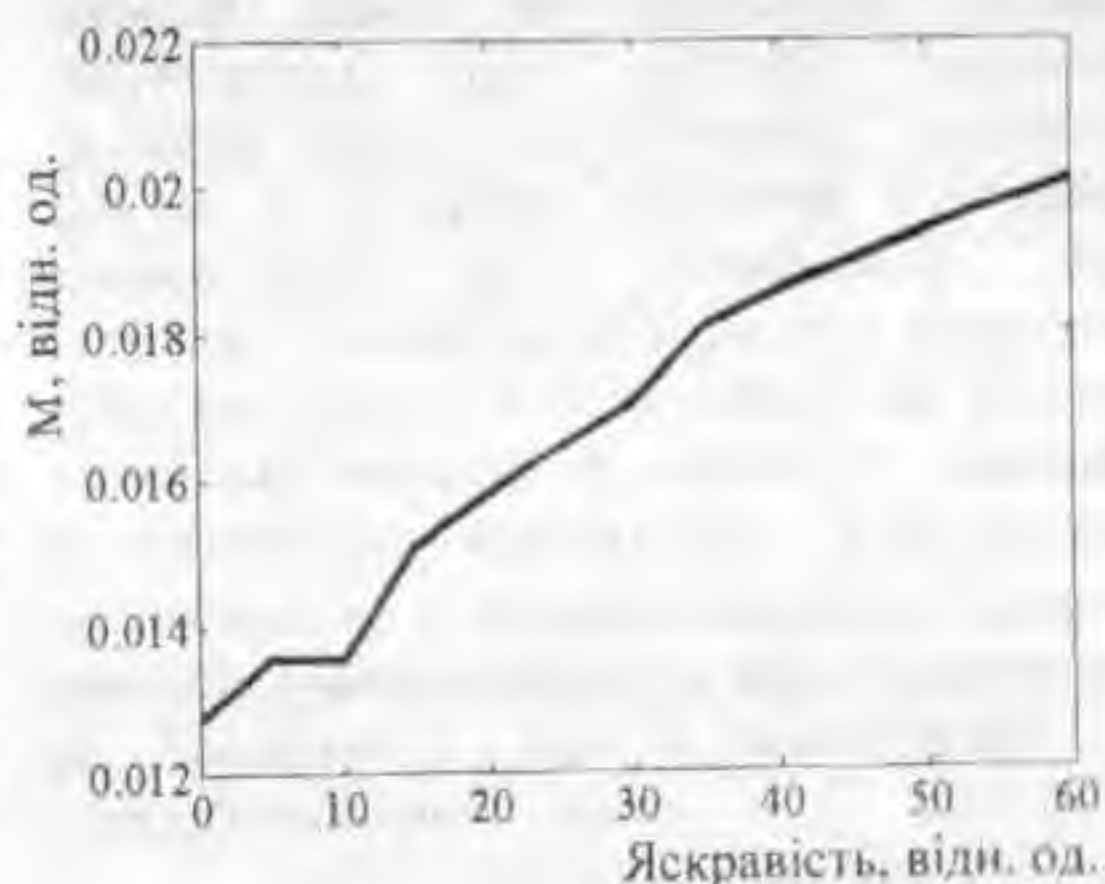
б)

Рис. 3. Сканування щитоподібної залози: а) ультразвукове зображення; б) рельєф розподілу параметру моделі К-розподілу M

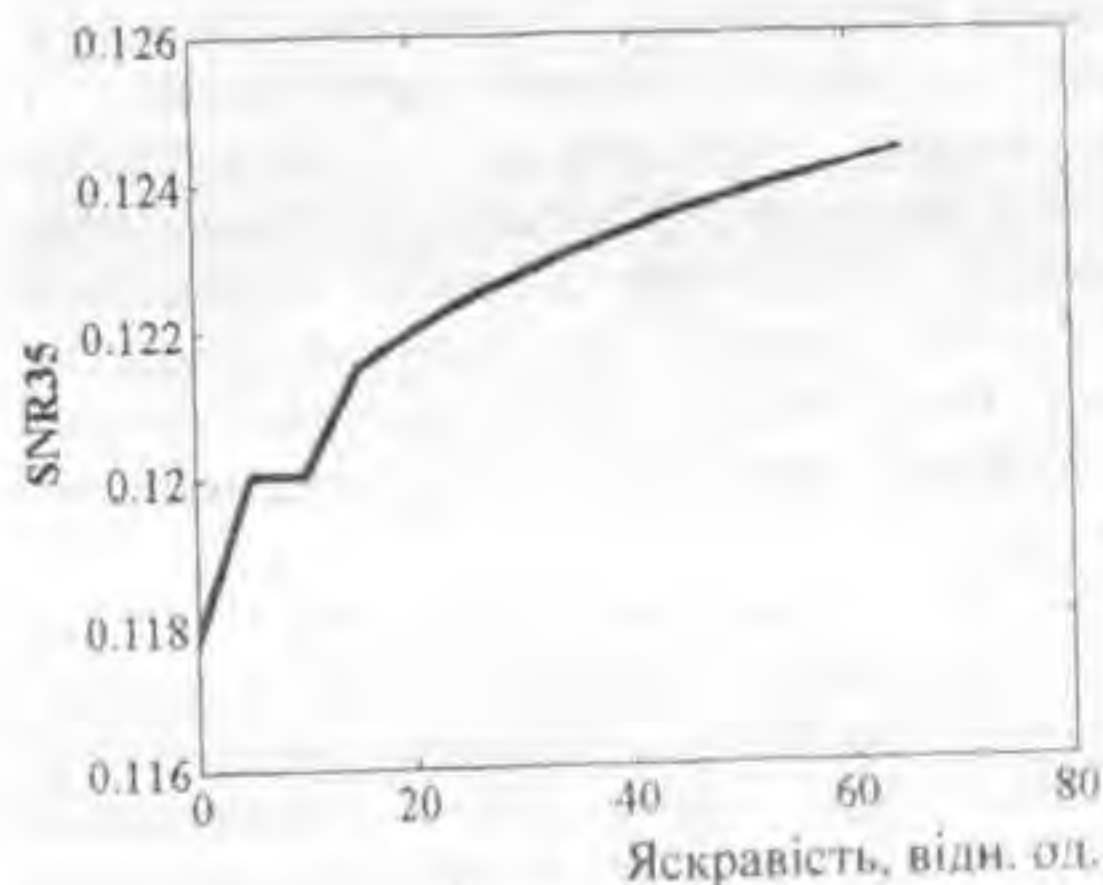
Універсальність параметрів

Для встановлення можливості використання абсолютних значень параметрів як числових

характеристик опису статистично-неоднорідних середовищ, проведено дослідження залежності значень параметрів моделі дискретних розсіювачів M , M_N та SNR_{35} від характеристик зображення, зокрема від зміни його яскравості (рис. 4). При змінах яскравості ультразвукового зображення на постійну величину (крок складав 5 од., діапазон змін $0 \div 255$ од.), розраховано значення параметрів.



а)



б)

Рис. 4. Залежність величини параметра від зміни яскравості зображення ультразвукового зображення на величину $\delta I = 5$ а) параметр M , б) параметр SNR_{35}

З наведених залежностей можна зробити висновок, що абсолютні значення параметрів M та SNR_{35} є залежними від апаратних установок приладу, при яких проводились сканування даного ультразвукового зображення, а також є чутливими до методів обробки зображень. Така

чутливість параметрів робить неможливим пряме використання їх абсолютних величин для класифікації та ідентифікації розсіюючого середовища і вимагає пошуку деякого нормуючого множника для універсальності параметрів.

Висновки

В роботі розроблено методику реконструкції параметрів середовища на основі подання акустичного відгуку від статистично-неоднорідних середовищ як сигналу відлуння, сформованого фізичною системою у вигляді набору розсіювачів. За результатами моделювання встановлено залежність числових параметрів фізичної моделі з характеристиками середовища. Теоретично розраховано залежність параметра SNR_v від густини розсіювачів за моментами дробових порядків і за допомогою статистичних оцінок експериментально показано його інформативність для класифікації та ідентифікації статистично-неоднорідних середовищ, зокрема, біологічних тканин.

Збільшення у 3 рази динамічного діапазону зміни параметра дозволяє підвищити чутливість методики діагностування біологічних тканин у рамках моделі системи розсіювачів з випадковими параметрами. Розроблений алгоритм реконструкції значень та побудови карт розподілів параметрів моделі дискретних розсіювачів дозволить зменшити суб'єктивність оцінки біологічних тканин як статистично-неоднорідних середовищ при ультразвуковому скануванні.

Наведені оцінки залежності зміни значень реконструйованих параметрів до апаратних установок, при яких проводились вимірювання, свідчать про необхідність формування нечутливого універсального параметру для задач неінвазивної ідентифікації біологічних тканин та

порівняння результатів ультразвукового сканування на різних апаратних реалізаціях.

Список використаних джерел

1. К. Хилл. Использование ультразвука в медицине. М.: Мир, 1989. – 568 с.
2. Этштейн Е. В., Матяцук С. И. Атлас-руководство по ультразвуковому исследованию щитовидной железы. – К.: КВІЦ, 2004. – 382 с.
3. P. M. Shankar. A general statistical model for ultrasonic backscattering from tissues// IEEE Trans. Ultrason. Ferroelec. Freq. Contr. - 2000, – 47, – P. 727-736.
4. G. V. Aydoyan, Z. M. Skrypachenko, S. P. Radchenko. Local effects of acoustic waves interaction with soft biological structures// Proceeding of the II International Conference "Electronics and applied physics", October, 11-14, 2006, Kyiv, Ukraine, P. 109-110.
5. Г. В. Айдоян, З. М. Скрипаченко, С. П. Радченко. Класифікація біологічних тканин на основі чисельних параметрів їх фізичної моделі// IV з'їзд Українського біофізичного товариства.(Донецьк, 19-21 грудня 2006 р.). Тези доповідей. – Донецьк: ДонНУ, 2006. – С. 165-166.
6. З. М. Скрипаченко, С. П. Радченко. Статистичне оцінювання параметрів паренхіматозних органів на основі моделі К-розподілу// Вісник Харківського університету. Біофізичний вісник. – 2005. № 716, – вип. 2 (16). – С. 70-74.

Надійшла до редколегії 29.05.07 р.

УДК 519.9

Коротков П.А., д. ф.-м. н., професор,
Фелінський Г. С., к. ф.-м. н.

Аналіз спектрів комбінаційного розсіяння кристала ніобату літію та аморфних кварцових волокон

Розглянуті фізичні особливості спектрів КР, що впливають на формування нелінійної сприйнятливості у нецентросиметричному кристалі ніобату літію у порівнянні з аморфною сполукою кварцового скла, яке є основою сучасних оптичних волокон.

Ключові слова: комбінаційне розсіяння, волоконна оптика, нелінійна оптика.

*E-mail: felinskyi@yahoo.com

1. Вступ

Нецентросиметричні кристали, до яких відноситься модельний кристал ніобату літію, не мають центру інверсії у своїй групі симетрії, що обумовлює наявність у нього нелінійності найнижчого (другого) порядку, на відміну від аморфного кварцового скла, з якого виготовляється зараз переважна більшість сучасних оптичних волокон. Саме ця обставина довгий час служила критерієм щодо розподілу означених матеріалів на ті, що мають або не мають нелінійність своїх оптичних властивостей. Дійсно, абсолютна величина нелінійності третього порядку орієнтовно у $\sim 10^6$ разів менша за нелінійність другого порядку. Тому нецентросиметричні кристали являли собою основний клас матеріалів для нелінійної та інтегральної оптики, оскільки дозволяли зменшити довжину синхронної когерентності при двоухвильовій взаємодії до кількох міліметрів. Аналогічна довжина когерентності у будь-якому матеріалі з центром симетрії повинна складати щонайменше сотні метрів або кілометри [1]. Надзвичайна прозорість оптичного волокна зняла проблему – відрізки одномодових волокон довжиною у десятки і сотні кілометрів широко використовуються на практиці.

За рахунок надзвичайно низьких втрат ~ 0.2 дБ/км та високої концентрації потужності накачки >100 МВт/м² у серцевині волокна з перерізом всього ~ 50 мкм², одномодове волокно перетворюється у високоефективне нелінійне середовище з дуже низьким порогом вимушеного комбінаційного розсіяння (ВКР) [2]. Тому

P. A. Korotkov, D. Ph., Professor,
G. S. Felinskyi *, Ph. D.

Raman spectra analysis of lithium niobate crystal and amorphous silica fibres

Physical features of Raman spectra which influence on the nonlinear susceptibility formation in the lithium niobate crystal without inversion center in comparison with amorphous compound of the silica glass being a basis of modern optical fibers are considered in the paper.

Key Words: Raman scattering, fiber optics, nonlinear optic.

порівняльний аналіз спектрів КР кристалів без центру інверсії та аморфного скла має важливе практичне значення для визначення фундаментальних механізмів формування нелінійностей різних порядків у твердому тілі.

2. Кількісний опис процесу КР за допомогою нелінійної сприйнятливості

Оскільки за формування процесу КР відповідає нелінійність коливань молекул, то вплив такого молекулярного руху проявляється через молекулярну поляризованість α_{ij} . Якщо наведена поляризація коливається з тією ж частотою, що і прикладене електричне поле, то поляризованість є постійною і відповідає рівноважній поляризованості α_{ij}^0 . Вплив зміщення атомів у межах молекули можна описати за допомогою диференціальної поляризованості $(\partial\alpha_{ij}/\partial q_k)$, де q_k – координата локального зсуву, який впливає на електричне поле, що залежить від часу.

Поляризація, що наведена зовнішнім електричним полем дорівнює щільності дипольного моменту та має вигляд [3]:

$$P_i = \frac{N}{V} \sum_j \alpha_{ij}^0 E_j + \frac{N}{V} \sum_{j,k} \frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial q_k} q_k E_j + \dots = P_i^L + P_i^{NL} \quad (1)$$

Перший доданок у правій частині описує релеевське розсіяння, а другий – КР. У випадку КР зміщення викликається осцилюючим електричним полем та коливальними рухами атомів, але механізм формування нелінійної сприйнятливості суттєво залежить від симетрії оточення, в якому молекула виконує власні

коливальні рухи, зокрема від наявності чи відсутності центра інверсії у нелінійному середовищі.

2.1 Нелінійна сприятливість для процесу КР у середовищі без центру інверсії.

Відсутність центру інверсії точкової групи симетрії кристалічного середовища дозволяє існування дипольно-активних коливань, які одночасно проявляються у спектрах КР та інфрачервоному (ІЧ) поглинанні. Тому нелінійна сприятливість виникає двома шляхами – за рахунок прямого впливу на електронну підсистему та за посередництвом дипольних зсувів іонів ґратки від положення рівноваги. В результаті електричне поле E^l лазерної хвилі викликає деформацію рівноважного стану як іонної, так і електронної системи середовища. Тоді поляризацію P^s на стоксовій частоті ω_s можна записати так:

$$P_i^s = \alpha_{ijk}^m E_j^l q_k^{m*} + \xi_{ijk} E_j^l E_k^s, \quad (2)$$

де E_k – компонента електричного поля, що пов'язана з m -им дипольним коливанням, символ $*$ позначає комплексне спряження; за індексами, які повторюються у (2) (тобто m, j, k) береться сума. Тензорні коефіцієнти α_{ijk}^m і ξ_{ijk} можна вважати незалежними, які для даного кристала відповідають тензорам КР та генерації другої гармоніки (ГДГ) і визначаються експериментально. Для полярного коливання локальний зсув q_k є лінійним відгуком на макроскопічне поле E_i , тобто $q_i^n = \beta_i^n E_i$, причому лінійність рівнянь руху для q_i^n дає:

$$\beta_i^n = \frac{Z_n}{M_n(\omega_n^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_n)}, \quad (3)$$

де Z_n, M_n – ефективні заряд і маса для n -ого осцилятора, ω_n – резонансна частота, Γ_n – постійна загасання n -ого осцилятора, яка відноситься до поляризації вздовж i -ої осі. Тоді (2) має вигляд:

$$P_i^s = [\alpha_{ijk}^m \beta_k^m + \xi_{ijk}] E_j^l E_k^s = \chi_{ijk}^{(2)} E_j^l E_k^s,$$

тобто

$$\chi_{ijk}^{(2)} = \alpha_{ijk}^m \beta_k^m + \xi_{ijk} \quad (4)$$

У свою чергу, як відомо [4], лінійні електро-оптичні (ЕО) коефіцієнти r_{ijk} виражаються через компоненти тензора нелінійної сприятливості $\chi_{ijk}^{(2)}$ у вигляді:

$$r_{ijk} = -\frac{4\pi}{n_i^2 n_j^2} \chi_{ijk}^{(2)}, \quad (5)$$

де n_i і n_j – головні показники заломлення, індекс k вказує на напрямок керуючого поля E_k^0 . Перевагою розділення тензора на два внески у (4) є те, що α_{ijk}^m та ξ_{ijk} безпосередньо вимірюються експериментально і плавно змінюються з частотою ω , навіть коли ω проходить через резонанси кристалічної ґратки. Резонансна поведінка нелінійної сприятливості за цих умов явно проявляється у множниках β_k^m (3).

Для кількісного опису відносної потужності розсіяного випромінювання використовують диференціальний поперечний переріз КР, який дорівнює [4]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} = \frac{\omega_s^3 \omega_l n_s V^2 \langle |P_{NL}|^2 \rangle_{\omega_s}}{16\pi^2 \epsilon_0^2 c^4 n_l |E_l|^2}, \quad (6)$$

де V – об'єм розсіяння, n_s, n_l – показники заломлення на частотах ω_s та ω_l .

На практиці вимірюють інтегральну ефективність КР I_{ijk} , вираз для якої отримують шляхом інтегрування за стоксовими частотами:

$$I_{ijk}^m = \sigma_m \frac{V |\alpha_{ijk}^m|^2}{M_m \omega_m^2} G(\Gamma_m), \quad (7)$$

де

$$\sigma_m = \frac{\hbar \omega_m \omega_s^4 n_s L \Delta\Omega [n_B(\omega) + 1]}{16\pi^3 c^4 n_l},$$

де $n_B(\omega)$ – Бозе-фактор для фононої густини, L – довжина кристала, $\Delta\Omega$ – тілесний кут, що обмежений спектрометром, множник $G(\Gamma_m) \approx \pi/2$ при $\Gamma_m/\omega_m \ll 1$. Якщо виразити ефективні масу та заряд полярного коливання через його силу осцилятора S_m та знехтувати частотною залежністю величини α_{ijk}^m і вважати її дійсною, то із (5) та (7) отримуємо:

$$r_{ijk} = -\frac{1}{n_i^2 n_j^2} \left\{ \sum_{m=1}^N \pm [\epsilon_0 S_m I_{ijk}^m / (\sigma_m G(\Gamma_m))]^{1/2} + \xi_{ijk} \right\} \quad (8)$$

Підкреслимо, що всі параметри електронно-іонної частини ЕО коефіцієнтів визначаються заданими КР на полярних фононах. Неоднозначність знаку в (8) виникає при обчисленні кореня у (7). Таким чином, аналіз спектрів КР у середовищі без центру інверсії дозволяє не тільки визначити баланс внесків у нелінійну сприятливість другого порядку $\chi_{ijk}^{(2)}$.

але і дослідити її дисперсійну залежність. Це означає, що можна кількісно визначити фундаментальні межі смуги робочих частот ЕО ефекту у будь-якому нецентросиметричному середовищі.

Але як тільки в матеріалі з'являється центр інверсії, що є в ізотропному склі, то всі нелінійні ефекти другого порядку зникають. Для спектрів КР починає діяти закон альтернативної заборони, при якому будь-яке полярне коливання не може проявлятися у КР.

2.2. Квадратична нелінійна сприйнятливості в процесах спонтанного та вимушеного КР у кварцових оптичних волокнах

Наслідком ізотропності аморфного скла є наявність інверсії точкової симетрії у кварцових волокнах. У результаті зникають будь-які фізичні властивості, що описуються тензорами непарного рангу. Дійсно, якщо середовище має центр інверсії, то вираз (4) перетворюється у тривіальну тотожність $0=0$. Всі без винятку компоненти нелінійної сприйнятливості другого порядку $\chi_{ijk}^{(2)}$ та тензора ГДГ ξ_{ijk} є нульовими, оскільки $\xi_{ijk} \equiv -\xi_{ijk}$ та $\chi_{ijk}^{(2)} \equiv -\chi_{ijk}^{(2)}$. Кожний доданок у сумі $\alpha_{ijk}^m \beta_k^m$, яка береться за всіма m -ими коливаннями, є нульовим в силу альтернативної заборони. Вона вимагає, що кожне КР-активне коливання з $\alpha_{ijk}^m \neq 0$ повинно бути дипольно не активним, тобто $\beta_k^m = 0$ і навпаки, будь-яке коливання, що проявляється в ІЧ поглинанні з $\beta_k^m \neq 0$, заборонено у спектрі КР, тобто $\alpha_{ijk}^m = 0$. Тому найбільшою нелінійністю у волокнах є нелінійна сприйнятливості третього порядку (іноді її називають квадратичною нелінійністю).

В загальному випадку, незалежно від частоти нелінійних продуктів взаємодії i -ту компоненту наведеної поляризації третього порядку, можна записати через тензор сприйнятливості третього порядку $\chi^{(3)}$ як

$$P_i^{NL} = \epsilon_0 \sum_{j,k,l} \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l \quad (9)$$

Якщо в нашому розгляді обмежитися найбільш загальними типами волокон, тобто тими, що мають слабкі хвильоводні властивості, то можна розділити електричне поле як стоксової хвилі (s), так і хвилі накачування (p) на поперечну частину $R(r)$, (де $i = s, p$, а $r = \sqrt{x^2 + y^2}$) та функцію від z :

$E_i(z)$. Зокрема внесок, що відповідає коливанню на частоті ω_s , виникає при нелінійному змішуванні електричних полів і має вигляд

$$P_i^{sx} = 6\epsilon_0 |R^p|^2 R^s \sum_{j,k,l} \chi_{ijkl}^{(3)} E_j^p (E_k^p)^* E_l^s \quad (10)$$

з комплексним спряженням на частоті $-\omega_s$. Відповідно вираз для тензора сприйнятливості третього порядку $\chi^{(3)}$:

$$\chi_{ijkl}^{(3)} = \frac{N}{12m\epsilon_0 f^2} \frac{1}{(\Omega_s^2 - \omega_s^2) + (2i\omega_s\gamma)} \sum_n \frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial q_n} \left(\frac{\partial \alpha_{kl}}{\partial q_n} \right)^* \quad (11)$$

У випадку вимушеного КР вектор $\vec{q}$ залежить від $\vec{E}$ у вигляді відповідної комбінації полів накачки та стоксової хвилі, яка створює синхронну зовнішню силу та викликає резонансну поведінку даного коливання. Внаслідок цього виникає підсилення потужності стоксової хвилі, причому вираз для коефіцієнта підсилення g_R має вигляд:

$$g_R = \frac{3\omega_s}{\epsilon_0 c^2 n_p n_s} \frac{\text{Im}[\chi_{im}^{(3)} + \chi_{ip}^{(3)}]}{2A_{eff}^{ps}}, \quad (12)$$

де A_{eff}^{ps} є ефективною площею області перекриття накачки і сигналу.

Оскільки у процесі ВКР підсилення не залежить від температури [2], то зв'язок частотного профілю $g_R(\nu)$ з поперечним перерізом спонтанного КР за нульової температури $\sigma_0(\nu)$ записують у вигляді [5]:

$$g_R(\nu) = \sigma_0(\nu) \cdot \frac{\lambda_s^3}{c^2 h A_{eff}^{ps} n_p^2}, \quad (13)$$

де c – швидкість світла, h – постійна Планка, а слабкою залежністю від частоти показника заломлення n_p в області частот стоксового зсуву можна знехтувати. Поперечний переріз $\sigma_0(\nu)$ спонтанного КР, що вимірюється при температурі T , відноситься до нульового за Кельвіном перерізу $\sigma_0(\nu)$ як

$$\sigma_0(\nu) = \sigma_s(\nu) / [n_B(\nu, T) + 1], \quad (14)$$

де $n_B(\nu, T) = [\exp(h\nu/k_B T) - 1]^{-1}$ – фактор Бозе-Ейнштейна, k_B – постійна Больцмана.

3. Спектри КР у LiNbO₃ та кварцових оптичних волокон

Методика спостереження спектрів КР у кварцових оптичних волокнах суттєво відрізняється від стандартної 90°-ої схеми запису

спектрів у кристалічних зразках. В кристалах спектр розсіяного випромінювання реєструється під кутом 90° до напрямку збуджуючого лазерного випромінювання, а довжина треку

інтенсивність КР випромінювання має один порядок ($\sim 10^{-6}$) по відношенню до інтенсивності збуджуючого випромінювання.

Різниця в умовах спостереження позначається

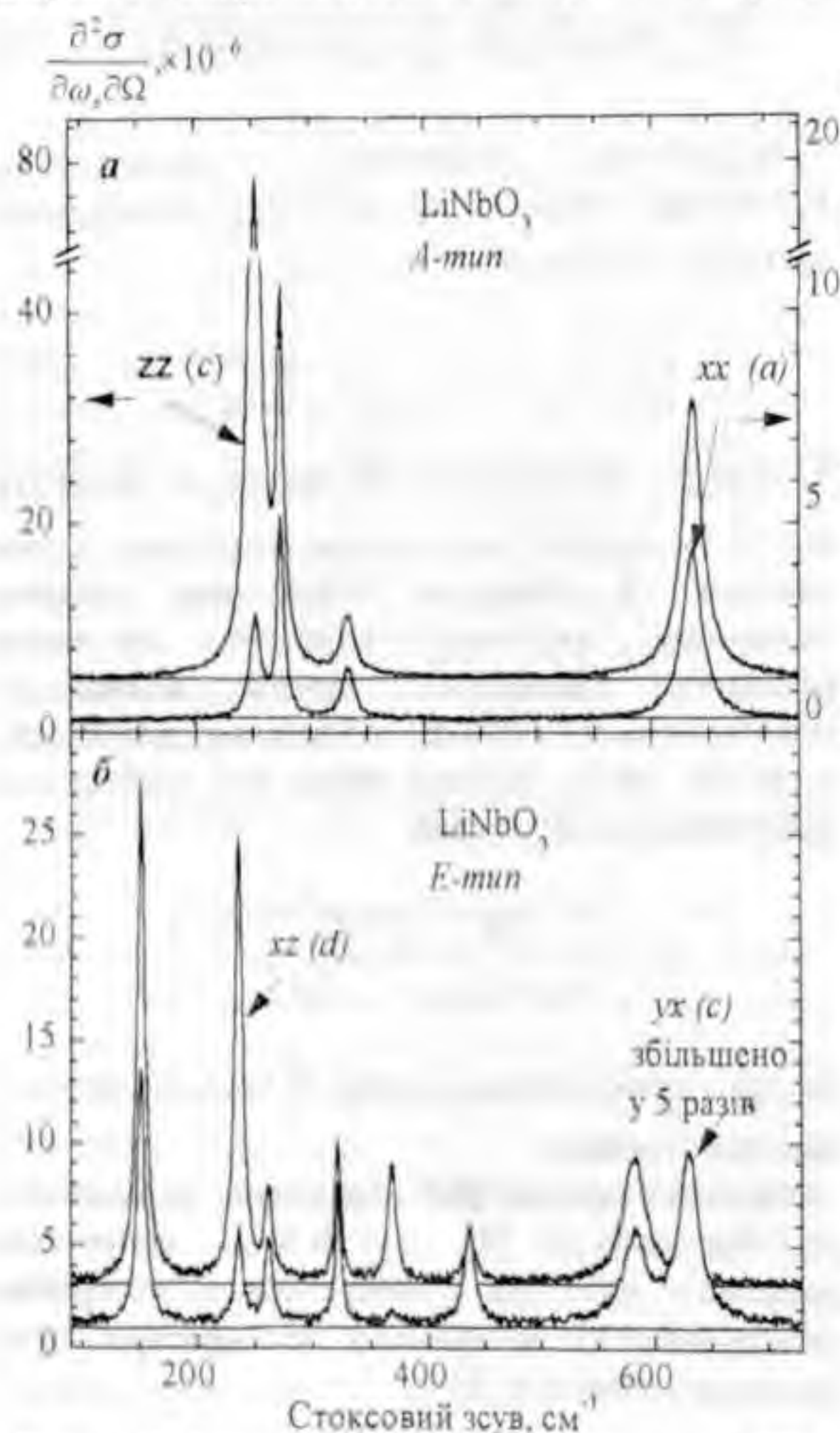


Рис. 1. Диференційний поперечний переріз КР у ніобаті літію для коливань А-типу (а) та Е-типу (б).

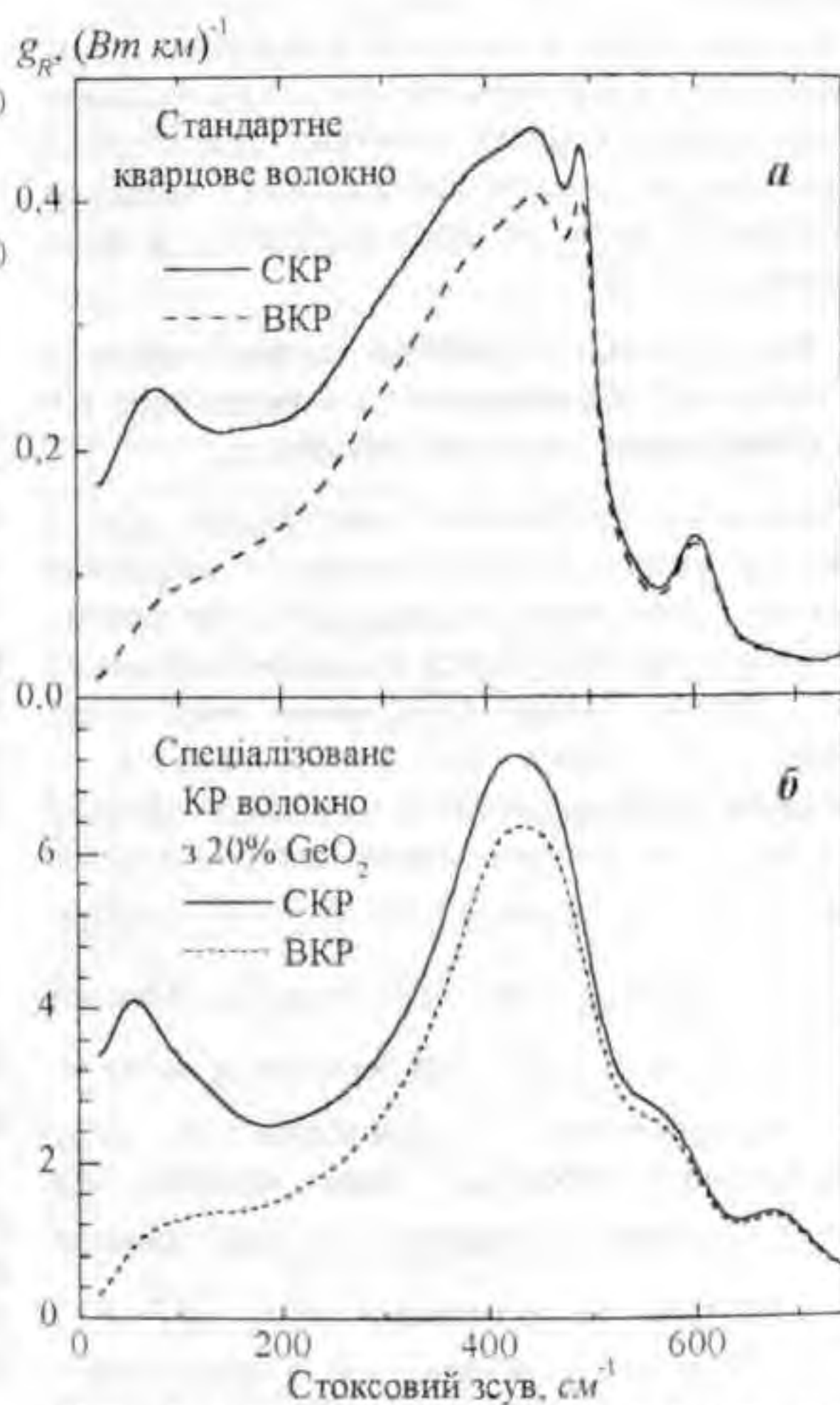


Рис. 2. Спектри спонтанного КР (суцільна лінія) та профілі ВКР (пунктир) у стандартному кварцовому волокні (а) та спеціалізованому КР волокні (б).

лазера в кристалі, що збуджує КР, лежить в межах від кількох міліметрів і рідко перевищує 1 см. Навпаки в оптичному волокні як збуджуюче випромінювання лазера, так і стоксова хвиля розповсюджуються у вигляді мод волокна, що повністю зосереджені у серцевині. За таких умов ефективний тілесний кут для стоксового випромінювання є надзвичайно малим, а під кутом 90° випромінювання практично відсутнє. Тому спектри КР у волокнах реєструють, фільтруючи вихідне випромінювання, або в протилежному напрямку на вхідному кінці волокна. В обох випадках використовують відрізки волокна з довжиною кількох метрів і навіть кілометрів. У результаті відносна

на параметрах реєстрації спектрів КР. У кристалах прийнято кількісно визначати поперечний переріз КР, який вимірюється у $\text{см}^2 \cdot \text{ср}^{-1}$, а у волокні спектри КР характеризують коефіцієнтом КР підсилення g_R , що безпосередньо зв'язаний у (13) з перерізом $\sigma_R(\nu)$ за нульової абсолютної температури і для якого застосовуються одиниці $(\text{Вт} \cdot \text{км})^{-1}$. На рис.1 зображені спектри КР для всіх поляризаційних компонент тензора КР для А-типу коливань (рис.1а) у паралельній геометрії, та Е-типу коливань (рис.1б). Спектри КР в оптичному волокні також є поляризованими, і на рис.2 наводяться спектри спонтанного КР у паралельній поляризації та пов'язані з ними

профілі ВКР підсилення для двох типів кварцового волокна – стандартного волокна на основі чистого кварцу (рис.2а) та спеціалізованого КР волокна з підвищеним g_R за рахунок 20% вмісту GeO_2 .

На відміну від $LiNbO_3$, для якого є повна інтерпретація спектрів КР за типами коливань, характер спектрів КР в оптичних волокнах має вигляд нерівномірного континуума з головним максимумом $\sim 430 \text{ см}^{-1}$ ($\sim 13 \text{ ТГц}$) та кількома локальними піками, що розширюють континуум до частот $>1300 \text{ см}^{-1}$ ($\sim 40 \text{ ТГц}$). Напівширина головного максимуму КР $\sim 4 \text{ ТГц}$, дозволяє реалізувати ВКР підсилення світла у такій смузі за допомогою лише однієї накачки. Інтерпретація спектрів волокон є предметом досліджень, але неполярний характер коливань є фізичною причиною формування ними квадратичної нелінійності та ВКР підсилення, а не ефектів другого порядку (ЛЕОЕ або ГДГ) як у ніобаті літію.

Аналіз електрооптичного ефекту в ніобаті літію проведений на основі експериментальних КР даних та діелектричних параметрів, що отримані для досліджуваних зразків. Розрахунок ЕО внесків у $LiNbO_3$ виконаний для температури $300^\circ K$, довжини хвилі збуджуючого світла $0,488 \text{ мкм}$ та показників заломлення $n_1 = n_2 = n_o = 2,3516$, $n_3 = n_e = 2,2594$. Для компонент тензора генерації другої гармоніки (ГДГ) прийняті значення: $d_{31} = 5,01 \times 10^{-12} \text{ м/В}$, $d_{33} = 30,27 \times 10^{-12} \text{ м/В}$, $d_{24} = 6,28 \times 10^{-12} \text{ м/В}$, $d_{22} = 2,41 \times 10^{-12} \text{ м/В}$. Структура ЕО коефіцієнтів ніобату літію наведена в таблиці 1. Електронно-іонний внесок у ЛЕОЕ ніобату літію є визначальним, а коливання 253 см^{-1} А-типу та 152 см^{-1} Е-типу являють собою ЕО «м'які» моди. Як видно з рис.1, інтенсивність A_1 коливання 253 см^{-1} у геометрії xx та zz досить значна, а його сила осцилятора максимальна (таблиця 1) та більше, ніж у 6 разів перевищує сили осцилятора інших полярних коливань з напрямком зсуву вздовж оптичної осі. Для нормальних коливань Е-типу з напрямком, що перпендикулярний до оптичної осі, ЕО «м'який» характер коливання 152 см^{-1} забезпечується також за рахунок значного перевищення у силі осцилятора над іншими коливаннями. Абсолютна величина чисто-електронного внеску для всіх ЕО коефіцієнтів не більша за 10-20% від внеску «м'якої» моди.

Оптимальний вибір знаків електронно-іонних внесків дозволяє апроксимувати експериментальні значення усіх ЕО коефіцієнтів з точністю не гірше за 6%. Зауважимо, що не дивлячись на переважний внесок ЕО «м'якої» моди, сума

абсолютних значень внесків інших коливань, як бачимо, досить значна.

Вибір знаку електронно-іонного внеску у ЛЕОЕ за найкращою відповідністю до прямих вимірювань оснований на наближенні незмінності α_{jk}^m у всьому спектральному діапазоні. В межах цього наближення тільки внески від ЕО «м'яких» мод можна вважати повністю визначеними. Дослідження спектрів КР з іншими довжинами хвиль збуджуючих лазерів та, особливо, при зниженні температури призводять до інтерференції внесків для всіх не «м'яких» коливань ЕО коефіцієнтів r_{13} , r_{22} та r_{42} . Це свідчить проти наближення α_{jk}^m у вигляді дійсної константи. В дійсності, оскільки макроскопічна величина α_{jk}^m , взагалі є комплексною, то за даними КР ми можемо

Таблиця 1.

Електрооптичні внески полярних коливань кристала ніобату літію.

№ пп	ω^T (см^{-1})	Γ (см^{-1})	S	I_{13}^m $\times 10^{-6}$	$6,52 \cdot r_{13}$ $\times 10^{-12}$ (м/В)	I_{33}^m $\times 10^{-6}$	$23,1 \cdot r_{33}$ $\times 10^{-12}$ (м/В)
А-тип							
A_1	253	12	14,89	1,76	1,00	16,0	1,00
A_2	275	7	1,32	1,86	-0,30	4,0	-0,15
A_3	334	14	0,29	0,94	-0,10	0,95	0,03
A_4	637	21	2,65	4,65	0,52	10,2	0,26
Прямі вимірювання ЕО коефіцієнтів, $\times 10^{-12} \text{ м/В}$:				$\xi_{13} = 0,100$ $\xi_{33} = 0,200$ $r_{13} = 8,6$ $r_{33} = 31,3$ $r_{23} = 30,8$ $\Delta r_{13} = 6,93 \%$ $\Delta r_{33} = 0,68 \%$			
Е-тип				$I_{42}^m \times 10^{-6}$	$13,4 \cdot r_{42}$ $\times 10^{-12}$ (м/В)	$I_{22}^m \times 10^{-6}$	$4,03 \cdot r_{22}$ $\times 10^{-12}$ (м/В)
E_1	92	8	3,83	0,006	0,02	0,004	-0,05
E_2	152	8	21,40	3,8	1,00	0,39	1,00
E_3	236	8	2,21	2,9	0,26	0,11	-0,16
E_4	262	7	4,69	0,54	0,16	0,11	0,22
E_5	322	6	1,77	0,96	0,12	0,16	-0,16
E_6	368	8	1,85	0,94	0,12	0,01	-0,04
E_7	436	10	0,08	0,39	0,02	0,15	-0,03
E_8	582	24	3,00	2,20	0,20	0,30	0,23
E_9	630	21	0,56	0,04	0,01	0,54	-0,13
Прямі вимірювання ЕО коефіцієнтів, $\times 10^{-12} \text{ м/В}$:				$\xi_{42} = 0,067$ $\xi_{22} = 0,078$ $r_{42} = 28,2$ $r_{22} = 3,94$ $r_{23} = 3,95$ $\Delta r_{42} = 6,08 \%$ $\Delta r_{22} = 0,19 \%$			

виміряти $|\alpha_{jk}^m|$ з точністю до деякого фазового множника

При цьому знак «+» або «-» у нелінійній поляризованості буде відповідати окремому

значенню фази 0 або π . У реальному випадку значення фази може бути проміжним і задача аналізу відносних внесків у ЛЕОЕ суттєво ускладнюється і потребує додаткових даних. За нашими уявленнями певну інформацію можна отримати при більш детальному розгляді внутрішньо-кристалічних умов, зокрема при аналізі локальних електричних полів.

Аналіз спектрів КР Ті-дифузних мікрохвильоводів [6] дозволяє оцінити стабільність їх електрооптичних властивостей. Найбільший інтерес для виготовлення інтегральних ЕО

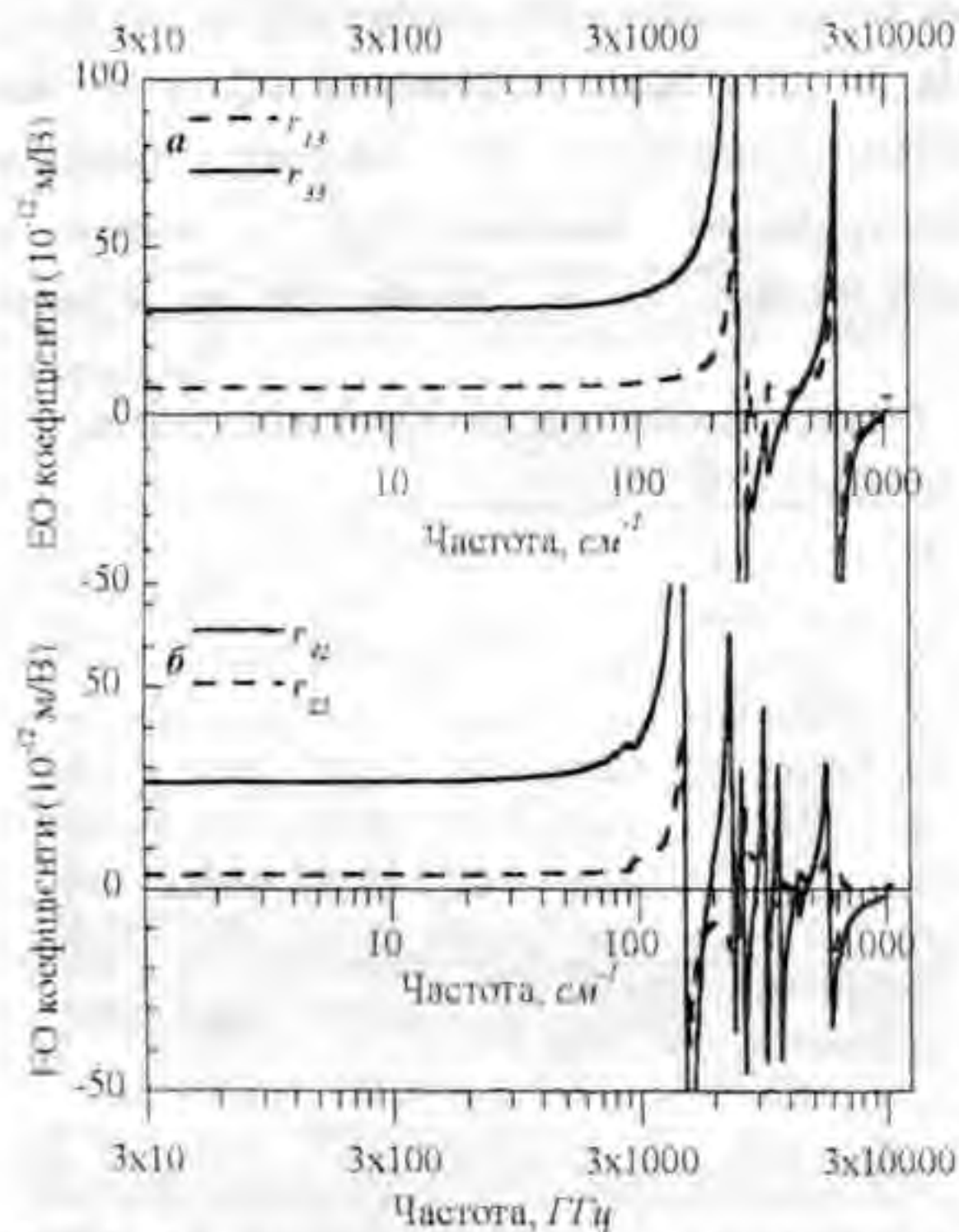


Рис.3. Дисперсія електрооптичних коефіцієнтів дифузного мікрохвильовода у ніобаті літію

пристроїв у LiNbO_3 визивають електрооптичні коефіцієнти r_{33} та r_{13} . Перший з них має максимальну величину. Електронно-коливальний внесок у ці коефіцієнти роблять коливання A_1 -типу. У спектрах КР оптичних мікро-хвильоводів не спостерігалось помітної зміни як інтенсивності поперечних ліній КР A_1 -типу, так і їх Т-Л - розщеплення. Це говорить про незмінність диференціальних компонент тензора КР та сили осцилятора коливань. У відповідності до цього, наявність оптичного Ті-дифузного хвильоводу не змінює параметрів електрооптичної м'якої моди для ЕО коефіцієнтів r_{33} та r_{13} .

Для коливань Е-типу, що дають внесок у коефіцієнти r_{22} та r_{42} у спектрі спостерігалася зміна частоти подовжнього коливання 881 cm^{-1} на

2 cm^{-1} . Даному подовжньому коливанню відповідає поперечне коливання з частотою 630 cm^{-1} (E_g). Зміна величини Т-Л - розщеплення не є досить помітною, і зменшення сили осцилятора цього коливання також є досить малим. Слід зауважити, що це коливання практично не дає внеску як у r_{42} , так і у r_{22} (див. таблицю 1). Таким чином, зареєстровані зміни у положенні лінії 630 cm^{-1} не призводять до зміни ЕО властивостей хвильоводу.

Отже, незмінність частотного положення, Т-Л-розщеплення та відносної інтенсивності ліній 152 cm^{-1} Е-типу та 253 cm^{-1} А-типу, що спостерігаються у спектрі КР, ми робимо висновок про інваріантність параметрів електрооптичних м'яких мод в Ті-дифузних мікрохвильоводах у ніобаті літію. Отримані дані КР вимірювань дозволяють розглянути практично важливе питання про дисперсію електрооптичних коефіцієнтів за частотою керуючого поля.

Відповідно до (3)-(8), дисперсійну залежність електрооптичних коефіцієнтів, опускаючи тензорні позначення, можна представити у вигляді:

$$r = A \left\{ \xi + \sum_{m=1}^N \frac{\Delta r(W_m) \omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2 - i \omega \Gamma_m} \right\}, \quad (15)$$

де $A = 4\pi / (n^2, n^2)$ - коефіцієнти перерахунку нелінійної поляризованості до ЕО коефіцієнтів, згідно співвідношення (3), $\Delta r(W_m)$ - внесок m -ого граткового коливання у електрооптичний ефект. Для ЕО внесків, що представлені у таблиці 1, ми обчислили дисперсійні залежності для усіх електрооптичних коефіцієнтів ніобату літію. На рис. 3 показані дисперсійні криві для дійсних частин ЕО коефіцієнтів, відповідно r_{13} , r_{33} , r_{42} та r_{22} в області частот ω граткових резонансів. Максимальна зміна ЕО коефіцієнтів r_{13} та r_{33} спостерігається біля частоти 253 cm^{-1} , а для r_{42} та r_{22} - поблизу 152 cm^{-1} , причому зміна починається з частоти приблизно 100 cm^{-1} . Сумарний внесок коливань з $\omega > 253 \text{ cm}^{-1}$ у r_{13} та r_{33} складає не більше, ніж 10-15% у порівнянні з внеском коливання 253 cm^{-1} .

Співвідношення чисто електронних та електронно-іонних внесків у ЕО коефіцієнти ніобату літію представлені діаграмою на рис. 4 і свідчать про переважну величину електронно-іонного внеску. Оскільки електронно-іонний внесок у ЕОЕ в ніобаті літію є головним, а параметри електрооптичних м'яких мод у Ті-дифузних мікро хвильоводах - інваріантні, то дисперсія ЕО коефіцієнтів хвильоводу.

щонайменше у області $0-300 \text{ см}^{-1}$, описується кривими на рис. 3а,б.

Дисперсійна залежність електрооптичних коефіцієнтів навколо дипольних коливань кристалічної ґратки є однією з фізичних меж для

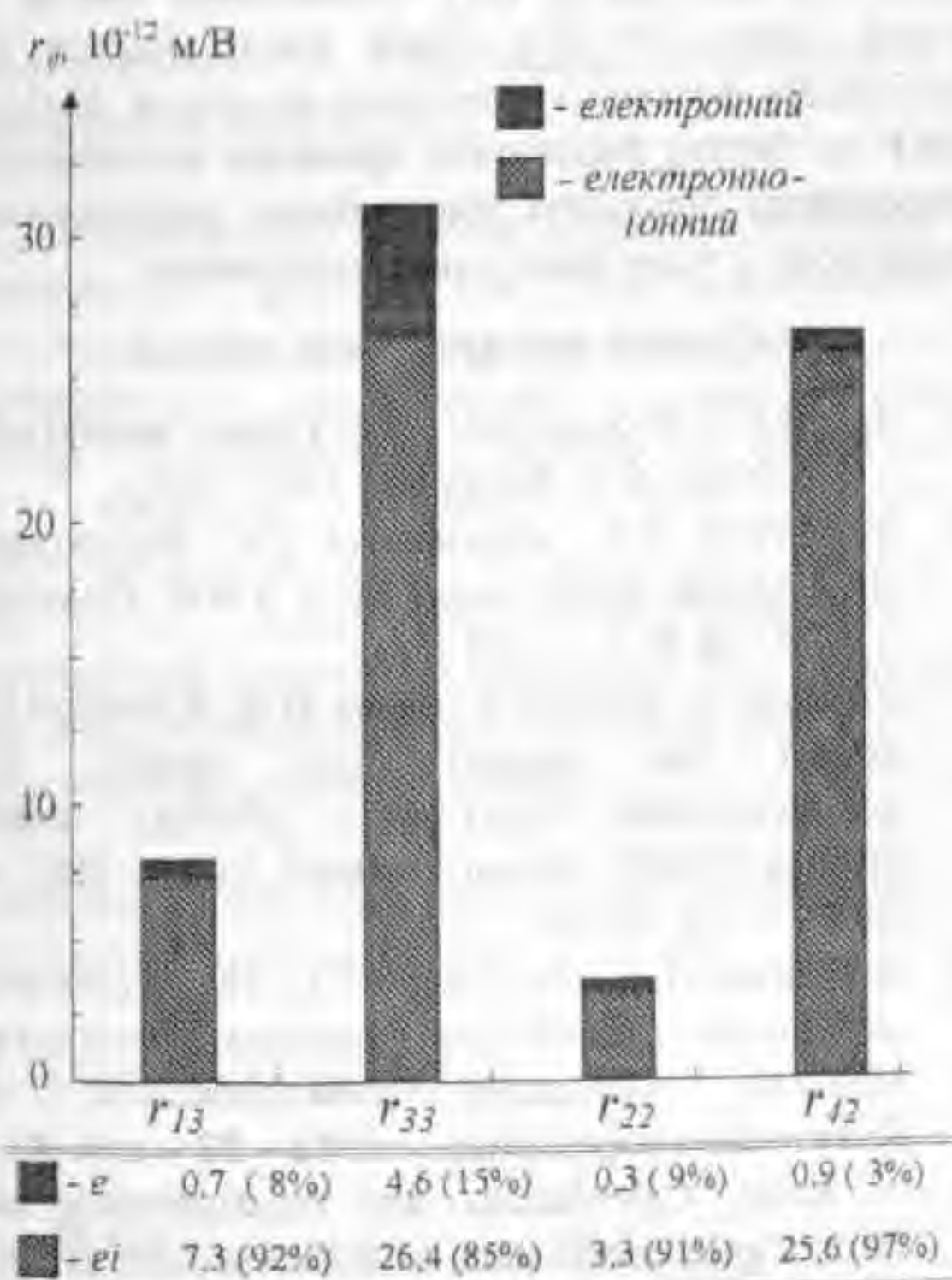


Рис.4. Діаграма відношення електронно-іонного та чисто електронного внесків у електрооптичні коефіцієнти ніобату літню.

підвищення смуги робочих частот та швидкодії усіх електрооптичних пристроїв. Виділяючи область $0-100 \text{ см}^{-1}$, у якій дисперсія електрооптичних коефіцієнтів відсутня, ми встановлюємо смугу робочих частот інтегральних електрооптичних пристроїв, що складає $0-3 \text{ ТГц}$. У смугі частот від 3 ТГц до 30 ТГц містяться дипольні фононні коливання не тільки нецентросиметричних кристалів, а і у більшості конденсованих середовищ, що викликає надзвичайно високе поглинання електромагнітного випромінювання [7] у шарі $\sim 1 \text{ мкм}$. Це є головним фізичним обмеженням підвищення робочої частоти всіх без винятку електронних пристроїв і другим із зазначених обмежень для електрооптичних пристроїв.

Слід також зазначити, що реалізовані до цього часу ЕО інтегральні пристрої працюють у максимальній смугі $0-40 \text{ ТГц}$, що складає $\sim 1\%$ від потенційно можливої з одного боку, ця обставина свідчить про широкі можливості для

підвищення швидкодії та смуги частот інтегральних пристроїв на базі Ti – мікрохвелеводів у ніобаті літню. З іншого боку, вирішення задачі практичного освоєння діапазону частот у смугі максимальної прозорості оптичних волокон, що досягає 200 ТГц , виходить за межі можливостей означених електрооптичних пристроїв та традиційної електроніки. Саме такі можливості властиві фотонним пристроям, серед яких зараз виділяється волоконна оптика активних середовищ на основі вимушеного КР в одномодових волокнах.

Дійсно, характер спектрів КР в оптичних волокнах має вигляд нерівномірного континуума у надзвичайно широкій смугі частот $\sim 4 \text{ ТГц}$ (рис.2). При використанні накачки на кількох довжинах хвиль вже реалізоване [2] високоякісне ВКР підсилення світла у смугі понад 10 ТГц з дуже низьким рівнем власного шуму.

Серед фундаментальних факторів, що впливають на рівень оптичного шуму при ВКР слід підкреслити зазначену вище особливість про дипольну неактивність молекулярних коливань, які беруть участь у формуванні ВКР підсилення. Відсутність дипольного моменту означає відсутність випромінювального каналу в енергетичній релаксації коливання, яке збуджується хвилею накачки до положення теплової рівноваги. Іншими словами, КР активне коливання не може збуджуватись шляхом прямого поглинання електромагнітного випромінювання на частоті власних коливань і відповідно не випромінює електромагнітної хвилі в процесі свого загасання. В результаті коливальний процес не супроводжується спонтанним оптичним шумом на частоті власних коливань та природним чином зменшує рівень нелінійного зв'язку з оптичним шумом на частотах стоксового зсуву, які є робочими для сигналів, що підсилюються.

Разом з цим „дифузний“ характер ліній КР, ширина яких може перевищувати 100 см^{-1} з сильним перекриттям у спектрах КР кварцового скла, однозначно вказує на велику швидкість релаксації молекулярних коливань до теплової рівноваги. Дійсно, при розгляді окремого КР активного коливання можна отримати [8] вираз, що описує залежність від часу коефіцієнта ВКР підсилення у вигляді.

$$g_R(t) = \frac{\tau_1^2 + \tau_2^2}{\tau_1 \tau_2} \exp(-t/\tau_2) \sin(t/\tau_1), \quad (16)$$

де τ_1 та τ_2 – проміжки часу, що пов'язані відповідно з центральною частотою $\Omega_c = 2\pi/\tau_1$ та

константою загасання $\gamma=2\pi/\tau_2$ фононного КР активного колювання, що входять у вираз (11), який описує тензор сприйнятливості третього порядку $\chi^{(3)}$. Ці параметри визначаються безпосередньо із спектрів КР, показаних на рис. 2: $\tau_1=12,2$ фс та $\tau_2=32$ фс. Саме такими часовими проміжками характеризується час перехідних процесів у ВКР підсилювачі. Для порівняння аналогічні оцінки можна зробити для часу відгуку ЕО ефекту в LiNbO_3 . Безпосередньо за величиною напівширини ліній у спектрі КР (рис. 1), які у низькочастотній області спектра LiNbO_3 складають $\sim 8 \text{ см}^{-1}$, можна оцінити, що значення $\tau_2 \geq 0,5$ пс. Таким чином, реальну швидкість у фемтосекундному діапазоні проміжків часу можуть забезпечити лише фотонні пристрої, зокрема ті, що побудовані на ефекті вимушеного КР в одномодових волокнах.

Висновки

Проведено порівняльний аналіз спектрів комбінаційного розсіяння кристала ніобату літію та аморфних кварцових волокон з точки зору впливу центральної симетрії локального оточення фононних колювань на нелінійні властивості означених модельних матеріалів. Висока нелінійність, що притаманна кристалам без центру інверсії, у значній мірі пов'язана з полярним характером колювань, які дають переважний внесок у електрооптичні коефіцієнти. До фізичних обмежень підвищення робочої частоти електрооптичних пристроїв відноситься високе поглинання електромагнітного випромінювання дипольними фононними колюваннями у смузі частот від 3 ТГц до 30 ТГц та дисперсійна залежність електрооптичних коефіцієнтів навколо дипольних колювань кристалічної ґратки. За результатами аналізу ЕО внесків від усіх полярних колювань модельного кристала зроблена оцінка граничної смуги робочих частот інтегральних електрооптичних пристроїв, величина якої складає 0–3 ТГц.

Смуга поглинання фононними резонансами в ІЧ області може розглядатися як природна межа, що розділяє області робочих частот між пристроями традиційної електрооптики та фотоніки.

Характерні особливості спектрів КР в оптичних волокнах на дипольно не активних

молекулярних комплексах суттєво впливають на формування спонтанного оптичного шуму при ВКР підсиленні світла. Спектри КР кварцового скла, що мають вигляд нерівномірного континуума у надзвичайно широкій смузі частот, дозволяє реалізувати ВКР підсилення світла у смузі понад 10 ТГц. Тому смуга частот та швидкодія фотонних пристроїв на основі ефекту ВКР на багато перевищує граничні можливості переважної більшості традиційних електронних пристроїв, у тому числі електрооптичних.

Список використаних джерел

1. Agrawal G.P. Nonlinear Fiber Optics, second ed. – San Diego, CA: Academic, 1995 – 592p.
2. Коротков П.А., Фелінський Г.С. Волоконні ВКР лазери неперервної дії // УФЖ. Огляди. – 2007 – 4, № 1 – с. 36-60.
3. Bromage J., Rottwitt K., Lines M.E. A method to predict the Raman gain spectra of germanosilicate fibers with arbitrary index profiles // IEEE Photon. Technol. Lett. – 2002 – 14, N 1 – p. 24-26.
4. Коротков П.А., Фелінський Г.С. Исследование механизма линейного электрооптического эффекта методами спектроскопии // Квантовая электроника. – 1982 – 22 – с. 66-80.
5. Y. Kang. Calculations and measurements of Raman gain coefficients of different fiber types. – Master thesis Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, Virginia, 2002, – 56p.
6. Кондilenко И.И., Коротков П.А., Клименко В.А., Фелінський Г.С. Спектры комбинационного рассеяния Тi-диффузного планарного волновода в ниобате лития // Оптика и спектроскопия. – 1980 – 49, №5 – с. 1011-1013.
7. Кондilenко И.И., Коротков П.А., Фелінський Г.С. Диэлектрические свойства нецентросимметричных кристаллов и их связь с комбинационным рассеянием света // Квантовая электроника. – 1981 – 21 – с. 49-64.
8. K.J. Blow, D. Wood. Theoretical description of transient stimulated Raman scattering in optical fibers // IEEE J. Quant. Electron. – 1989 – 25, N 12 – pp. 2665-2673.

Надійшла до редколегії 24.05.07

УДК 621.385.833

Мельник П.В., канд. фіз.-мат.наук, проф.,
Находкін.М.Г., докт. фіз.-мат.наук, проф.,
академік НАН,
Федорченко М.І., канд. фіз.-мат.наук

Формування та електронні властивості інтерфейсу Sb/Ge(111)

За допомогою методів дифракції повільних електронів, фото- та Оже-електронної спектроскопії досліджені структура та електронні властивості інтерфейсів Sb/Ge(111). Встановлено перехід від $c(2 \times 8)$ до 7×7 структури на поверхні Ge(111) після нанесення 0,4–0,8 МЛІ Sb та наступного відпалу до 350°C . Досліджено особливості змін електронної структури валентної зони, загибу зон та роботи виходу в залежності від θ_{Sb} та температури відпалу інтерфейсів.

Ключові слова: Ge(111) 7×7 , Sb, інтерфейс, робота виходу, загин зон.

*E-mail: mif@univ.kiev.ua

Вступ

Моношарові покриття атомів Sb на поверхнях Ge і Si є технологічно важливими, бо вони застосовуються для виготовлення дельта-легованих структур, як сурфактанти для покращення умов епітаксialного росту Si/Ge гетероструктур [1–3]. Дослідження фізико-хімічних процесів хемосорбції елементів III та V груп має важливе значення для оптимізації епітаксії $A_{\text{III}}B_{\text{V}}$ напівпровідників на Si і Ge.

Незважаючи на те, що адсорбція Sb на поверхні Ge(111) досить широко досліджувалась [4–7], залишаються питання, відповіді на які потребують додаткових досліджень. Зокрема, недостатньо даних, які б дозволили побудувати структурні фазові діаграми системи Sb/Ge(111), ще не досліджувалися зміни загибу зон та роботи виходу під час формування інтерфейсу Sb/Ge(111) при температурах вищих за кімнатну.

Метою цієї роботи було дослідити структурні фазові стани інтерфейсу Sb/Ge(111) та їх взаємозв'язок з електронними властивостями цієї системи за допомогою методів дифракції повільних електронів та електронної спектроскопії.

P.V.Melnik, Ph.D., prof, M.G.,
Nakhodkin, D.Sc., prof., acad. of NAS Ukraine,
M.I. Fedorchenko, Ph.D.

Formation and electronic properties of the Sb/Ge(111) interface.

The structure and the electronic properties of the Sb/Ge (111) interfaces have been studied by use of low energy electron diffraction, photoelectron and Auger electron spectroscopies. The change from $c(2 \times 8)$ to 7×7 structure of the Ge(111) surface after deposition 0,4–0,8 ML and subsequent annealing to 350°C is determinated. The peculiarities of changes of valence band electronic structure, band bending and work function depending on θ_{Sb} and interface annealing temperature are investigated.

Keywords: Ge(111) 7×7 , Sb, interface, work function, band-bending

Методика експерименту

Дослідження проводились у надвисоковакуумній камері з базовим тиском $\sim 2 \cdot 10^{-10}$ тор, яка була оснащена методиками Оже електронної спектроскопії (ОЕС), дифракції повільних електронів (ДПЕ) та ультрафіолетової фотоелектронної спектроскопії (УФЕС) з енергією квантів у діапазоні 7–10,8 еВ. В камері містилась іонна гармата для очищення досліджуваної поверхні Ge іонами Ag та система для контрольованого нанесення шарів Sb заданої товщини *in situ*. Дані ОЕС, ДПЕ та ФЕС дозволяли визначати елементний склад поверхні, її кристалографічну структуру, електронну структуру валентної зони, роботу виходу та величини загибу зон.

Зразки Ge вирізались із (111) пластини нічим спеціально не легованої. Після попередньої обробки (промивка в перекисі водню та в деіонізованій воді) зразок очищався за допомогою декількох циклів бомбардування іонами Ag та наступного прогріву при 700°C . Вибраний стандартний метод очистки дозволяв отримувати кристалічні поверхні зразків Ge(111) без ознак домішок в спектрах ОЕС та з

контрастними картинками ДПЕ, що відповідали надструктурі $c(2 \times 8)$.

Потік парів Sb отримувався за допомогою джерела Кнудсена, а ступінь покриття поверхні атомами Sb (Θ_{Sb}) визначався за допомогою спеціально проградуєваних кварцових терезів. Швидкість нанесення Sb становила приблизно 0,03 МШ за хвилину. Робота виходу (ϕ) визначалась, як і в статтях [6, 8], за допомогою співвідношення Ейнштейна при $h\nu = 7,7 \text{ eV}$. Зміна загину зон (ΔY) оцінювалась за зміною положення спектральних особливостей фотоелектронних максимумів sp^3 гібридизованих електронів ФЕС Ge, вимірюваних при $h\nu = 10,2 \text{ eV}$. Похибка при вимірюванні ϕ та ΔY становила $\pm 0,01 \text{ eV}$.

Результати експериментів та їх інтерпретація

Формування інтерфейсів атомів Sb з поверхнею Ge(111) $c(2 \times 8)$ відбувалось двома способами. У першому з них атоми Sb наносилися послідовними порціями (поетапно) при температурі, близькій до кімнатної. Після кожного етапу напорошення описувались або фотографувались картини ДПЕ, вимірювались спектри ФЕС і ОЕС. Другий спосіб відрізнявся тим, що після кожного етапу нанесення Sb при кімнатній температурі мав місце прогрів системи до $\approx 350^\circ \text{C}$ протягом 2 хвилин. Незважаючи на те, що спостереження ДПЕ вимушено робилися під

кутом $\approx 48^\circ$ і деякі рефлекси картин ДПЕ випадали з поля зору об'єктива фотокамери, у всіх випадках можливо було легко ідентифікувати повну симетрію розташування рефлексів. Очищена від домішок та відпалена атомарно чиста поверхня Ge(111) завжди мала чітку картину рефлексів $c(2 \times 8)$ (рис. 1а). При поетапному напиленні атомів Sb на таку поверхню при кімнатній температурі з ростом Θ_{Sb} рефлекси $c(2 \times 8)$ втрачали свою інтенсивність і контрастність. При $\Theta_{Sb} = 1 \text{ МШ}$ на картині ДПЕ спостерігались ослаблені рефлекси структури 1×1 , а при $\Theta_{Sb} > 3 \text{ МШ}$ рефлексів взагалі не спостерігалось. Це свідчить, що при адсорбції атомів Sb на Ge(111) $c(2 \times 8)$ має місце аморфізація приповерхневого шару. Якщо після напилення атомів Sb при кімнатній температурі поверхня прогрівалась до $\approx 350^\circ \text{C}$, поведінка картин ДПЕ кардинально відрізнялась. Після адсорбції атомів Sb у діапазоні $\Theta_{Sb} \approx 0,1 - 0,3 \text{ МШ}$ спостерігалось розмивання і поступове зникнення дробових рефлексів. При $\Theta_{Sb} \geq 0,4 \text{ МШ}$ на дифракційній картині з'являлись дробові рефлекси, які засвідчували про початок формування надструктури 7×7 . При $\Theta_{Sb} \approx 0,6 \text{ МШ}$ система рефлексів надструктури 7×7 була найбільш чіткою (рис. 1б).

Якщо після напилення атомів Sb при кімнатній температурі поверхня прогрівалась до $\approx 350^\circ \text{C}$, поведінка картин ДПЕ кардинально відрізнялась. Після адсорбції атомів Sb у межах $\Theta_{Sb} \approx 0,1 - 0,3 \text{ МШ}$ спостерігалось розмивання і

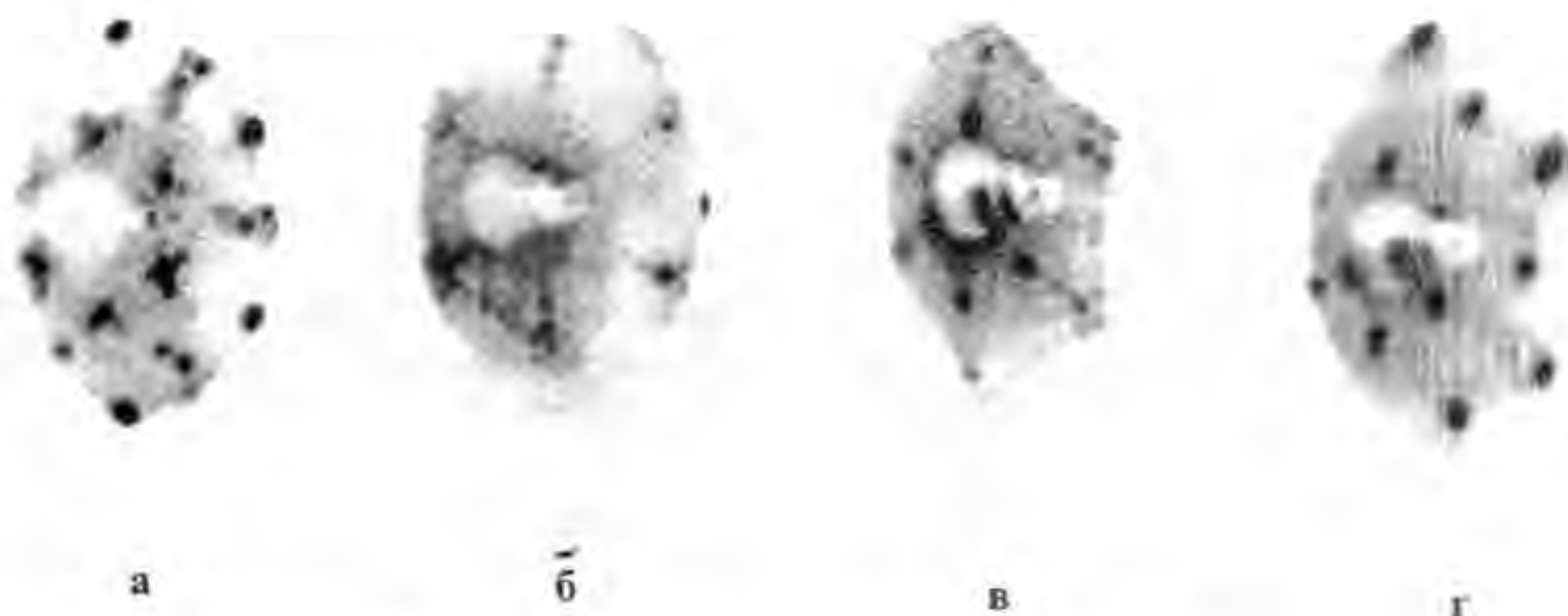


Рис. 1. Фотографії картин ДПЕ від поверхні Ge(111)- $c(2 \times 8)$ при адсорбції на ній атомів Sb та відпалюванні системи до 350°C . Ступінь покриття та енергія електронів: а- $\Theta_{Sb} = 0 \text{ МШ}$, $E_p = 20 \text{ eV}$; б- $\Theta_{Sb} \approx 0,6 \text{ МШ}$, $E_p = 32 \text{ eV}$; в- $\Theta_{Sb} \approx 0,8 \text{ МШ}$, $E_p = 25 \text{ eV}$; г- $\Theta_{Sb} \approx 1 \text{ МШ}$, $E_p = 20 \text{ eV}$. Кут фотографування $\approx 48^\circ$ відносно осі електронної гармати.

поступове зникнення дробових рефлексів. При $\theta_{\text{Sb}} \geq 0,4$ МШ на дифракційній картині з'являлись дробові рефлекси, які засвідчували про початок формування надструктури 7×7 . При $\theta_{\text{Sb}} \approx 0,6$ МШ система рефлексів надструктури 7×7 була найбільш чіткою (рис. 1б). При подальшому збільшенні покриття при $\theta_{\text{Sb}} \approx 0,8$ МШ до рефлексів 7×7 приєднувались додаткові рефлекси (рис. 1 в), що свідчить про співіснування на поверхні двох фаз – 7×7 і 2×1 . При подальшому збільшенні покриття до 1 МШ встановлювалась чітка система рефлексів (рис. 1г), яка свідчила про формування надструктури 2×1 [5-7]. Якщо початкове значення θ_{Sb} було більшим 1МШ, то після прогріву результуюче покриття зменшувалось до 1 МШ, і зберігалась картина рефлексів 2×1 ДПЕ. Ці дані дозволяють дійти висновку, що відпал інтерфейсів Sb/Ge(111) стимулює їхню структурну перебудову, яка залежить від θ_{Sb} . З ростом θ_{Sb} структура підкладки $c(2 \times 8)$ трансформується в надструктуру 7×7 , яка вперше спостерігалась нами на такому інтерфейсі [5]. Інші літературні дані про надструктуру 7×7 у інтерфейсів Sb/Ge(111) нам не відомі, хоча така надструктура спостерігалась на відпалених інтерфейсах Ge з іншими металами, наприклад, оловом [9]. Така перебудова може відбуватися внаслідок взаємодії атомів Sb з атомами Ge, бо навіть при незначному проникненні атомів Sb у підкладку виникають достатні для цього латеральні напруження [7]. При $\theta_{\text{Sb}} \approx 1$ МШ структура 7×7 перебудовується в структуру 2×1 . Остання наводиться в розрахункових роботах як найбільш енергетично вигідна структура [10], яка утворюється з π -зв'язаних ланцюжків. Вона, дійсно, спостерігається за допомогою СТМ на відпалених інтерфейсах [7].

Надструктура $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ яка досить часто спостерігається на відпалених інтерфейсах металів із поверхнями кремнію, нами не спостерігалась, що узгоджується з даними роботи [7], і з посиланнями зробленими в цій роботі.

На рисунках 2 і 3 зображені ФЕС ($h\nu = 7,7$ еВ та 10,2 еВ, відповідно) верхнього краю валентної зони інтерфейсу Sb/Ge(111) $c(2 \times 8)$ при різних θ_{Sb} для випадку, коли після кожного наплення система прогрівалась до $\approx 350^\circ\text{C}$ протягом 2 хвилин. Для атомарно чистої поверхні Ge(111) $c(2 \times 8)$ ФЕС (криві а) спектри ФЕС є подібними до літературних [11, 12]. З рисунку 2 видно, що з ростом θ_{Sb} збільшується густина станів біля E_F . Найбільша густина станів біля E_F спостерігається при $\theta_{\text{Sb}} \approx 0,6$ МШ (крива в), коли на картинах ДПЕ

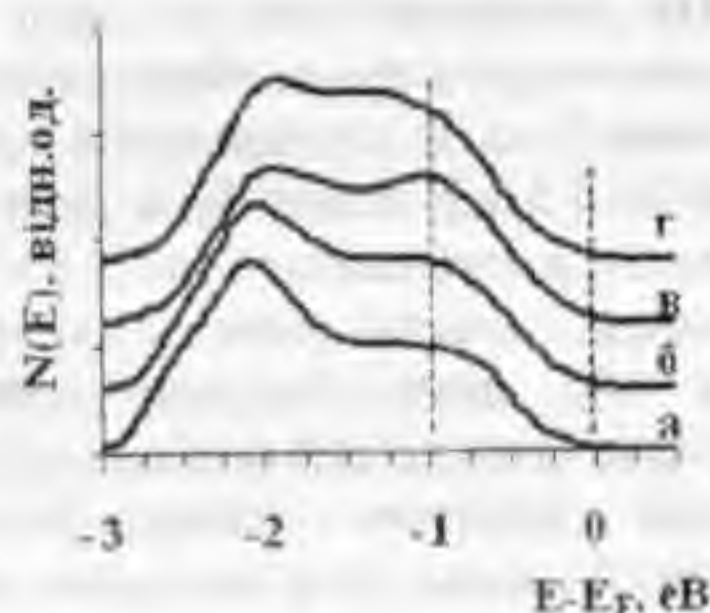


Рис. 2. ФЕС ($h\nu = 7,7$ еВ) верхньої частини валентної зони інтерфейсу Sb/Ge(111): а– Ge(111) $c(2 \times 8)$; б– Ge(111) $\delta(2 \times 8)$:Sb ($\approx 0,2$ МШ); в– Ge(111) 7×7 :Sb ($\approx 0,6$ МШ); г– Ge(111) $7 \times 7 - 2 \times 1$:Sb ($\approx 1,0$ МШ).

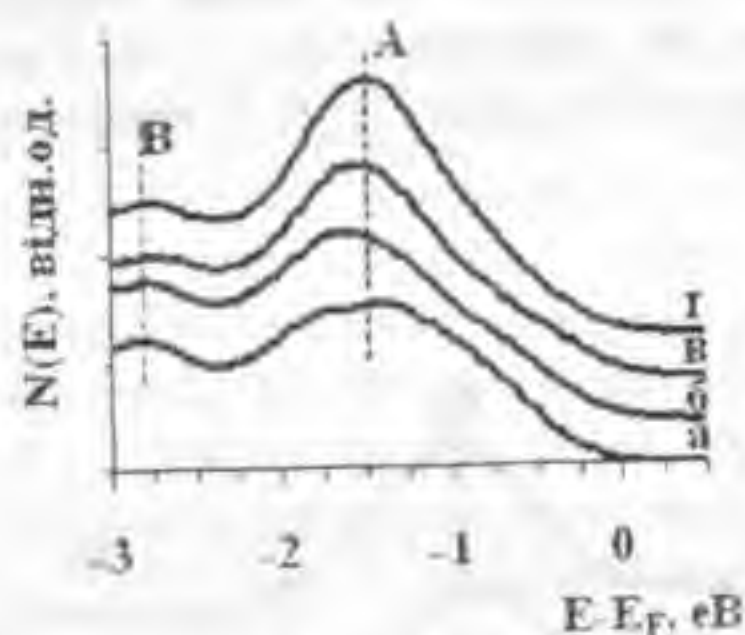


Рис. 3. ФЕС ($h\nu = 10,2$ еВ) верхньої частини валентної зони інтерфейсу Sb/Ge(111): а– Ge(111) $c(2 \times 8)$; б– Ge(111) $\delta(2 \times 8)$:Sb ($\approx 0,2$ МШ); в– Ge(111) 7×7 :Sb ($\approx 0,6$ МШ); г– Ge(111) $7 \times 7 - 2 \times 1$:Sb ($\approx 1,0$ МШ).

видно найбільш чітку структуру 7×7 (фото в на рис.1). З положення низькоенергетичного краю кривих ФЕС встановлено, що поверхня з надструктурою 7×7 має найбільшу роботу виходу серед досліджуваних поверхонь.

Особливості А ($\approx 1,5$ еВ) та В ($\approx 2,8$ еВ) нижче E_F на ФЕС при $h\nu = 10,2$ еВ (рис. 3) є максимумами об'ємної емісії [11, 12]. Збільшення θ_{Sb} та прогрів змінюють положення та інтенсивність максимуму А і положення відносно E_F максимуму В (криві б–г). Зсув максимумів А і В відносно E_F обумовлений зміною загину зон поблизу поверхні.

Зміни густини станів поблизу E_F більш чітко видно на рис. 4, де представлені різницьеві спектри між спектрами від поверхонь з певним

Θ_{Sb} (спектри б, в, г рисунка 3) і спектром від атомарно чистої поверхні Ge(111) c(2x8) (спектр а рис. 3). На різницевих спектрах видно суттєву зміну густини станів в трьох областях нижче E_F . Сплески станів S_1 та S_3 , розташованих відповідно на 0,25 eV та 1,5 eV нижче E_F є додатніми, а сплеск стану S_2 , розташованого на $\approx 0,8$ eV нижче E_F – від'ємний. Додатні сплески свідчать про збільшення або появу густини відповідних станів. Від'ємні сплески свідчать про зменшення густини вже існуючих станів. Зменшення густини стану S_2 може бути викликане тим, що при адсорбції атоми Sb насичують обірвані зв'язки атомів Ge і зменшують густину відповідних поверхневих станів. Збільшення густини станів S_1 є найбільшим на різницевої кривій б, яка характеризує поверхню з надструктурою 7x7. Таке збільшення густини станів впритул до E_F свідчить про металізацію поверхневих станів, яка має місце для структури 7x7, що характерно для таких надструктур, отриманих для поверхонь Ge(111) при адсорбції атомів Ge на Si(111)7x7 [13]. З переходом до

поверхневих електронних станів, обумовлених напруженнями зв'язків між атомами Sb та Ge, як це було запропоновано для пояснення змін в структурі валентної зони при адсорбції Sb на Ge(100)2x1 [15], при адсорбції As на Ge(111) [16], при сегрегації атомів бора в приповерхневій області Si(111) прогрітих легованих B зразків Si(111) [17]. У порівнянні зі станами S_3 зміни густини станів S_1 і S_2 менш відчутні. Порівняно мала чутливість до зміни густини станів S_1 і S_2 може бути пов'язана з відмінністю між глибинами локалізації цих станів (≈ 1 МШ) та глибиною виходу фотоелектронів при $h\nu = 10.2$ eV (≈ 12 А [18]). Той факт, що зміна густини станів S_3 набагато більш відчутна, можна пояснити співрозмірністю глибини виходу фотоелектронів та глибини локалізації приповерхневих станів S_3 , обумовлені збільшенням напруженості Ge-Ge зв'язків в приповерхневій області товщиною 3–4 моношари.

На рисунку 5 представлені залежності зміни загибу зон ($\Delta\chi$) поблизу поверхні та роботи

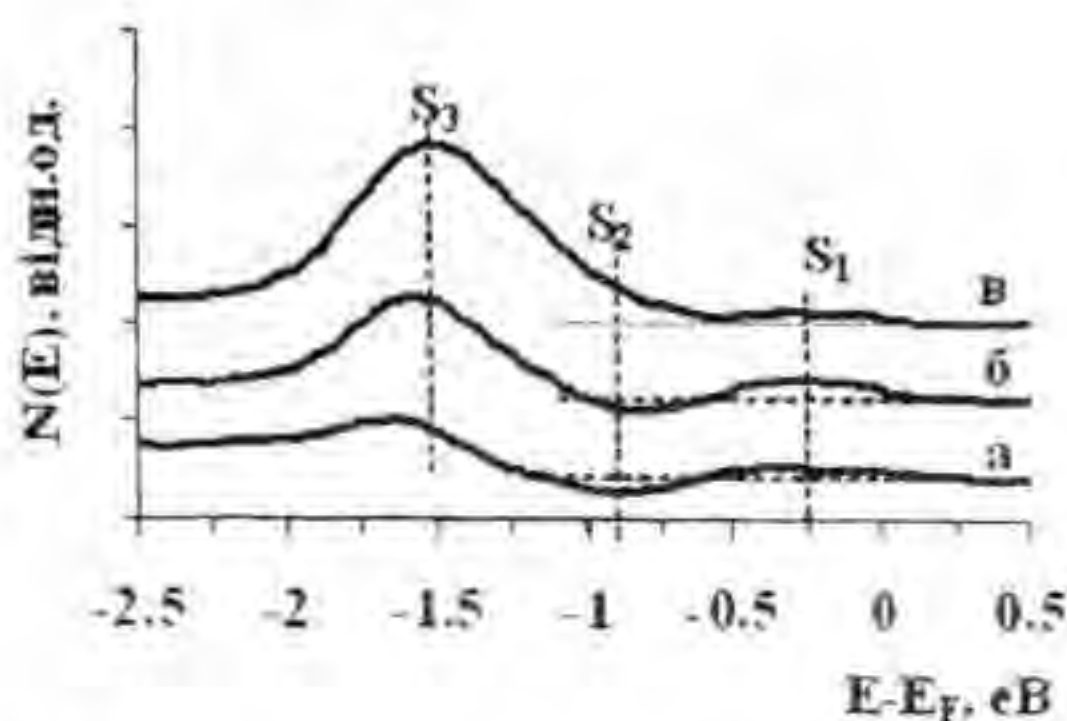


Рис. 4. Різницеві спектри між ФЕС спектрами від поверхонь з певним Θ_{Sb} (спектри б, в, г рисунка 3) і спектром від атомарно чистої поверхні Ge(111) c(2x8) (спектр а рис. 3): а– $\Theta_{\text{Sb}}=0,4$ МШ, б– $\Theta_{\text{Sb}}=0,6$ МШ, в– $\Theta_{\text{Sb}}=1$ МШ.

структури 2x1 густина станів S_1 дещо зменшується (крива в рис. 4). Збільшення густини станів S_3 (співпадають з положенням станів об'ємної особливості А з рис.3) має місце у всьому діапазоні збільшення Θ_{Sb} від 0 до 1 (до максимально можливого значення при прогріві системи). Це збільшення не обумовлене змінами, які могли б бути внаслідок появи в електронній структурі валентної зони особливостей, характерних для атомів Sb [14]. На нашу думку це може бути спричинено появою

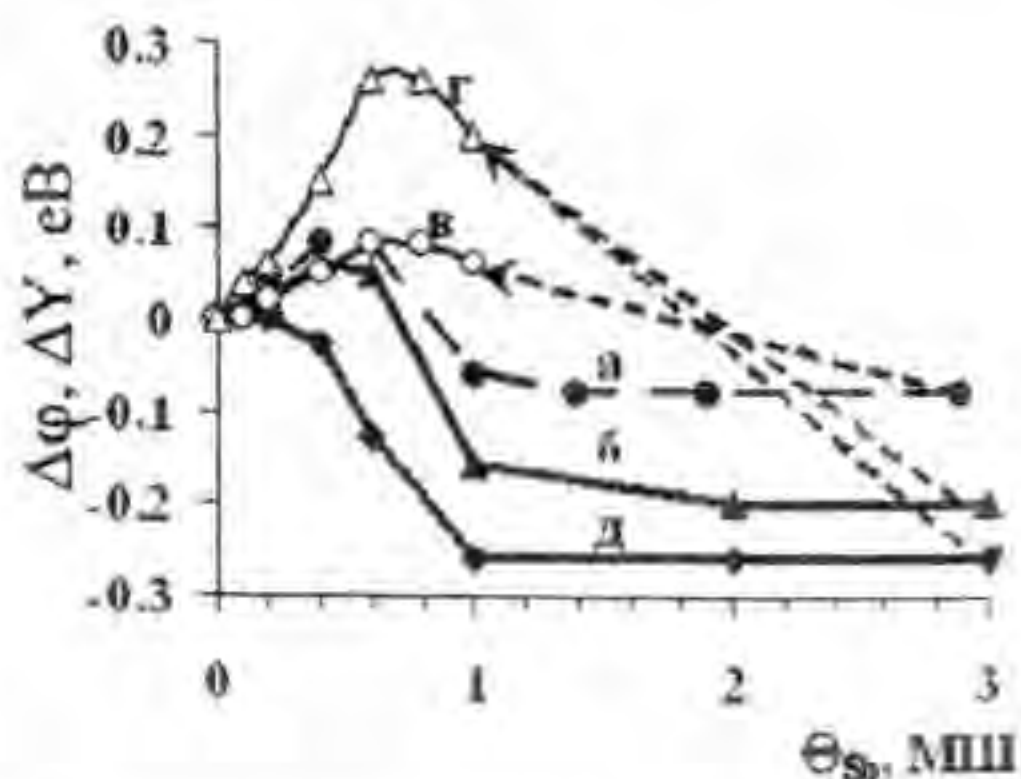


Рис. 5 Зміна загибу зон ($\Delta\chi$) та роботи виходу ($\Delta\phi$) системи Sb/Ge(111) в залежності від Θ_{Sb} та прогріву: а– $\Delta\chi$ при кімнатній температурі; б– $\Delta\phi$ при кімнатній температурі, в– $\Delta\chi$ після прогріву до 350°C, г– $\Delta\phi$ після прогріву до 350°C; д– $\Delta\phi$ для випадку напилення Sb на аморфізовану поверхню а-Ge(111). Стрілками показані зміни відповідних параметрів після прогріву до 350°C.

виходу ($\Delta\phi$) поверхні інтерфейсу Sb/Ge(111) для трьох способів його формування. Зміна роботи виходу визначалась за величинами зсуву низькоенергетичного краю кривих ФЕС, отриманих при енергії квантів 7.7 eV (рис. 2). Загин зон визначався за енергетичним зсувом особливості В ФЕС, отриманих при $h\nu = 10.2$ eV (рис 3). З рисунка 5 видно, що зі збільшенням Θ_{Sb}

в діапазоні $0 - 0.6$ МШ при кімнатній температурі зони загинаються вгору (крива а), а робота виходу синхронно збільшується (крива б). При подальшому збільшенні θ_{Sb} зони загинаються вниз, робота виходу зменшується до величини, характерної для об'ємного Sb [19], а приповерхнева область при цьому розупорядковується (що видно з картин ДПЕ). Прогрів такої системи до 350°C призводить до десорбції атомів Sb у кількості, що перевищує $\theta_{\text{Sb}} = 1$ МШ, до впорядкування приповерхневої області, до різкої зміни загиначи зон та роботи виходу (показано пунктирними стрілками).

У випадку поетапної адсорбції Sb, що супроводжується прогрівом після кожного напорошення, загин зон (крива в) і робота виходу (крива г) у діапазоні зміни θ_{Sb} від 0 до 0.6 МШ синхронно збільшуються на 0.08 eV і 0.28 eV, відповідно, і досягає максимума. Цей максимум роботи виходу та загиначи зон відповідає $\theta_{\text{Sb}} = 0.6 \div 0.8$ МШ, при якому поверхня має найбільш чітку структуру 7×7 . З подальшим збільшенням θ_{Sb} до 1 і переходу до надструктури 2×1 величини змін загиначи зон і роботи виходу зменшуються до 0.06 eV і 0.2 eV відповідно, відносно цих характеристик для атомарно чистої поверхні Ge(111)-c(2x8). Тобто, при переході від структури 7×7 до структури 2×1 загин зон зменшується на 0.02 eV, а робота виходу на 0.08 eV. Це означає, що зміна роботи виходу при такому переході обумовлена зміною електронної спорідненості і зміною загиначи зон. Значення змін загиначи зон і робіт виходу прогрітих інтерфейсів Sb/Ge(111), отриманих різними способами співпадають між собою. Різниця в загиначи зон упорядкованої і розупорядкованої структур досягає ≈ 0.2 eV, а роботи виходу – 0.4 eV. Для порівняння на рисунку показано зміну роботи виходу аморфізованої іонами Ag поверхні a-Ge(111) при адсорбції на неї атомів Sb (крива д).

Однією із причин суттєвої різниці структури і властивостей відпалених і не відпалених інтерфейсів Sb/Ge може бути те, що при кімнатній температурі на поверхню Ge підкладинки осаджуються, здебільшого, кластери Sb_4 [20]. Вони малорухливі, й покриття Sb складається з ділянок Ge(111)-c(2x8), ділянок із кластерами Sb_4 і ділянок германію, які закінчуються димерами Sb. Тому в області малих значень $\theta_{\text{Sb}} < 0.3$ МШ спостерігається збільшення $\Delta\phi(\theta_{\text{Sb}})$ і $\Delta Y(\theta_{\text{Sb}})$. При більших θ_{Sb} утворюється шар Sb, у якому відсутній дальній порядок, а електронні властивості наближаються до

властивостей сурми: $\phi(\theta_{\text{Sb}} > 2 \text{ МШ}) \rightarrow \phi_{\text{Sb}} \approx 4.5 \div 4.6 \text{ eV}$ [19].

При відпалах відбувається дисоціація кластерів Sb_4 , у наслідок чого утворюються, як показують СТМ досліді [10], шари димерів Sb, які заміщують відповідні димери Ge. При цьому взаємодія атомів Sb і Ge може призводити до зміни механічних латеральних напружень, що може стимулювати утворення нової для цих систем надструктури (7×7). При $\theta_{\text{Sb}} > 0.8$ МШ починає формуватись майже ідеальний рівноважний шар з надструктурою (2×1), у якому відбувається перенесення електронного заряду у ковалентному зв'язку Sb-Ge $q = 0.01e$ [7]. Така зміна заряду призводить до зміни роботи виходу на ~ 0.3 eV, що відповідає значенню отриманому за результатами експерименту. Якщо використати $q = 0.01e$, $N_{\text{Sb}} = 7.22 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$ і $d_{\text{Sb}} = 0.23 \text{ нм}$, то $\Delta\phi = 4\pi q e^2 N_{\text{Sb}} d_{\text{Sb}} \approx 0.3 \text{ eV}$.

Висновки

Дослідження не відпалених і відпалених інтерфейсів Sb/Ge(111) з різними θ_{Sb} показали, що вони суттєво відрізняються структурою й електронними властивостями. Поверхні, утворені осадженням атомів Sb на Ge(111) при кімнатній температурі з ростом θ_{Sb} поступово втрачають дальній порядок в розташуванні атомів. Відпал поверхонь Ge(111) з напорошеними при кімнатній температурі атомами Sb призводить до утворення структур з дальнім порядком. Надструктури змінюються від вихідної Ge(111) c(2x8) при $\theta_{\text{Sb}} = 0$ до: a-c(2x8) + (1x1) при $0 \text{ МШ} \leq \theta_{\text{Sb}} \leq 0.4 \text{ МШ}$; б-(7x7) при $0.4 \text{ МШ} \leq \theta_{\text{Sb}} \leq 0.8 \text{ МШ}$; в-(7x7)+(2x1) при $0.8 \text{ МШ} \leq \theta_{\text{Sb}} \leq 0.9 \text{ МШ}$; г-(2x1) при $\theta_{\text{Sb}} = 1 \text{ МШ}$. Надструктура (7x7), яка вперше спостерігалась на інтерфейсі Sb/Ge(111), є результатом взаємодії його атомів, внаслідок чого виникає напруження в приповерхневому шарі і обмін зарядами між об'ємом і поверхнею. Для поверхні Ge(111) з надструктурою 7x7 характерно найбільше значення роботи виходу та зміни загиначи зон порівняно з атомарно чистою поверхнею Ge(111) c(2x8).

Робота виконувалась за бюджетного фінансування та часткового фінансування Міністерства та науки України, грант М/175-2007.

Список використаних джерел

1. Aart A. van Gorkum, Kiyokazu Nakagawa and Yasuhiro Shiraki. Controlled Atomic Layer Doping and ALD MOSFET Fabrication in Si // Jpn. J. Appl. Phys. -1987.-26.- P.L1933-1936.
2. Th. Schmidt, R. Kröger, T. Clausen, and J. Falta, A. Janzen, M. Kammler, P. Kury, P. Zahl, and M. Horn-von Hoegen. Surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si(111): Beyond the surface // Appl.Phys. Lett.- 2005.- 86.- P.1119-1126.
3. T. Kendelewicz J. C. Woicik K. E. Miyano S. A. Yoshikawa, P. Pianetta, W.E. Spicer. Structural study of monolayers of Sb on Ge(111) with different surface reconstructions // J. Vac. Sci. & Technol. A: Vacuum, Surfaces, and Films -1994.-12, N4.- P.1843-1847.
4. Cao Yi-Gang, Jiao Zheng-Kuan, A. Antons, K. Schroeder and S.Blügel. Stable Structure of the Sb Monolayer on a Strained Ge(111) Substrat // Chinese Phys. Lett. - 2002.- 19. -P.259-261.
5. M. I. Fedorchenko and M. G. Nakhodkin. Formation and properties of the antimony germanium (111) interfaces // Праці II Міжнародної конференції "Електроніка та прикладна фізика", 11-14 жовтня 2006 року, Київ, Україна С.54
6. М.Г. Находкін, М.І. Федорченко, Формування інтерфейсу Sb/Ge(111) // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки.- 2006.- вип. 4. -С.323-332.
7. M. Kuzmin , P. Laukkanen, R.E. Perala., M. Ahola-Tuomi, I.J. Vayrynen. Atomic geometry and electronic properties of the Ge(111)2x1-Sb surface studied by scanning tunneling microscopy /spectroscopy and core-level photoemission // Surface Science -2007. -601.- P.837-843
8. М.Г. Находкін, М.І. Федорченко. Залежність роботи виходу поверхні Si(001) від ступені покриття її вісмутом // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. -2004.- вип. 4. -С.373-378.
9. T. Ichikawa and S. Ino. Ge(111) 7×7 surface structure induced by Sn // Solid State Communications -1978. -27, N4. - P.483-486
10. N. Takeuchi, A. Selloni, A.I. Shkrebtii. Structural and electronic properties of the (111)2x1 surface of Ge from first-principles calculations // Phys. Rev.B-1991. -44, №24. -P.13611-13617.
11. D.E. Eastman, W.D. Grobman. Photoemission densities of Intrinsic Surface States for Si, Ge and GaAs. // Phys.Rev.Lett. -1972. -28, N21.- P.1378-1381.
12. T. Murotani, K.Fujiwara and M. Nishijima. Photoemission measurements of surface states for cleaved and annealed Ge(111) surfaces // Phys.Rev.B. -1975. -12, N6. -P.2424-2426.
13. H.-J. Gossmann, J. C. Bean, L. C. Feldman, E. G. McRae, and I. K. Robinson. 7x7 Reconstruction of Ge(111) Surfaces under Compressive Strain Surface // Phys. Rev. Lett. -1985. -55, N10. -P.1106-1109.
14. Matten-Klosson M., Strumpler R, Luth H. Electronic structure of Sb overlayers on GaAs(110). // Phys. Rev. B. -1991. -44, №24.- P.13611-13617.
15. M.C. Hakansson, U.O. Karlsson, J. Kanski, P.-O. Nilsson, Y. Khazmi and K. Hricovini. Dimer formation and electronic structure on the Ge(111)(2x1):Sb surface // Surface Science Letters -1992. -278. -P.L131-134.
16. R.D. Bringans, R.I.G. Uhrberg, R. Z. Barchrach, and John E. Northrup. Arsenic-Terminated Ge(111): An Ideal 1x1 Surface // Phys. Rev. Lett. -1985. -55, N5. -P.533-536.
17. Efthimios Kaxiras, K. C. Pandey, F. J. Himpsel, R. M. Tromp. Electronic states due to surface doping: Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ B // Phys.Rev.B. -1990. -41, N2. -P.1262-1265.
18. Wagner L.F, Spicer W.E. Photoemission study of the effect of bulk doping and oxygen exposure on silicon surface states // Phys.Rev.B. -1974. -9. -P.1512-1515.
19. Д.А. Городецкий, Ю.П. Мельник, Д.П. Проскурин, В.А. Усенко Структура и электронные свойства пленок сурьмы на Mo(110) // Физика твердого тела -2004. -46, вып. 10. -С.1873-188
20. B. Garni, I.I. Kravchenko, C.T. Salling. // STM studies of the initial stages of Growth of Sb on Si(100) Surface // Surface Science -1999. -423. -P.43-52

Надійшла до редколегії 10.06.2007

УДК 621.39

Мисник А.В., к.ф.-м.н., м.н.с., Кононов* М.В.,
к.ф.-м.н., доц.

Прогнозування втрат пакетів у телекомунікаційній інфраструктурі за флуктуацією затримки

В статті запропоновано модель для аналізу параметрів, що описують якість телекомунікаційних з'єднань і введено кореляційну функцію для головних параметрів якості обслуговування. Показано, що параметри каналів зв'язу, які пов'язані зі смугою пропускання, затримка і коефіцієнт втрат, корелюють між собою, а також доведено, що вони можуть бути описані та передбачені за допомогою представленої функціональної моделі. Наведені результати експериментальної перевірки запропонованої кореляційної моделі.

Ключові слова: затримка, коефіцієнт втрат, кореляційна функція, якість обслуговування.

*E-mail: amysnyk@univ.kiev.ua, mvk@univ.kiev.ua

Більшість втрат пакетів у глобальних телекомунікаційних мережах пов'язана з переповненням деяких каналів трафіком. Від втрат звичайно потерпають прикладні програми, які є чутливими до втрат і не дозволяють використовувати механізми повторної пересилки пакетів, тому потрібно запропонувати механізми, які дозволяють заздалегідь прогнозувати переповнення каналів і втрати з деякою ймовірністю [1]. Даний механізм також може використовуватися для певних типів прикладних реалізацій, як, наприклад, для бездротових мереж, як механізм контролю потоку і швидкості передачі даних, що дозволить підвищити параметри якості обслуговування (QoS, Quality of Service) в телекомунікаційних структурах [2]. Нижче буде запропоновано формальний опис, який дозволяє відстежити поведінку параметрів затримки потоку даних в телекомунікаційній мережі і експериментальне дослідження запропонованого підходу. Базова ідея технології прогнозування втрат пакетів даних в каналах ґрунтується на відстеженні трендів затримки передачі пакету в одному напрямку, що дає змогу встановити ймовірність відкидання пакету залежно від наявної смуги пропускання каналів і переповнення каналу [2,3].

A.V. Mysnyk, Ph.D., M.V. Kononov*, Ph.D.

Delay variation based packet loss prediction technique in telecommunication links

The new model which describes link quality of service and link parameters correlation function are presented. It is shown, that telecommunication link characteristics – delay and loss ratio correlate and it is proven that they can be described and loss can be predicted based on proposed delay variation measurement. Experimental results on proposed model are given.

Key Words: delay, loss, correlation function, quality of service.

В нашому підході ми позначимо мінімальну затримку передачі потоку даних як базову затримку, коли в каналах не має заторів, а також уведемо таке поняття, як порогове значення, тобто граничне значення, при якому починають спостерігатися втрати, тобто максимальний поріг затримки, при якому ймовірність відкидання пакетів значно зростає.

Раніше було показано [5,6], що між затримкою і втратами в телекомунікаційних мережах є кореляція, яку можна оцінити за допомогою коефіцієнту дисперсії пакетів [7], а також смуги пропускання і фактичної ємності каналу. На жаль, дисперсія дає змогу оцінити ймовірність втрат не дуже точно. Для відстеження трендів затримки нами буде введена характеристична функція, яка дозволить визначити шаблони трендів і порогові значення, а також дозволить більш точно прогнозувати втрати в з'єднаннях.

Модель кореляції параметрів затримки і втрат

Завантаженість маршруту в телекомунікаційній мережі може бути описана в термінах флуктуації затримки. Якщо маршрут від

відправника до одержувача містить n з'єднань ($i=1, 2, \dots, n$), пропускна спроможність кожного з яких дорівнює c_i , а доступна смуга пропускання – a_i , то завантаження каналу дорівнюватиме $u_i = (c_i - a_i)/c_i$. Для спрощення моделі ми вважаємо, що використовується черга FIFO (First In First Out) без додаткових механізмів відкидання пакетів. Також ми вважаємо, що джерело періодично відправляє p пакетів розміром l байт зі швидкістю r , тобто кожний пакет передається за час $t = l/r$. Таким чином крізь з'єднання $i+1$ за час t проходить потік даних, який дорівнює сумі потоків від каналів, що йому передують і власного трафіку – $r_i t + u_i c_i t$. Значення затримки дорівнюватиме [3,4]:

$$D_k = \sum_{i=1}^n \left(\frac{l}{c_i} + \frac{q_i^k}{c_i} \right) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{l}{c_i} + d_i^k \right), \quad (1)$$

різниця затримки між двома послідовними пакетами дорівнює [2,8]:

$$\Delta D_k = D_k - D_{k+1} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta q_i^k}{c_i} \right) = \sum_{i=1}^n \Delta d_i^k, \quad (2)$$

де як k і $k+1$ позначено два послідовних пакети, як q_i^k позначено розмір черги для i -го з'єднання на момент отримання k -го пакету, а d_i^k – затримка обробки відповідного пакету в черзі i -го каналу. Значення Δq_i^k розраховується як різниця відповідних значень для пакетів з номерами k і $k+1$, аналогічно розраховується значення Δd_i^k .

Таким чином, виходячи з (1) і (2) мінімальна затримка передачі потоку даних в одному напрямку передбачає, що затримка за рахунок обробки в черзі практично відсутня і базова затримка або референтне значення дорівнюватиме [2,8]:

$$D_0 = \sum_{i=1}^n \frac{l}{c_i}. \quad (3)$$

Слід зауважити, що параметр Δd_i^k для завантажених каналів зростатиме зі зменшенням доступної смуги пропускання каналу. Зміна розміру черги Δq_i^k може бути записана як різниця між потоком даних, що надходить в i -ий канал, і службовою вихідною швидкістю цього каналу: $(r_{i-1}t + u_i c_i t) - c_i t = (r_{i-1} - a_i)t$. Ця різниця більше нуля, тобто черга не є порожньою, коли $r_{i-1} > a_i$.

Тоді,

$$\Delta d_i^k = \begin{cases} \frac{r_{i-1} - a_i}{c_i} t, & r_{i-1} > a_i \\ 0, & r_{i-1} \leq a_i \end{cases} \quad (4)$$

Варто припустити, що не всі канали в мережі можуть бути перевантаженими одночасно, припустимо, наприклад, що є j каналів, для яких

виконується умова $r_{i-1} > a_i$, тоді, виходячи з (2) і (4), сумарна затримка дорівнюватиме:

$$\Delta D_k = \sum_{j=1}^m \frac{r_{i,j-1} - a_{i,j}}{c_{i,j}} t, \quad (5)$$

де j позначає перевантажені з'єднання і $j < i$.

Затримка у вигляді (5) має безпосередній зв'язок зі смугою пропускання каналу, а також демонструє очікувану поведінку – зменшується зі зростанням смуги пропускання і збільшується з її зменшенням. Для отримання параметра втрат пригадаємо, що ми припускаємо існування декількох каналів у мережі, для яких виконується $c_j < c_i$ ($i=1, \dots, n$; $j \neq i$), тобто $1/c_j > 1/c_i$ і $J/c_j \geq q/c_i$, де J – місткість черги j -го каналу. Якщо черга j -го каналу повністю заповнена, то затримка має вигляд:

$$D_i = \sum_{i=1, i \neq j}^n \frac{l}{c_i} + \frac{q_i^k}{c_i} + \frac{l+J}{c_j}. \quad (6)$$

D_i для повністю заповненої черги передачі (або прийому) даних є пороговим значенням, при якому спостерігаються втрати пакетів на каналі. Якщо поточне значення затримки більше, ніж D_i , це означає, що є висока ймовірність втрати наступного пакету. Виходячи з порівняння виразів (3) і (6), можна зауважити, що $D_i > D_0$, зокрема, порогове значення, при якому спостерігаються втрати в каналі, обмежене максимальним і мінімальним значенням затримки [2]:

$$\sum_{i=1}^n \frac{l}{c_i} + \frac{nJ}{c_j} \geq D_i \geq \sum_{i=1}^n \frac{l}{c_i} + \frac{J}{c_j}. \quad (7)$$

В (7) максимальне значення в лівій частині нерівності описує ситуацію, коли всі канали ($i=1, \dots, n$) інфраструктури переповнені трафіком, а мінімальне значення в правій частині – коли перевантажено тільки одне з'єднання (тобто є так званим "вузьким місцем", bottleneck, $i=1$).

Таким чином, ймовірність втрати k -го пакету в j -му каналі може бути описана за допомогою комбінації наступних параметрів, які пов'язані з затримкою – співвідношення поточної загальної затримки в черзі до найгіршої затримки в черзі (з (1-3), а також (6) і (7):

$$P = \frac{D_k - D_0}{D_i - D_0} = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^k}{\sum_{i=1, i \neq j}^n d_i^k + \frac{J}{c_j}}, \quad (8)$$

P приймає значення в діапазоні від 0 до 1. Швидкість зростання затримки можна записати як:

$$v = \frac{\partial D_k}{\partial t} = \frac{r_0 - a_j}{c_j} \quad (9)$$

Параметри (8) і (9), які далі ми будемо називати метриками, було використано для оцінки ймовірності втрат у певному каналі. Відстань затримки (8) є коефіцієнтом співвідношення затримки до порогового значення втрат в каналі, тренд у вигляді (9), як похідна, описує нахил і гладкість кривої зростання швидкості затримки.

Виходячи з наведеного вище опису, параметри затримки і втрат пов'язані між собою і мають корелювати. Для реалізації описаної моделі і оцінювання ймовірності втрат була введена характеристична функція, яка об'єднує необхідні для аналізу параметри. Для цього з (9) введено нормовані усереднені характеристичні метрики:

$$L = \frac{D_N - D_1}{\sum_{i=2}^N |D_i - D_{i-1}|}, \quad (10)$$

$$S = \max(-1, \min(1, \frac{D_i - D_{i-1}}{t_i - t_{i-1}})), \quad (11)$$

де N – довжина стійкого потоку пакетів, яку експериментально визначено, а t_i – часова мітка i -го пакету. Метрика L описує довготривалі характеристики потоку, тобто є довгочасовим трендом для послідовностей із 20-50 пакетів, а метрика S відображає короточасові тенденції для послідовностей із 5-10 пакетів. Метрики L і S , фактично, описують флуктуацію затримки в телекомунікаційному каналі, оскільки вони є усередненням. Параметри P (8) і L, S – (10), (11) – було внесено в характеристичну функцію у вигляді:

$$R(P, L, S) = w_1 P + w_2 L + w_3 S, \quad (12)$$

де $w_1 + w_2 + w_3 = 1$. Функція (12), яку далі ми будемо називати предиктором, набуває значення у діапазоні $[0, 1]$, тому виміряні значення затримки та коефіцієнту втрат також мають бути нормованими на максимальне отримане під час експерименту значення.

Результат досліджень та їх обговорення

Для експериментального дослідження запропонованого методу оцінювання втрат і затримки в мережі була створена телекомунікаційна структура, яка наведена на рис. 1.

Як джерело трафіку була використана програма з відкритим програмним кодом *iperf* [5], яка дозволяє генерувати TCP- і UDP-

сегменти із заданими характеристиками. В мережі було використано чотири джерела (n_1, n_2, n_3, n_4) і шість маршрутизуючих пристроїв, $r_1, r_2, \dots, r_6$ – апаратні маршрутизатори Cisco серії 2621, які дозволяють обробити до 25000 пакетів розміром 64 байта в секунду, або трафік 12,8 Мбіт/с, які з'єднані через послідовні інтерфейси (WIC2-T) каналами ($l_1, l_2, \dots, l_5$) з обмеженою смугою пропускання 128 Кбіт/с. Така схема і апаратні можливості пристроїв дозволяють емулювати мережу, в якій виникає перевантаження в каналах. Для тестування кожне джерело генерує вісім потоків даних зі збільшенням швидкості від 64 Кбіт/с до 8 Мбіт/с:

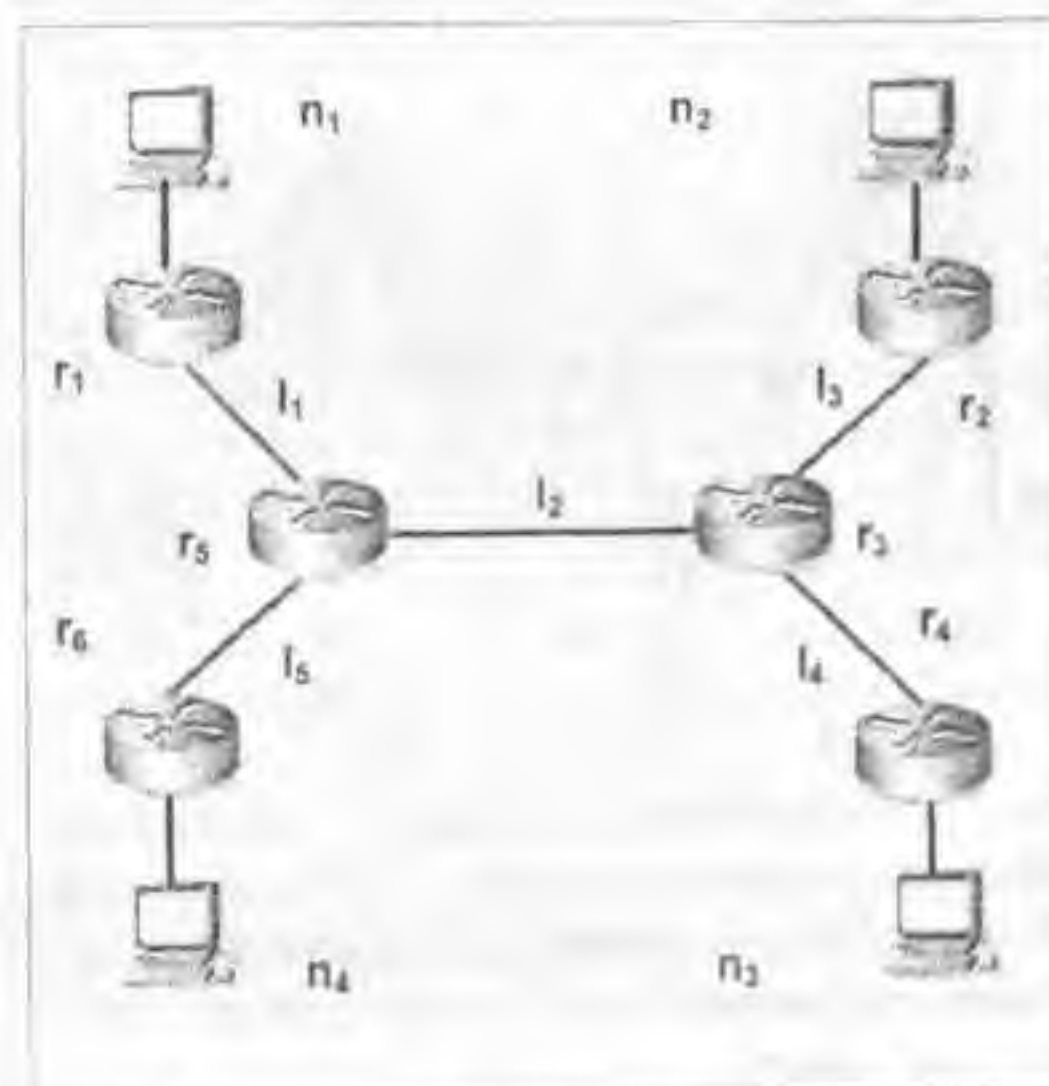


Рис. 1. Мережа-емулятор телекомунікаційної інфраструктури

сегменти розміром 64, 256, 512 і 1024 байтів протоколу UDP; а також сегменти з тими ж самими розмірами для протоколу TCP.

Така схема і шаблони трафіку були обрані для того, щоб земулювати перевантаженість.

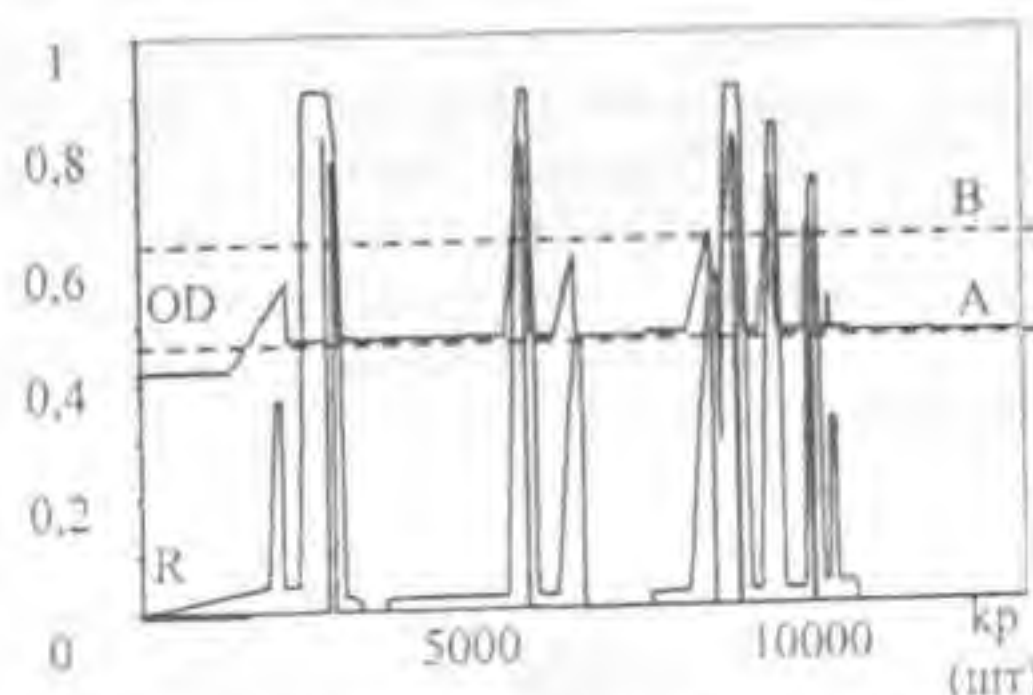


Рис. 2. Нормовані значення предиктору і затримки для каналу l_1 . R – предиктор, OD – затримка, A – базова затримка, B – поріг втрат, k_p – кількість пакетів

реальних каналів. На рис. 2 представлені результати вимірювань параметру затримки і функція предіктора для з'єднання I_1 . Для цього каналу, оскільки він знаходиться під невеликим завантаженням трафіком з одноманітним профілем, є характерним нерівномірне завантаження і пульсуючий характер потоків даних. Функція предіктора поводить для нього таким чином, що її значення (R) знаходяться між 0,63 і 0,93 для пакетів з великою затримкою (OD), що сигналізує високу ймовірність втрат пакетів і має невеликі значення (менше 0,2) для інших ділянок. Таким чином, ця функція описує кореляцію між затримкою і коефіцієнтом втрат,

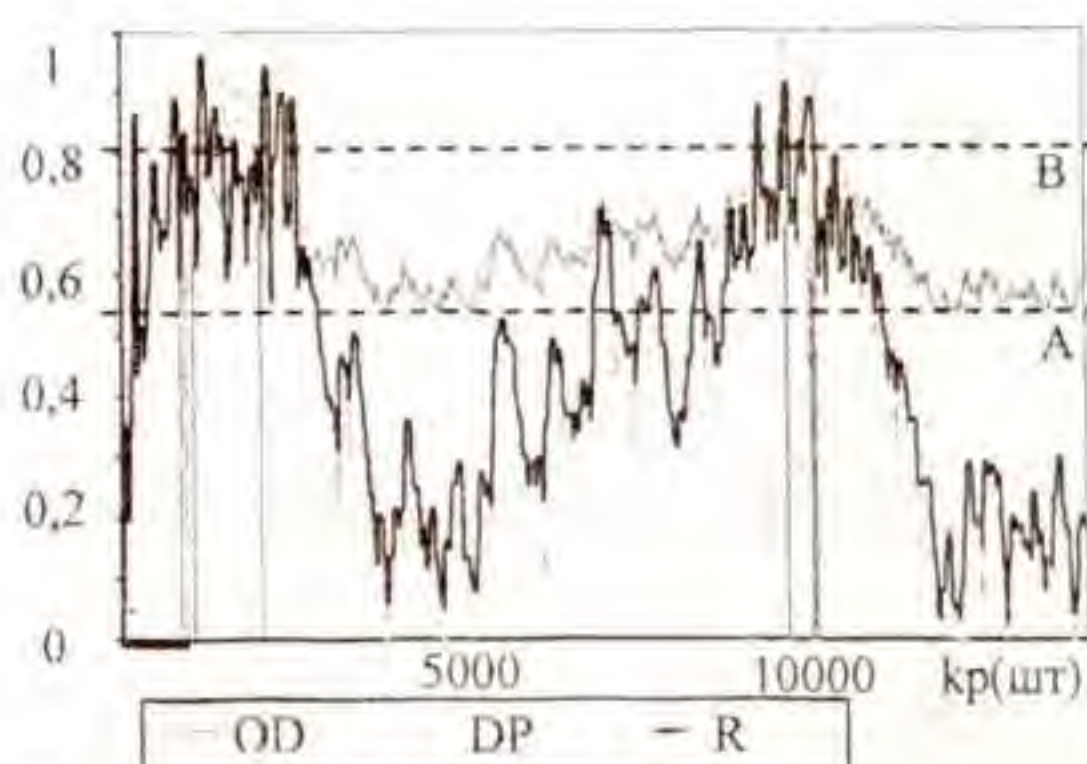


Рис. 3. Нормовані значення предіктору, затримки і втрат для каналу I_2 . R – предіктор, DP – коефіцієнт втрат, OD – затримка, A – базова затримка, B – поріг втрат, $кр$ – кількість пакетів

доводить існування кореляції між цими двома параметрами і може бути використана для прогнозування втрат під час передачі даних. Зокрема, з рис. 2 також видно, що функція R відображає пульсуючий характер трафіка в каналі I_1 .

Для каналів, які містять різноманітні потоки даних, є характерними більш гладкі профілі трафіку. Для каналу I_2 в тестовій мережі були проведені вимірювання затримки і коефіцієнту втрат, а також побудована функція-предіктор на основі вимірюної затримки. Функція предіктора, яку розраховано на основі вимірюної затримки, з точністю понад 0,95, апроксимує поведінку коефіцієнта втрат.

Висновки

На ґрунті проведеного аналітичного і експериментального дослідження запропонованої

моделі і кореляційної функції було показано, що такі характеристики телекомунікаційних каналів, як значення затримки і коефіцієнт втрат корелюють між собою. Запропонована функція предіктора дозволяє передбачити і відстежити моменти перевантаження з'єднання і може бути використана для механізмів контролю потоку і корекції помилок з метою забезпечення якості обслуговування в структурах передачі даних.

Список використаних джерел

1. *Вегашина III*. Качество обслуживания в сетях IP. – М.: Вильямс, 2003. – 368 с.
2. *Carter R., Crovella M.E.* Measuring Bottleneck Link Speed in Packet Switched Networks // *Performance Evaluation*. – 1996. – 27,28. – P. 297-318
3. *Jain R.* A delay-based Approach for Congestion Avoidance in Interconnected Heterogeneous Computer Networks // *ACM CCR*. – 1989. – 19. – P. 56-71
4. *Rizzo L.* Effective Erasure Codes for Reliable Computer Communication Protocols // *Computer Communications Review*. – 1997. – 27(2). – P. 24-36.
5. *Roychoudhuri L., Al-Shaer E., Hamed H., Brewster G.B.* Audio Transmission over the Internet: Experiments and Observations. // *IEEE International Conference on Communications (ICC)*, Anchorage, Sept. 2003. – P. 208-221.
6. *Roychoudhuri L., Al-Shaer E., Hame H., Brewster G.B.* On Studying the Impact of the Internet Delays on Audio Transmission // *IEEE IP Operations and Management (IPOM)*, Dallas, June 2002. – P. 129-136.
7. *Padhye C., Christensen K., Moreno W.* A New Adaptive FEC Loss Control Algorithm for Voice Over IP Applications // *Proceedings of the 19th IEEE International Performance, Computing, and Communication Conference*, Apr. 2000. – P. 307-313.
8. *Tobe Y., Tamura Y., Molano A., Ghosh S., Tokuda H.* Achieving Moderate Fairness for UDP flows by path-status Classification // *IEEE (LCN)*, Tampa, Nov. 2000. – P. 252-261.

Надійшла до редколегії 25.05.07

УДК 537.311.33, 621.315.592

Павлюк* С.П., к. ф.-м. н., Савицький С., асп.
Солтис Р., студ., Тіщенко І., студ.

Pavljuk*S.P., Ph.D., Savutskuy S., post-graduate,
Soltys R., student, Tishchenko I., student

Збільшення прямого опору кристала напівпровідникового діода при екстремально великих прямих ударних струмах

The resistance change of the power diodes under the influence of the surge current impulse

Досліджено суттєве збільшення прямого опору кристала напівпровідникового діода під впливом різної кількості поодиноких імпульсів ударного струму. Показано, що при струмах менше величини ударного струму ($I_{\text{спр. ул}}$) значення опору та надійність роботи такого діода не змінюється. При $I_{\text{спр. ул}}$ опір діода починає збільшуватися під час кожного повторного імпульсу, і після декількох імпульсів діод виходить з ладу. Ефекти, що спостерігаються, пояснені тим, що при такому різко неоднорідному розігріві за рахунок термічних механічних напруг виникають дефекти і мікротріщини в напівпровідниковому кристалі, що призводять до появи додаткових рівнів рекомбінації. При цьому час життя носіїв заряду зменшується, ефективний прямий опір діода збільшується, що призводить до збільшення виділеної на ньому потужності і виходу його з ладу.

Ключові слова: ударний струм, опір, розігрів, дефекти, центри рекомбінації, час життя.

It was made the research of the rectifier diode direct resistance increases under the influence of the different number surge current single pulses. It was shown, that currents lower than surge current didn't change the resistance value. The work reliability of such a diode doesn't change. When the current value is equal to surge current the diode resistance begins to increase after each repeated impulse and after few pulses the diode breaks. At the same time its direct resistance increases approximately twice and the temperature essentially exceeds the allowable value. The observable effects may be explained by the fact, that after such a heterogeneous heating the defects and microcracks appear in semiconductor crystal, what causes to the appearance of the extra recombination levels. With all this going on the lifetime of the carriers decreases, the effective direct resistance increases and this is a reason of the power increase and breaking the diode.

Key words: surge current, resistance, heating, defects, recombination level, lifetime.

*E-mail: pps@univ.kiev.ua

1. Вступ

Проходження екстремальних прямих струмів крізь напівпровідниковий кристал діода призводить до зміни його параметрів. Як було показано у роботі [3], імпульси прямого струму екстремальної величини призводили до контрольованої зміни часу життя неосновних носіїв заряду у базі діодного кристала. У роботі [4] показано, що такі зміни були пов'язані з виникненням у забороненій зоні напівпровідника додаткових рівнів рекомбінації, які зменшували час життя неосновних носіїв заряду більш ніж на

порядок. Методом термостимульованої провідності були визначені енергетичні параметри створених глибоких рівнів рекомбінації. Їх енергетичне положення визначено як 0.56 eV, а концентрація змінювалась у межах 10^{11} - 10^{14} см⁻³. Такі рівні виникають у результаті того, що при пропусканні через кристал імпульсу прямого струму великої амплітуди і малої тривалості, він сильно і неоднорідно розігрівається. У місці максимального градієнту температури у ньому виникають сильні механічні напруги, які створюють різні структурні дефекти.

Параметри діодів

Таблиця 1

№ п/п	Тип	$I_{пр,сер., max}$ А	$I_{пр,уд,max}$ А	$t_n(I_{пр})$, мс	$T_{з max}$, °С
1	КД105	0.3	15	20	125
2	КД208	1.5	30	20	85
3	КД209	0.5	15	20	85
4	КД212	1.0	50	10	125
5	КД220	3.0	60	10	155
6	КД202	5.0	30	1500	130
7	Д231	5.0	50	20	130
8	КД219	10.0	250	10	115

Після закінчення імпульсу струму, через швидке охолодження кристалу, ці дефекти залишаються в ньому і відіграють роль додаткових центрів рекомбінації, зменшуючи час життя. Вплив таких центрів на характеристики діодів був досліджений у роботах [5,6], де було показано, що ефективний час життя зменшується до 14 разів. Відповідно, гранична частота випрямлення збільшується теж до 14 разів. Час відновлення при перемиканні з прямого напрямку на зворотній зменшується у 3 разі. Зворотна напруга зменшується у 2 рази. Але дослідження змін прямої гілки ВАХ не були виконані, хоча такі дослідження є актуальними. Це пов'язано з тим, що при роботі потужних блоків живлення досить часто виникає ситуація, при якій блок працює на ємнісне навантаження або в режимі короткого замикання. У цьому випадку через випрямляючі діоди проходять потужні імпульси струму, які призводять до деградації параметрів діодів, погіршенню надійності їхньої роботи або до виходу їх з ладу. Тривалість таких імпульсів визначається швидкістю спрацювання системи захисту від перевантаження. За цей час струм не повинен перевищити значення струму перевантаження $I_{пр}$ – значення прямого струму діода, тривале протікання якого викликало би перевищення максимальної температури переходу, але який так обмежений у часі, що ця температура не перевищується. За час експлуатації діода число імпульсів струму перевантаження не обмежується.

Зовсім інша ситуація реалізується, якщо величина струму перевищує $I_{пр}$ і через діод проходить ударний струм $I_{пр,уд}$ – струм, при протіканні якого перевищується максимально допустима ефективна температура переходу, але який за час служби діода виникає рідко

з обмеженим числом повторень і викликається незвичайними умовами роботи пристрою. Цей струм може перевищувати діючий прямий струм діода $I_{пр,д}$ у десятки разів [1]. Така ситуація виникає і при збиранні діодів методом зварювання-паяння [8], коли до напівпровідникового кристала діода притискаються полуджені мідні виводи і у прямому напрямку пропускають струм, що розігріває кристал до температури, достатньої для плавлення припою на виводах. Для підвищення продуктивності циклу виготовлення діодів скорочують час і підвищують струм розігріву. При цьому відсоток виходу придатних приладів зменшується, і надійність їхньої роботи погіршується.

Задачею цієї роботи було дослідження прямої гілки ВАХ та причин виходу з ладу кристалів діодів після проходження різної кількості поодиноких імпульсів ударного струму.

2. Методика дослідження.

Під час проведення досліджень крізь кристал напівпровідникового діода пропускали поодинокі імпульси струму з регульованою амплітудою і тривалістю. Спостерігали осцилограми падіння напруги на кристалі. За цими осцилограмами для різних моментів часу будувалися вольт-амперні характеристики (ВАХ), а також розраховували залежності опору кристала діода R_d від тривалості і кількості імпульсів ударного струму. Під час проведення досліджень використовували режим постійного струму $I=const$, тому що цей режим дозволяє стабілізувати виділену в кристалі потужність і захищає кристал від виходу з ладу [7]. Це зв'язано з тим, що при розігріві напівпровідникового кристала діода при такому режимі опір джерела розігріву R_s багато

більше опору навантаження – опору напівпровідникового діодного кристала R_d , тобто $R_d \gg R_{\text{д}}$. При цьому режимі крізь кристал проходить імпульс струму I , амплітуда якого не змінюється під час імпульсу розігріву. Змінюється падіння напруги на кристалі U , що визначається опором напівпровідникового кристала R_d , який змінюється в процесі розігріву.

В цьому випадку зі збільшенням розігріву кристала його опір R_d падає, що призводить до зменшення падіння напруги U , середньої виділеної потужності $P_{\text{ср}} = I^2 R_d$ і до обмеження росту температури кристала. В такий спосіб у цьому випадку реалізується негативний зворотний зв'язок між температурою напівпровідникового нагрівача і приростом виділеної потужності. При використанні такого режиму нагрівання відбувається саморегуляція виділеної потужності, що дозволяє проводити багаторазові дослідження.

У режимі постійної напруги $U = \text{const}$ зі збільшенням температури кристала при нагріванні опір його падає, струм росте, збільшується виділена потужність $P_{\text{ср}} = U^2 / R_d$, що призводить до додаткового росту температури і т.д. Таким чином, при нагріванні напівпровідникового нагрівача в режимі постійної напруги, при постійній тривалості імпульсу розігріву реалізується позитивний зворотний зв'язок між збільшенням температури нагрівача і приростом виділеної від цього потужності.

Проводити виміри в такому режимі в наших дослідженнях не можна через вихід з ладу кристалів діодів. Оскільки під час досліджень використовувались багато кристалів діодів, на графіках наведені найбільш типові усереднені результати.

3. Експериментальні результати.

3.1. Зразки.

Дослідження проводились на кристалах випрямляючих діодів середньої потужності, параметри яких зазначені у таблиці.

Як бачимо з наведених даних [1], $I_{\text{прп}}$ і, тим більше, $I_{\text{пр, уа}}$ може перевищувати середній прямий струм діода в десятки разів.

Проведені дослідження показали, що характер зміни параметрів і характеристик кристалів різних типів діодів був однаковий. Тому далі наведені дані для кристалів діодів КД208.

3.2. Осцилограми падіння напруги.

На рис. 1 показані осцилограми прямого падіння напруги U на кристалі діода при різних амплітудах струмів і при різних кількостях імпульсів ударного струму для таких тривалостях імпульсів $t_{\text{имп}}$, мс: а – 1; б – 5; в – 10; г – 20.

Розглянемо осцилограми рис.1 в, оскільки вони є типовими. Як бачимо з рисунку, при струмах з амплітудою до 44А форма осцилограм U повторює прямокутну форму імпульсу струму, і значення падіння напруги не змінювалося як під час імпульсу, так і при його багаторазовому повторенні (рис.1 в, криві 1-3).

Інша картина спостерігалася при струмах ≥ 44 А. При проходженні такого імпульсу відбувався сильний розігрів кристала, про що свідчить первинне збільшення, а потім зменшення падіння прямої напруги на кристалі. Кожен наступний імпульс струму з такою однаковою амплітудою призводив до збільшення початкового прямого падіння (у момент $t=0$), більш швидкому розігріву і більшій зміні U .

На осцилограмі рис.1 а цифри відповідають струмам 1-30А, 2-50А, 3-80А, 4-100А, 5-120А, 6...9-144А. Цифра 6 відповідає першому імпульсу струму з амплітудою 144А, а цифра 9- відповідає 4 імпульсу струму з амплітудою 144А.

На осцилограмі рис.1 б цифри відповідають струмам 1-10А, 2-20А, 3-30А, 4-50А, 5-56А, 6...9-58А. Цифра 6 відповідає першому імпульсу струму з амплітудою 58А, а цифра 9- відповідає 4 імпульсу струму з амплітудою 58А.

На осцилограмі рис.1 в цифри відповідають струмам 1-10А, 2-30А, 3-40А, 4...9-44А. Цифра 4 відповідає першому імпульсу струму з амплітудою 44А, а цифра 9- відповідає 6 імпульсу струму з амплітудою 44А.

На осцилограмі рис.1 г цифри відповідають струмам 1-10А, 2-20А, 3-30А, 4-34А, 5...9-38А. Цифра 5 відповідає першому імпульсу струму з амплітудою 38А, а цифра 9 - відповідає 5 імпульсу струму з амплітудою 38А.

3.3. Вольт-амперні характеристики.

ВАХ кристала діода для різних моментів імпульсу показані на рис. 2. Криві $U_{\text{поч}}$ (рис 2 а) побудовані для початку імпульсу розігріву, а криві $U_{\text{кін}}$ (рис. 2 б) – для кінця. Як видно з графіків, при струмах менших, ніж $I_{\text{пр, уа}}$, ВАХ збільшується монотонно для початку і має S подібну ділянку для кінця імпульсу. Такий вид ВАХ характерний для перегрівних механізмів

виникнення від'ємного диференціального опору [8]. При досягненні величини $I_{\text{пр, уд}}$ починається

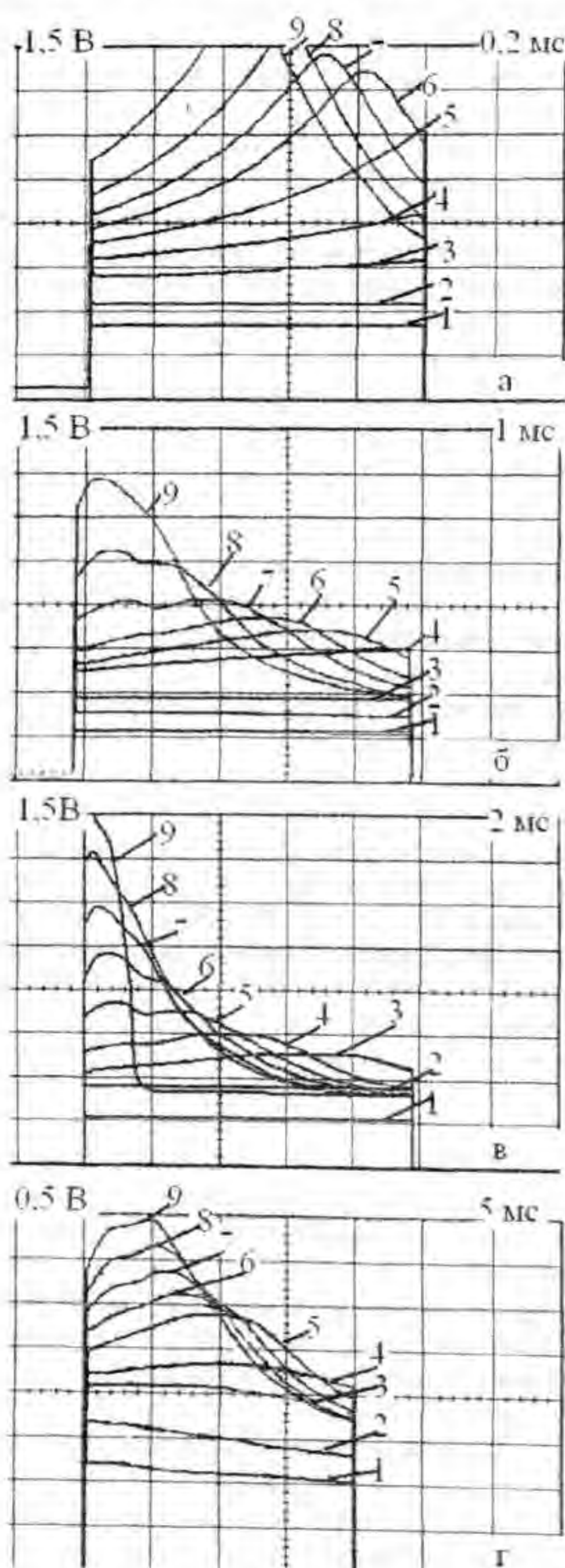


Рис. 1. Осцилограми падіння напруги для різних тривалостей імпульсу струму. $t_{\text{имп}}$: а–1; б–5; в–10; г–20.

зміна параметрів кристала при повторенні імпульсу струму. На ВАХ цифрами біля крапок

зазначений номер імпульсу струму з однаковою амплітудою. Після декількох імпульсів струму кристали виходили з ладу. Як видно з рис. 2, зі збільшенням амплітуди ударного імпульсу струму та зменшенням його тривалості кількість повторюваних імпульсів суттєво зменшується.

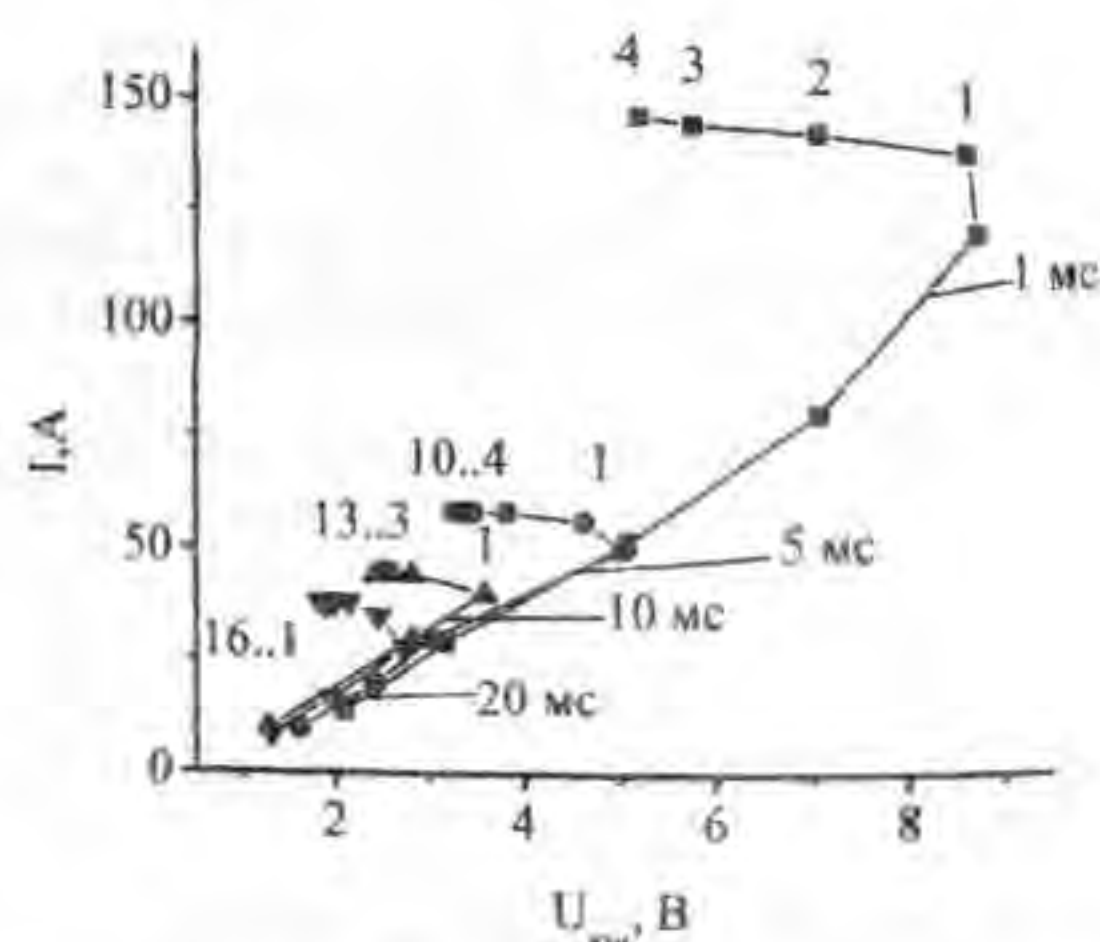
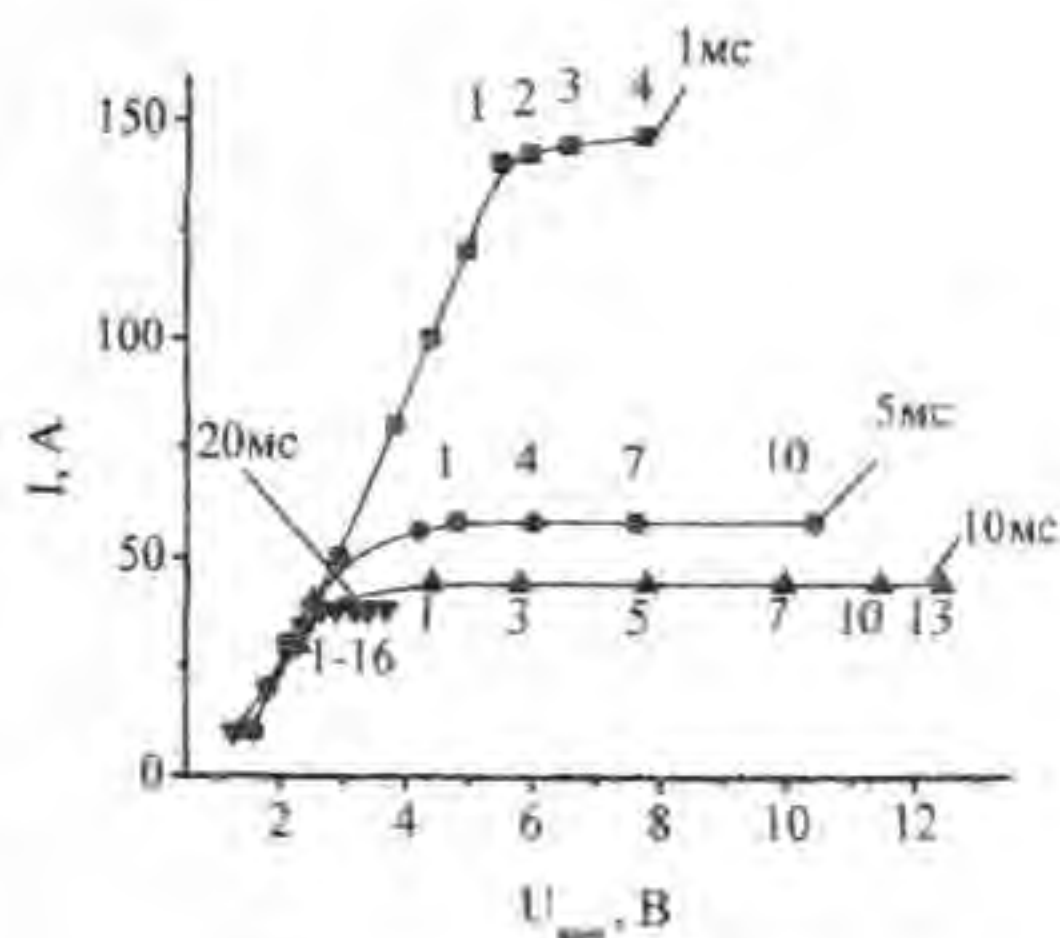


Рис. 2. ВАХ діодних кристалів для різних моментів імпульсу струму.

3.4. Залежність прямого опору кристала діода від кількості минулих імпульсів струму

Залежність прямого опору кристала діода R_d для початкового моменту часу імпульсу струму від величини і номера імпульсу N показана на рис. 3. Як видно з графіка, зі збільшенням амплітуди струму прямий опір кристала падає і не залежить від кількості імпульсів струму. При досягненні $I_{\text{пр, уд}}$ опір починає збільшуватися після проходження кожного імпульсу $I_{\text{пр, уд}}$. До

виходу кристала діода з ладу прямий опір кристала збільшився майже в 3 рази.

4. Обговорення отриманих результатів

Дослідження показали, що при проходженні ударного струму крізь напівпровідниковий кристал його температура істотно перевищує припустиму робочу температуру кристала діода. Різко неоднорідний градієнт температури призводить до виникнення сильних механічних напруг і, як наслідок, додаткових дефектів (рекомбінаційних рівнів), що призводять до зменшення ефективного часу життя носіїв заряду в напівпровіднику [6]. Зменшення часу життя носіїв заряду еквівалентно зменшенню довжини їхнього вільного пробігу, що призводить до збільшення ефективного прямого опору діода. Це, у свою чергу, збільшує виділену на діоді потужність, неоднорідно збільшується його температура, і кристал напівпровідникового діода руйнується.

При струмах 10 - 40 А и тривалості 10 мс значення опору як під час дії струму, так і при багаторазовому повторному впливі не змінюється. Температура переходу після проходження імпульсу досягає величини порядку 500°C. Надійність роботи такого

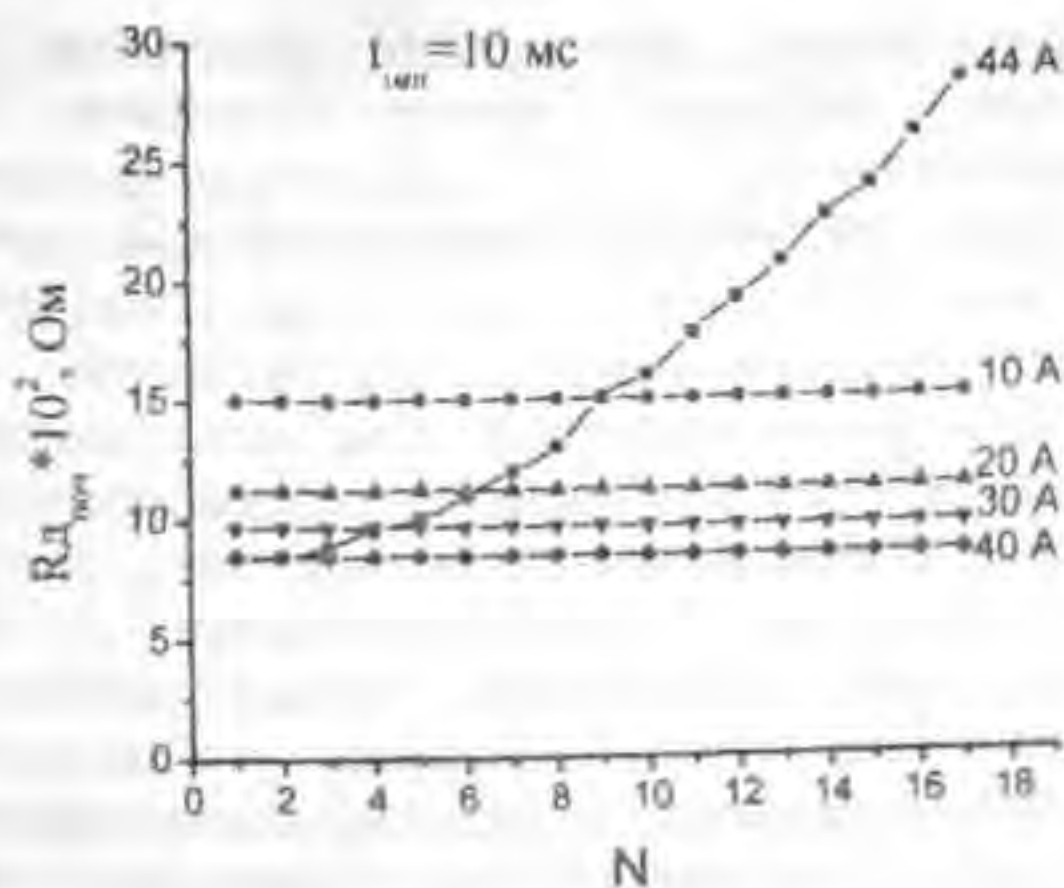


Рис. 3. Зміна прямого опору діодного кристала залежно від амплітуди імпульсу струму і кількості імпульсів з тривалістю 10 мс.

діода не змінюється.

При ударному струмі $I_{пр,дл} \approx 44$ А опір діода починає збільшуватися при кожному повторному імпульсі, і після 13 імпульсу він виходить з ладу. При цьому його прямий опір збільшується майже в 4 рази, а температура кристала досягає 1000 °C.

Висновки

1. Проведені дослідження показали, що під дією ударного імпульсу струму відбувається незворотне збільшення прямого опору кристала напівпровідникового діода.

2. Таке поведіння прямого опору кристала діода пояснено виникненням додаткових рівнів рекомбінації носіїв заряду, що призводять до зменшення часу життя носіїв заряду і, як наслідок, – до збільшення ефективного прямого опору кристала діода.

3. Показано, що збільшення прямого опору кристала діода відбувається при розігрівах до температур власної провідності.

Список використаних джерел

1. Григорьев О.П., Замятин В.Н., Кондратьев Б.В., Пожидаев С.Л. Диоды. Справочник. – М.: Радио и связь, 1990. – 336 с.
2. Викулин И.М., Стафеев В.И. Физика полупроводниковых приборов. – М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.
3. Нінідзе Г.К., Кушніренко В.В., Павлюк С.П. та інші. Спосіб контрольованої зміни часу життя неосновних носіїв заряду у Р'-N діоді модифікуючими імпульсами прямого струму великої амплітуди. // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2005. – № 3. – С. 435-439.
4. Нінідзе Г.К., Кушніренко В.В., Павлюк С.П. та інші. Дослідження параметрів модифікованих кремнієвих діодів. // Вісник Київського університету. Сер.: Радіофізика та електроніка. – 2006. – № 9. С. 13-15.
5. Г.К. Нінідзе Г.К., Кушніренко В.В., Павлюк С.П. та ін. Дослідження параметрів модифікованих кремнієвих діодів. // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2005. – № 3. – С. 435-439.
6. Кушніренко В.В., Павлюк С.П. и др. Воздействие импульсов прямого тока на время жизни неосновных носителей заряда в р+-п диоде. // ТКЭА. – 2007. – № 1 – С. 32-35.
7. Павлюк С.П., Іщук Л.В., Кислицын В.М. Саморегуляція виділеної потужності напівпровідникового діодного кристала // Вісник КНУ. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2002. – № 1. – С. 344-347.
8. А.С. № 355696 СССР. Способ сборки полупроводниковых приборов. // Росстшинский А.А., Лебига В.А., Кислицын В.М., Альперович Е.А. – 1972. – Бюл. № 31.

Надійшла до редколегії 17.06.07

УДК 621.37 : 535.241.13

Пархоменко Д. А., магістр, Усков С. А., магістр,
Смирнов* Є. М., кандидат фіз.-мат. наук,
доцент.

Акустооптичний 2 x 2 комутатор оптичних сигналів.

Розглянуто основні методи комутації оптичних каналів без проміжного їх перетворення на інші типи сигналів. Досліджено принципи акустооптичної комутації оптичних сигналів. Розраховано та побудовано експериментальний зразок акустооптичного комутатора конфігурації 2x2 з просторовим розділенням каналів. Дифракційна ефективність комутатора склала (80-90) % в смузі частот 30 МГц. Експериментально досліджено взаємний вплив каналів побудованого комутатора, який не перевищує -20 дБ. Досягнута швидкість перемикання каналів склала 1 мкс.

Ключові слова: акустооптика, волоконна оптика, комутатор.

*E-mail: esmirnov@univ.kiev.ua

Вступ

Оптичний комутатор – це пасивний оптичний пристрій з двома або більше портами, котрий вибірково передає, переадресовує або блокує оптичний сигнал при передаванні по оптичному волокну. Комутатори також застосовують (окрім їх прямої функції – оптичної комутації) для того, щоб за виникнення пошкоджень у мережі направити сигнал по іншому оптичному шляху або через іншу мережу.

На сьогодні існує два типи оптичних комутаторів: О/Е/О (оптика/електрика/оптика) та О/О/О (оптика/оптика/оптика - тобто повністю оптичні), кожний з яких має свою сферу застосування. Повністю оптичні комутатори О/О/О типу здійснюють комутацію без перетворення оптичного сигналу на електричний і дають змогу перейти до повністю оптичних телекомунікаційних мереж.

Існує багато різних підходів щодо реалізації повністю оптичних комутаторів: електро-механічні (поділяються на комутатори на просторових масках та MEMS комутатори),

D. A. Parhomenko, M.Sc., S. A. Uskov M.Sc.,
E. M. Smirnov*, Ph.D.

Acoustooptic multichannel 2x2 switch

Acoustooptical principles of optical channel switching were investigated. Experimental unit of a multicasting photonic 2x2 space switch, utilizing acousto-optic Bragg cells on TeO₂ crystal, was designed. Basic physical and constructive characteristics of the switch were investigated. Mutual cross-talk of the optical channels and switching speed were experimentally measured. Diffractional efficiency of the designed system was not less than 80% from in the bandwidth of 30 MHz. Measured value of channel's cross-talk was at most -20 dB, while, measured switching speed was about 1 μs.

Key Words: acoustooptics, fiberoptics, switch.

електрооптичні, термооптичні, комутатори на рідких кристалах, електроголографічні та акустооптичні [4-8, 10]. Кожен підхід має певні переваги та недоліки, тому єдиної домінуючої технології оптичної комутації немає. Більш того, більшість з існуючих методів знаходяться на етапі розвитку та вдосконалення, тому казати про чітке розмежування сфер застосування того чи іншого підходу не можна.

Головними характеристиками, що відрізняють різноманітні типи оптичних комутаторів є швидкодія (швидкість перемикання каналів); внесені втрати; перехресні завади; масштабованість (здатність до збільшення ємності комутаційної матриці); складність реалізації; надійність.

В даній роботі розглядається модельний варіант акустооптичного комутатора на багатоканальній акустооптичній комірі: по-перше, для моделювання використовуються лазери видимого діапазону, по-друге, джерелом випромінювання є не оптоволокну, а безпосередньо напівпровідниковий лазер. Таке спрощення є дуже зручним та інформативним на першому етапі розробки.

Схема експериментальної установки

Отже, розглянемо схему побудованого акустооптичного комутатора, яку зображено на рис. 1.

Вхідне оптичне випромінювання від напівпровідникових лазерних діодів 1 колімується короткофокусними лінзами 2 вздовж напрямку осі Z. Оскільки конструктивно промені від лазерних діодів знаходяться на відстані більшій за відстань рознесення каналів у акустооптичній комірці 7, телескоп, що складається з лінз 3 та 4, служить для узгодження

вхідного випромінювання із розмірами комірки. Акустичні хвилі в каналах комірки збуджуються сигналами від генератора 6. Для того, щоб звести випромінювання на виході акустооптичної комірки вздовж осі X, використовується збиральна циліндрична лінза 8. Для обмеження інтенсивності лазерного випромінювання та лінійного режиму роботи фотоприймачів використовувався блок світлофільтрів 9. Вихідні оптичні сигнали знімаються фотодіодами 10, після чого сигнали проходять через підсилювач фотодетектора 11 і потрапляють на осцилограф 12.

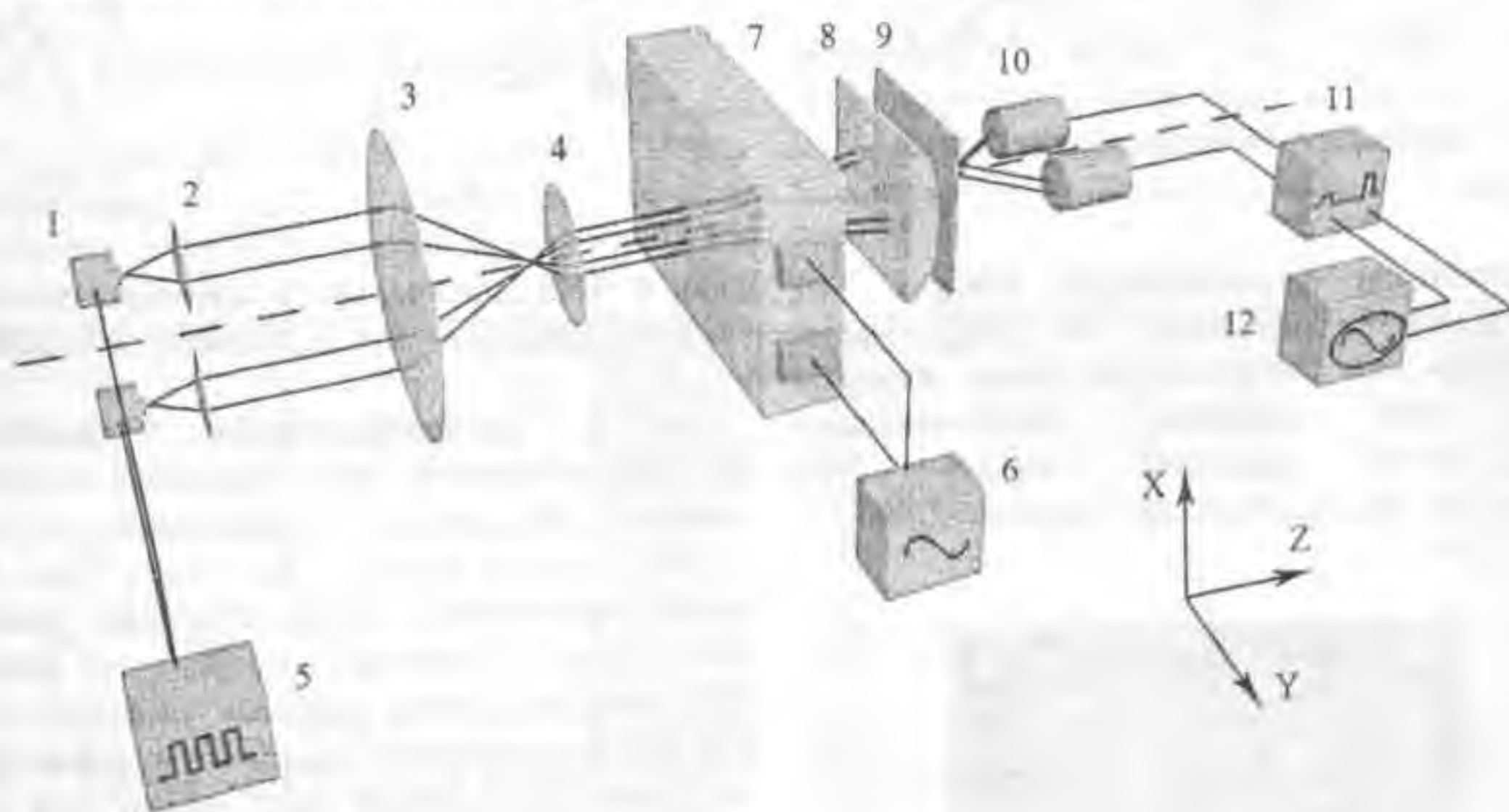


Рис. 1. Схема акустооптичного комутатора 2x2

Для проведення вимірювань випромінювання лазерів необхідно промодулювати за певним законом. Це забезпечується спеціально розробленим блоком стабілізації живлення та

модуляції 5. Суттєвою відмінністю такого підходу, порівняно з [10], є відсутність перехресних завад за рахунок перехідних процесів у акустооптичній комірці.

Багатоканальна акустооптична комірка

На рис. 2 зображено принципову схему багатоканальної акустооптичної комірки [5-6].

Акустичні пучки 7 збуджуються в кристалі п'єзоперетворювачем 3 під впливом керуючих сигналів 5. Контури 6 служать для узгодження п'єзоперетворювачів з електричним трактом у необхідному діапазоні акустичних частот. Підкладинка п'єзоелектричного перетворювача 4 являє собою тонкий шар металізації, нанесений на поверхню кристала 1, і виконує роль нижнього електрода п'єзоперетворювача. Верхній шар металізації 2 складається з декількох окремих електродів,

кожен з яких визначає окремий канал акустооптичної комірки. Під час розповсюдження в кристалі акустична хвиля створює періодичні механічні неоднорідності. Тому, внаслідок ефекту фото пружності, в кристалі виникають зміни діелектричної проникності і, відповідно, показника заломлення, що рухаються зі швидкістю розповсюдження звуку. Якщо забезпечити певні необхідні умови, то при проходженні світла через таку періодичну структуру виникає дифракція.

Для просторового керування оптичним випромінюванням, як відзначалося вище, зазвичай використовують режим брегівської дифракції, коли довжина взаємодії світла та

звуку є досить великою, а в дифракційному спектрі присутні лише дві складові: нульовий та перший порядки [1-3].

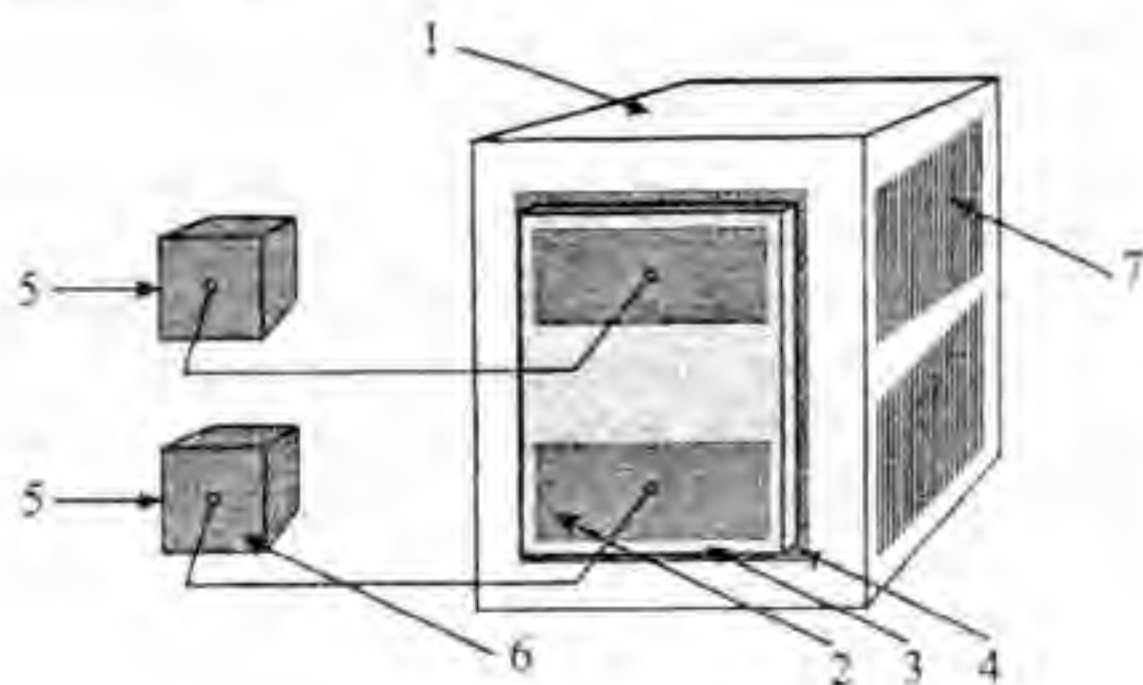


Рис. 2. Схема багатоканальної акустооптичної комірки

Розроблена акустооптична комірка має вдосконалену, порівняно з [10], схему узгодження, що повністю виключає взаємний вплив між каналами багатоканальної акустооптичної комірки. Комірку було побудовано на кристалі парателуриту TeO_2 зі зрізом $6^\circ 54'$.



Рис. 3. Акустичне поле в двоканальній АОК

Для попереднього аналізу якості побудованого АОК було досліджено структуру акустичного поля в його каналах. Знімок акустичного поля розробленої комірки представлений на рис 3. Дві горизонтальні смуги, що виділяються на фотографії, і є зображенням акустичного поля у відповідних каналах комірки. Як видно зі знімку, акустичні поля каналів не перекриваються, а їх структура є достатньо однорідною в центральній частині.

Методика вимірювання

Одним важливим показником роботи комутатора є виникнення перехресних завад між

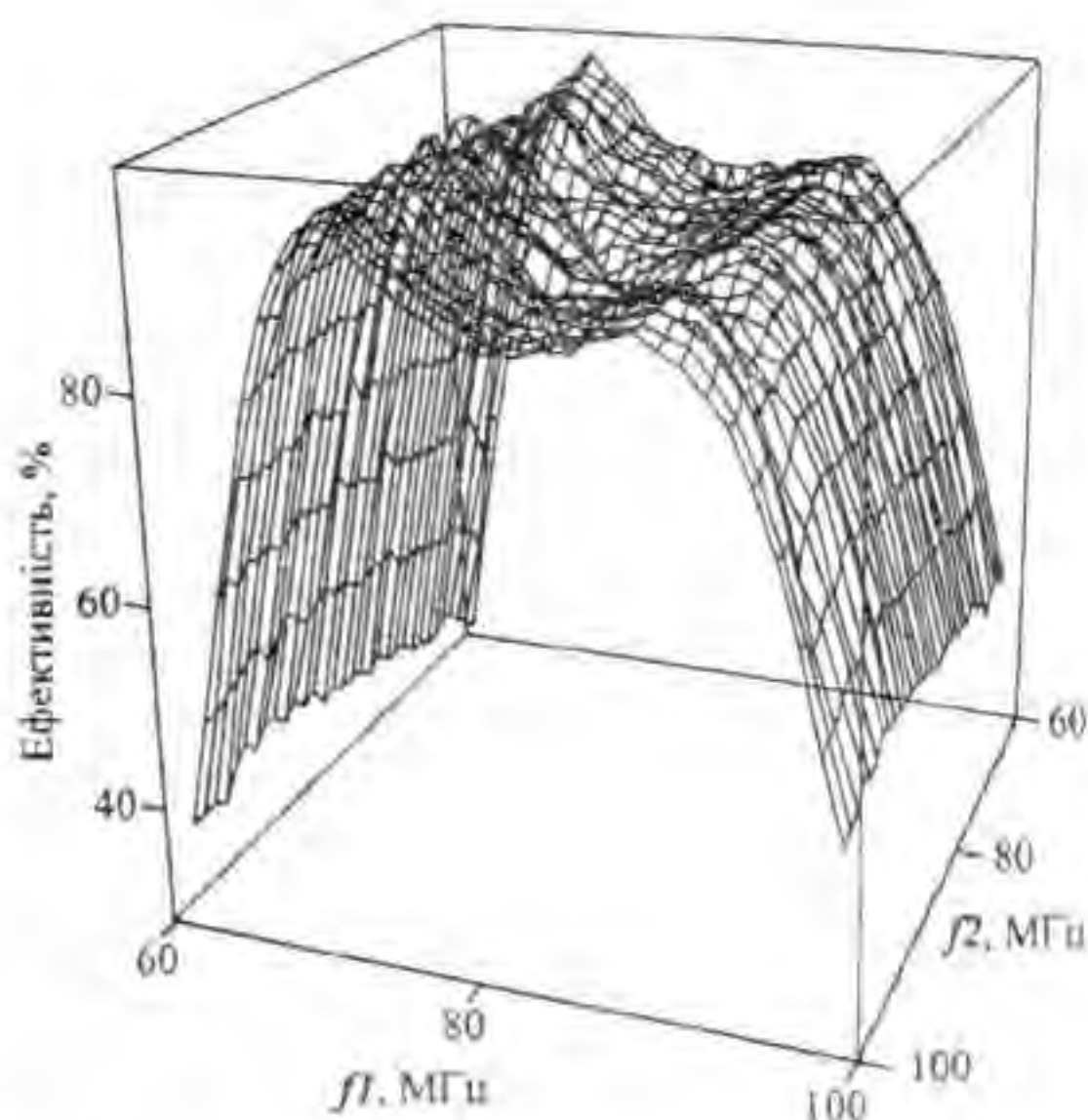


Рис. 4. АЧХ двоканального акустооптичного дефлектора

Було експериментально досліджено амплітудно-частотні характеристики кожного з каналів побудованого дефлектора, а також взаємний вплив каналів. Для цього було знято амплітудно-частотні характеристики каналу 1 при різних значеннях частоти у каналі 2. Отримані результати графічно представлені на рис. 4. Акустооптичну комірку було налаштовано на максимальну робочу смугу частот, при цьому оптимальна потужність акустичного сигналу складала 620мВт. Оскільки існує рівень акустичної потужності $P_a = P_{amax}$, вище якого ефективність АО взаємодії зменшується, вибір її оптимального значення є необхідною умовою успішного проведення подальших досліджень. Смуга частот побудованого АОК складає близько 30 МГц в діапазоні від 65 до 95 МГц з центральною частотою 80 МГц. Ефективність побудованого акустооптичного комутатора в зазначеному частотному діапазоні складає 80 ... 90 %. З розгляду частотних характеристик комутатора добре видно, що взаємний вплив між каналами, на відміну від [10], мінімальний завдяки вдосконаленню схеми узгодження.

каналами. В акустооптичних комутаторах перехресні завади можуть виникати, в першу чергу, за рахунок розсіювання на елементах оптичної схеми, часткового перекриття лазерних

променів внаслідок їх дифракційної розбіжності та через можливий взаємний вплив каналів акустооптичної комірки. Перекриття лазерних променів внаслідок їх дифракційної розбіжності в розробленій установці було виключено конструктивно, оскільки відстань між двома променями складала 4 мм. Взаємний вплив каналів акустооптичної комірки було досліджено і мінімізовано шляхом розробки більш досконалої схеми узгодження. Найбільш імовірним джерелом перехресних завад є розсіювання на елементах оптичної схеми, що й спостерігалось візуально. Точно визначити

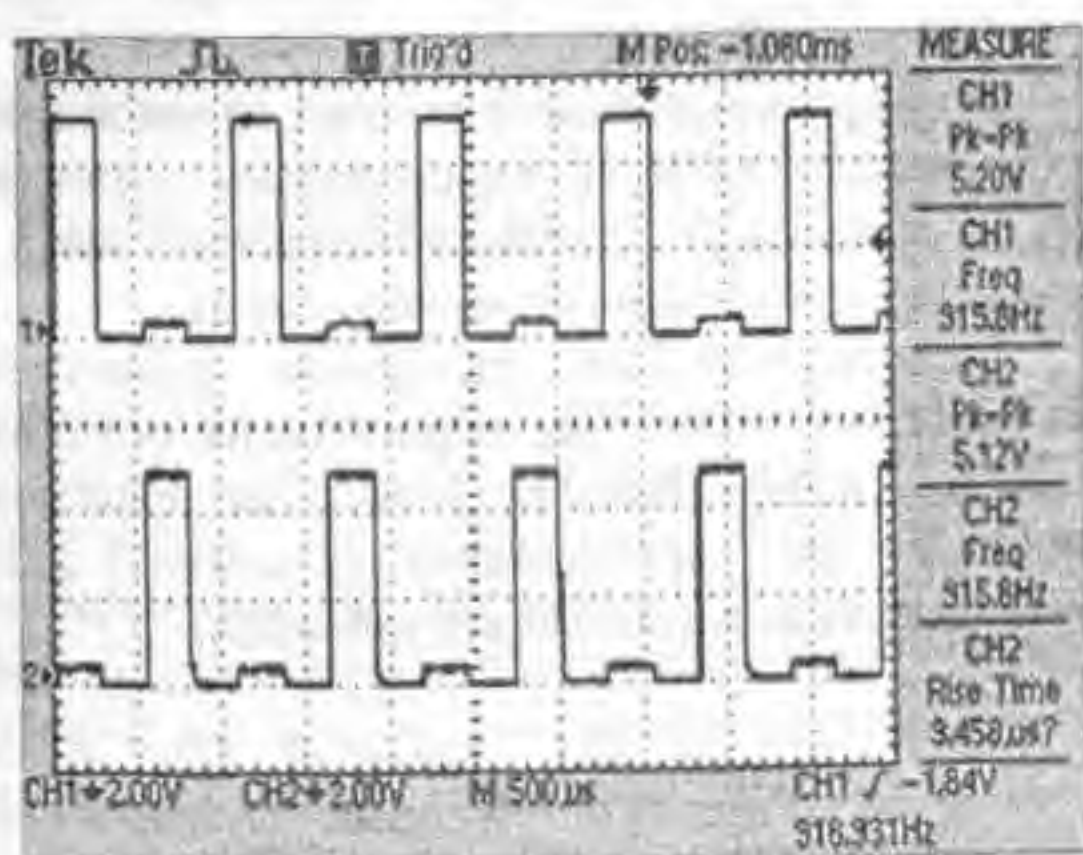
рівень перехресних завад можна за допомогою схеми синхронної модуляції лазерів за наперед визначеним законом.

Іншим важливим параметром розробленого комутатора є швидкість перемикавання каналів. Для її вимірювання було використано синтезатор частоти прямого синтезу AD9959, який дозволяє швидко перемикає частоту керуючого сигналу АОК у межах робочого діапазону без розриву фази. Роботою синтезатора керував ПК, а сигнал знімався з одного із вихідних каналів й аналізувався за допомогою цифрового осцилографа.

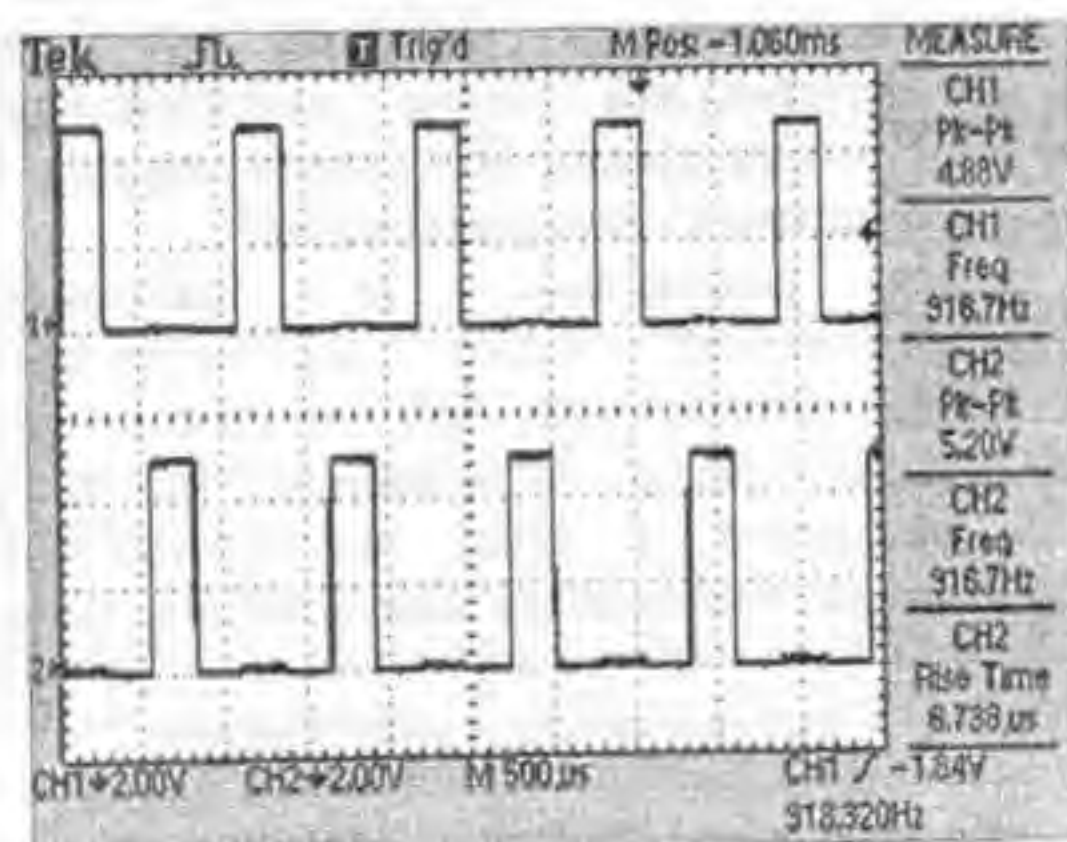
Результати експерименту

Результати вимірювання одночасно з двох фотоприймачів (двох вихідних каналів комутатора) наведено на рис.5. З отриманої

осцилограми видно, що робота двох інформаційних каналів чітко засинхронізована і за відношенням максимумів можна знайти значення відношення сигнал/шум.

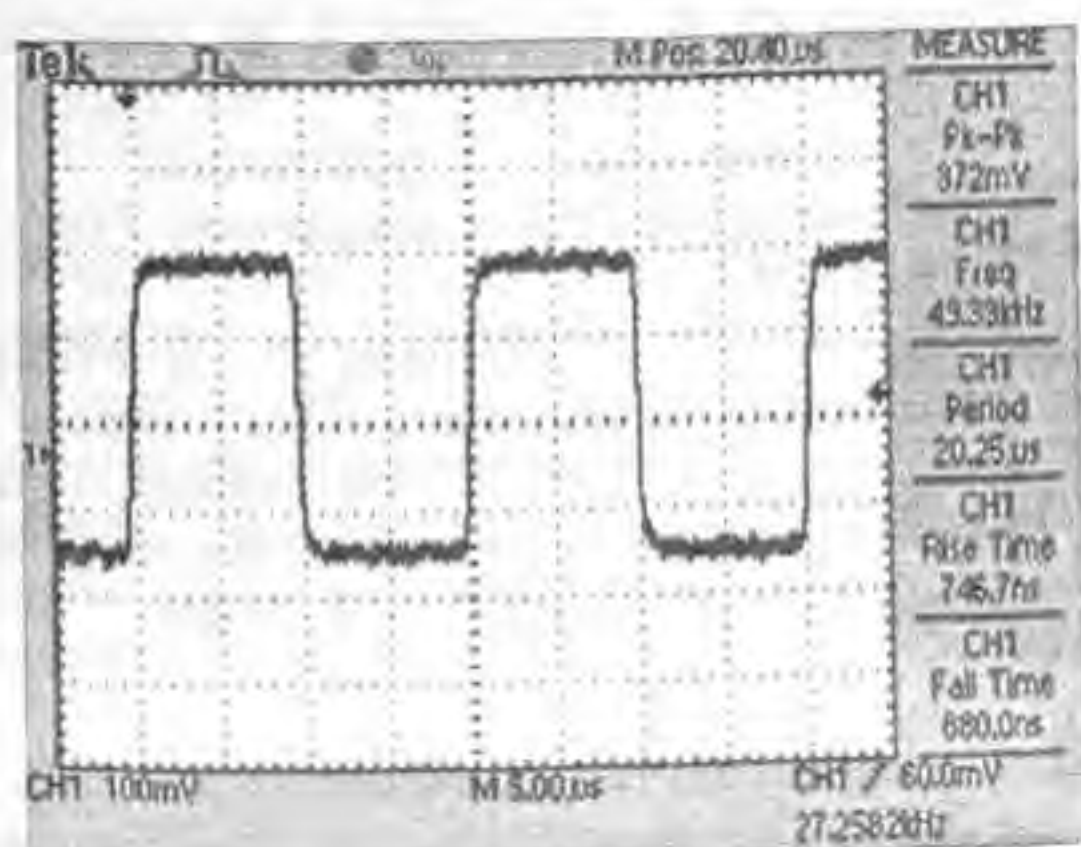


а

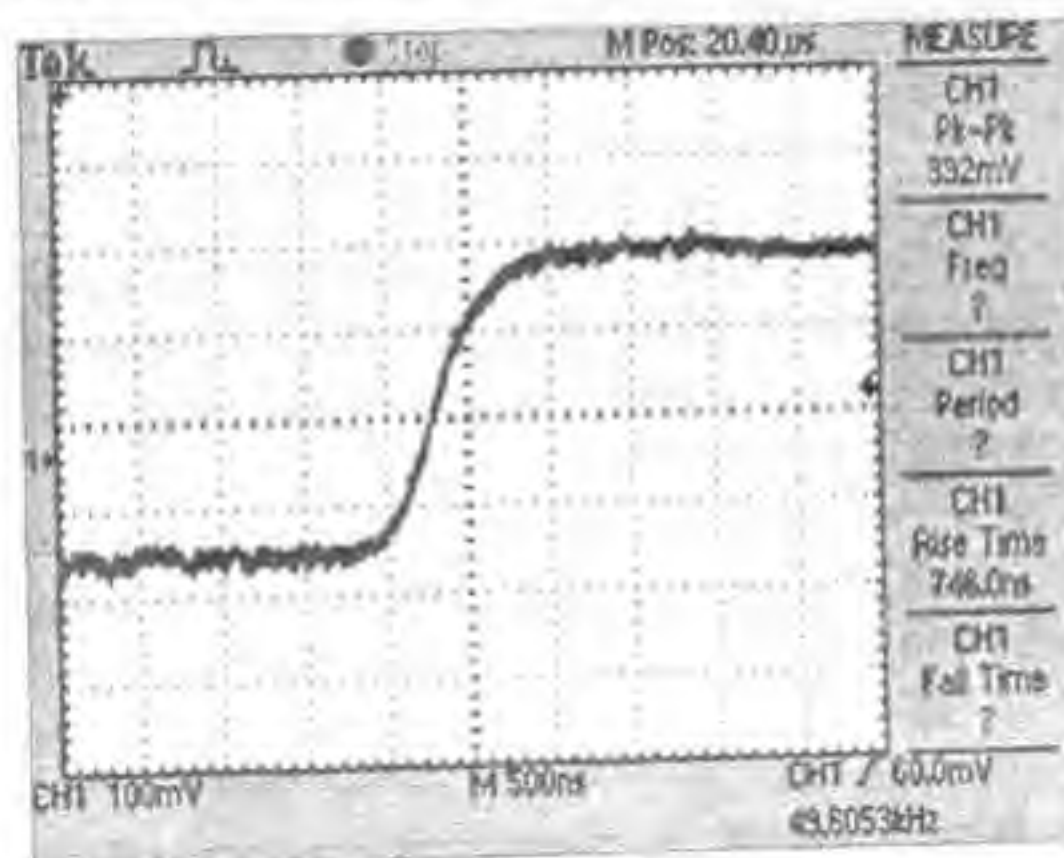


б

Рис. 5. Вимірювання перехресних завад: а – вимірювання паразитного сигналу (фотоприймачі без світлофільтра 9) ; б – вимірювання корисного сигналу (фотоприймачі зі світлофільтром 9)



а



б

Рис. 6. Швидкість перемикавання комірки: а – періодичне перемикавання каналів; б – перехідний процес

Для точного вимірювання відношення сигнал/шум й призначений світлофільтр 9 у схемі експериментальної установки. За його допомогою розширювався динамічний діапазон фотоприймача, що дозволило більш точно виміряти співвідношення сигнал/шум. Для цього використовувався нейтральний світлофільтр типу НС-9. В ході експериментальних досліджень визначена величина співвідношення сигнал/шум склала більше, ніж 20...22 дБ.

Результати вимірювання швидкодії розробленого комутатора наведено на рис.6.

З отриманої осцилограми видно, що

Висновки

В роботі було досліджено принципи акустооптичної комутації оптичного випромінювання шляхом акустооптичної взаємодії оптичного випромінювання вхідних каналів із відповідною кількістю акустичних хвиль. Розглядалась схема акустооптичної комутації з просторовим розділенням каналів, її основні властивості та характеристики.

Було розраховано та побудовано експериментальний зразок акустооптичного комутатора конфігурації 2x2 з просторовим розділенням каналів. Побудований комутатор було узгоджено в околі частоти 80 МГц. Дифракційна ефективність побудованого зразка

швидкодія комутатора складає 1 мкс (для наростання сигналу від 0,1 до 0,9). Для оцінки приблизний час перемикання комутатора визначається часом проходження акустичної хвилі в кристалі крізь область акустооптичної взаємодії. Швидкість звуку в парателуриті при даному куті зрізу приблизно складає 680 м/с, область акустооптичної взаємодії має розмір 0,5 мм. Виходячи з цього, швидкодія АОК складатиме 735 нс. Таким чином, як видно з наведеного розрахунку, експериментально отриманий результат цілком узгоджується з теоретичною оцінкою.

склала близько (80-90) % в смузі частот 30 МГц.

Було проведено випробовування побудованого АОК. Отримано картину акустичного поля в кристалі та оцінено частотний діапазон, в якому може працювати побудований комутатор. Отримані АЧХ приведено в роботі.

Було проаналізовано взаємний вплив каналів побудованого АОК та вдосконалено установку для їх мінімізації. Рівень перехресних завад у каналах комутатора не перевищує 20 дБ.

Експериментально досліджено швидкодію побудованого АОК. Час перемикання оптичних каналів складає близько 1 мкс, що практично відповідає часу проходження акустичної хвилі крізь область акустооптичної взаємодії.

Список використаних джерел

- 1 Балакиш В. И., Парыгин В. Н., Чирков Л. Е. Физические основы акустооптики - М.: Радио и связь, 1985. - 280 с.
- 2 Магдич Л. Н., Молчанов В. Я. Акустооптические устройства и их применение. - М.: Советское радио, 1978. - 112 с.
- 3 Яриш А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. - М.: Мир, 1987. - 616 с.
- 4 Roy Appelman, Zeev Zalevsky, All-Optical Switching Technologies For Protection Applications // IEEE Optical Communications. - 2004. - 42. - P.35-40.
- 5 D. O. Harris. Multichannel acousto-optic crossbar switch // Appl. Opt. - 1991. - 30. - P. 4245-4256.
- 6 D. O. Harris, A. Vanderlugt. Acousto-optic photonic switch // Opt. Lett. - 1989. - 14. - P. 1177-1179.

- 7 Robert R. McLeod, Kuang-yi Wu, Kelvin Wagner, Robert T. Weverka. Acousto-optic photonic crossbar switch. Part I: design // Appl. Opt. - 1996. - 35. - P. 6331-6353.
- 8 D. R. Pape. Multichannel Bragg cells: design, performance, and applications // Opt. Eng. - 1992. - 31. - P. 2148-2158.
- 9 Тищенко Ю. Н., Трубецкой А. В. Некоторые вопросы создания и исследования акустооптического дефлектора на монокристаллах TeO_2 // Автометрия - 1979. - 1. - С. 87-95.
- 10 D. Parhomenko, S. Uskov, E. Smirnov. Acoustooptic multichannel 2x2 switch // Proceedings of The VI International Young Scientists Conference on Applied Physics., Kyiv, Ukraine, 14 - 16 June 2006. - P. 28-29.

Надійшла до редколегії 25.05.2007

УДК 544.183.26: [546.11-123: 546.289]

Ткаченко А.В., ас, Ананьїна О.Ю., канд ф-м наук, доц.

Моделювання процесів взаємодії атомарного водню з дефектною поверхнею Ge(100)-(2×1)

В роботі представлені результати квантово-хімічного моделювання процесів взаємодії атомарного водню з поверхнею Ge(100), що містить вакансійний дефект. Досліджуються процеси, що можливі при взаємодії атомарного водню з дефектною поверхнею Ge(100) вакансійного типу. Розраховано енергетичні характеристики можливих фізичних і хімічних процесів у системі "кластер - водень".

Ключові слова: кластер, МЗДП, водень, моногідридна поверхня Ge(100).

*E-mail: avt@mail.zp.ua

Розвиток фізики поверхні та її технічне застосування висуває ряд нових наукових проблем. Необхідно досліджувати механізми поверхневих явищ, розкрити їх причини на атомному рівні та знайти взаємозв'язок між ними. Реальні поверхні напівпровідників містять дефекти, які можуть впливати як на енергетику, так і на кінетику гетерогенних хімічних реакцій, що сильно ускладнює існуючі моделі адсорбції та десорбції. Метою роботи є дослідження механізмів адсорбції атомарного водню на поверхні Ge(100) з вакансійним дефектом, оцінка значень енергій активації можливих реакцій і моделювання корозійної дії атомарного водню на моногідридній поверхні Ge(100)-(2×1) з вакансійним дефектом.

Відомо, що взаємодія поверхонь напівпровідників з атомарним воднем призводить до утворення на них моно- і дигідридних станів [1, 2]. У моногідридному стані водень насичує зв'язок димерного атома поверхні. При взаємодії германію з атомарним воднем однією з можливих реакцій є утворення летючих гідридів, про що свідчать дані робіт [4, 5].

Під час проведення досліджень був використаний напівемпіричний метод квантово-хімічного моделювання МЗДП (модифікована зневага диференційним перекриттям, MNDO). Цей метод орієнтований на коректне відтворення електронних, енергетичних характеристик і

Tkachenko A.V., post-grad. Ananyina O.Y., Ph.D. assistant prof.

Atomic hydrogen interaction with Ge(100)-(2×1) defect surface: computer simulation

The results of quantum-chemical simulation of hydrogen interaction with vacancy defect on Ge(100) surface are presented in this work.

The possible processes of atomic hydrogen interaction with vacancy defect on Ge(100) surface are study.

Energy characteristics for possible physical and chemical processes in the system "cluster - hydrogen" are calculated.

Key Words: cluster, dihydride surface, monodihydride surface.

геометричних параметрів молекул (кластерів). Для деяких класів сполук, завдяки параметризації, цей метод дає більш точні результати.

Поверхня Ge(100)-2×1 моделювалася за допомогою кластера Ge₆₃. Розрахунки оптимізованої геометрії поверхні проводилися шляхом пошуку мінімуму повної енергії кластера. Значення енергії активації адсорбції E_a знаходилися з розрахунків залежності повної енергії системи „кластер-водень” від відстані між атомом водню та атомом поверхні (координати реакції).

При взаємодії моногідридної поверхні Ge(100)-2×1 з атомарним воднем можлива десорбція молекулярного водню з поверхні, розрив димерних зв'язків поверхневих атомів, що може призводити до утворення дигідриду, дифузія атомів водню в приповерхні шари і утворення летючих гідридів германію. Розрахунки взаємодії з атомарним воднем кластера германію з моногідридним станом (рис.1) показали, що водень насичує обірваний зв'язок атома Ge1, утворюючи на ньому дигідридний стан (електронні та геометричні характеристики див. таб.1).

При зв'язуванні одного з адсорбованих на поверхні атомів Н з атомом Н газової фази можлива десорбція молекулярного водню. Значення енергії активації десорбції (E_d – 0,4 еВ)

молекули водню з моногідридного і дигідридного станів значно менше значення енергії активації,

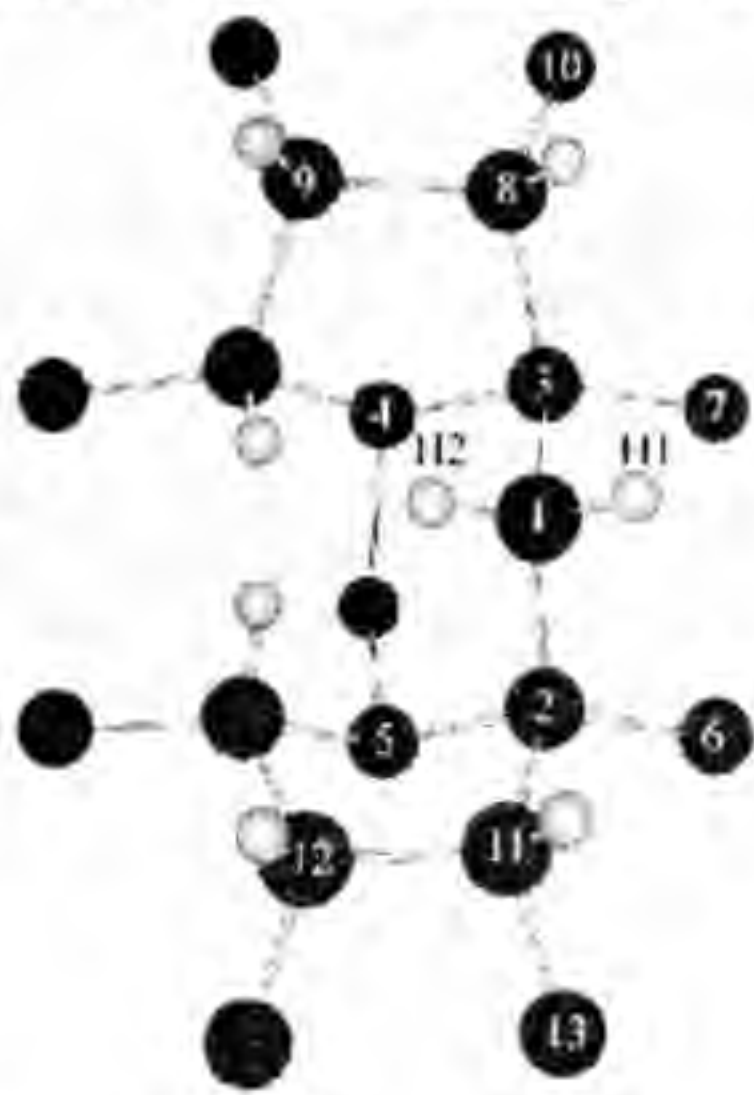


Рис.1. Фрагмент кластера Ge_{63} , що моделює поверхню $Ge(100)-2\times1$ з вакансійним дефектом

Геометричні й електронні характеристики поверхні $Ge(100)-2\times1$ у стані, показаному на рис.1,

P_{MM} - валентність; R_{NM} - міжатомна відстань;

необхідної для утворення молекули водню з моногідридного і дигідридного станів значно менше значення енергії активації, необхідної для утворення дигідриду ($E_a=1,8$ eV). Результати розрахунків узгоджуються з даними робіт [3, 6]. Згідно експериментальним даним дигідридний стан на чистій упорядкованій поверхні $Ge(100)$ (на відміну від $Si(100)$) не утворюється). Стани GeH_2 виникають тільки після попереднього дефектоутворення, наприклад, за допомогою іонного опромінення.

На відміну від поверхонь $Si(100)$, на поверхнях $Ge(100)$ реакція утворення летючих гідридів у результаті взаємодії з атомарним воднем є більш ймовірною. Руйнування зв'язків поверхневих атомів Ge з атомами другого шару кластера атомарним воднем вимагає енергії активації $E_a=0,8$ eV, що значно менше за значення енергії активації утворення дигідриду (розрив димерного зв'язку в моногідридному стані) на впорядкованій поверхні.

Таблиця 1

N	Q_N, e	P_{NN}	M	P_{MM}	Q_M, e	P_{NM}	$R_{NM}, \text{\AA}$	ЕЛО, eV	s-складов. ЛО _N , %	s-складов. ЛО _M , %
2	+0.01	3.91	1	3.63	+1.02	0.94	2.48	-11.48	0.26	0.37
			11	3.87	+0.35	0.98	2.47	-11.13	0.24	0.28
			5	3.24	-1.53	0.89	2.40	-11.54	0.23	0.24
			6	3.90	-0.18	0.99	2.46	-11.28	0.27	0.27
3	-0.002	3.91	1	3.63	+1.02	0.94	2.48	-11.50	0.26	0.40
			8	3.87	+0.36	0.98	2.48	-11.10	0.24	0.28
			4	3.24	-1.52	0.89	2.40	-11.50	0.23	0.24
			7	3.90	-0.17	0.99	2.46	-11.26	0.27	0.27
1	+1.01	3.63	2	3.91	+0.01	0.94	2.48	-11.48	0.37	0.26
			3	3.91	-0.002	0.94	2.48	-11.50	0.40	0.26
			H1	0.87	-0.36	0.85	1.48	-13.57	0.27	1
			H2	0.88	-0.34	0.87	1.48	-13.49	0.28	1
8	+0.36	3.87	3	3.91	-0.002	0.98	2.48	-11.10	0.28	0.24
			10	3.52	+1.17	0.94	2.52	-11.55	0.32	0.41
			9	3.85	-0.39	0.98	2.51	-10.84	0.28	0.24
			H6	0.93	-0.27	0.92	1.49	-13.24	0.25	1
11	+0.35	3.87	2	3.91	+0.01	0.98	2.47	-11.13	0.28	0.24
			13	3.85	-0.39	0.98	2.51	-10.86	0.28	0.24
			12	3.52	+1.18	0.94	2.51	-11.58	0.31	0.40
			H7	0.93	-0.27	0.92	1.49	-13.25	0.25	1

Позначення в таблиці 1: N, M – номер атома в кластері; Q_N, Q_M – заряд на атомі; P_{NN} , P_{MM} – порядок зв'язку, $E_{ЛО}$ – енергія локалізованої орбіталі.

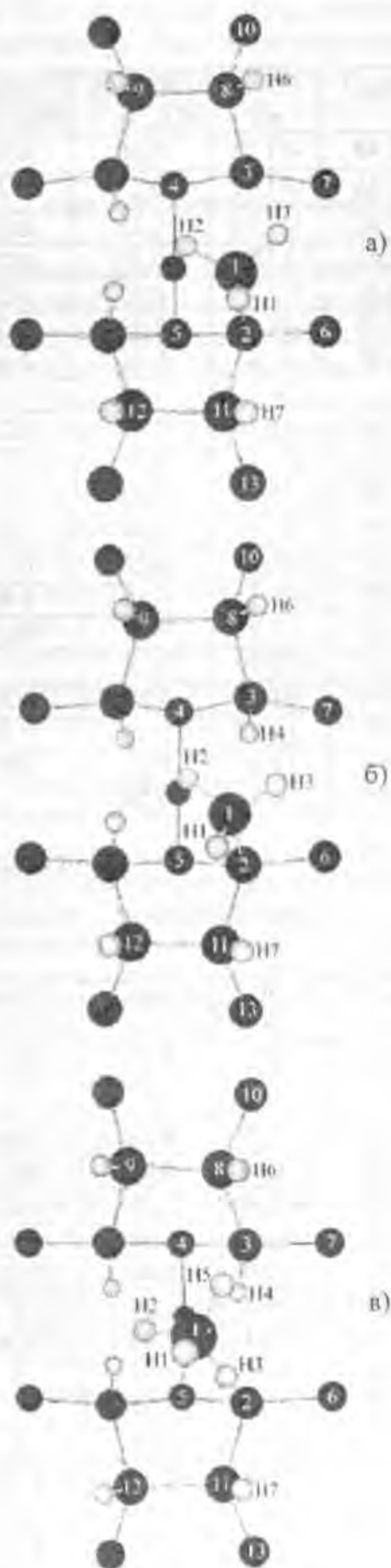


Рис.2. Утворення молекули германа GeH_4 в результаті адсорбції водню на моногідридній поверхні $\text{Ge}(100)$ з вакансійним дефектом

Взаємодія атомарного водню з дигідридним станом на дефектній поверхні германія може привести до руйнування зв'язку Ge1-Ge3 і утворенню тригідриду германія Ge1H_3 (рис. 2а).

Енергія активації реакції адсорбції водню з утворенням тригідриду германія складає 0,6 еВ. Атом Ge1 піднімається над сусідніми атомами поверхні, його зв'язок з атомом Ge2 слабшає (таб. 2).

При цьому довжина зв'язків між атомами Ge1-Ge2 , складає 2,49Å. Спостерігається перерозподіл заряду між даними атомами, що пов'язано з переносом від'ємного заряду (-0,37e) з атома Ge1 на сусідні атоми.

Потім атомарний водень насичує обірваний зв'язок атома другого шару Ge3 (рис.2.б). Ця реакція не вимагає подолання активаційного бар'єру. В результаті атом Ge3 має насичені зв'язки і гібридизацію орбіталей близьку до sp^3 . Довжина зв'язків між атомами Ge1-Ge2 збільшується і складає 2,53Å. Також спостерігається перерозподіл заряду між даними атомами, що зв'язано з переносом від'ємного заряду (-0,1e) з атома Ge1 на сусідні атоми. Порядок зв'язку між атомами Ge1-Ge2 у порівнянні з попереднім станом зменшився і склав 0,88 (таб.3).

Взаємодія атомарного водню з тригідридом германію Ge1H_3 може призводити до десорбції молекули германа GeH_4 , значення енергії активації для цієї реакції складає 0,8 еВ (рис. 2в).

Таким чином, у результаті квантово-хімічного моделювання показано, що взаємодія атомарного водню з дефектною поверхнею $\text{Ge}(100)$ вакансійного типу, що моделювалася кластером Ge_{63} , може призводити до утворення летючих германів. Значення енергій активації взаємодій, що призводять до корозійної дії атомарного водню на поверхні $\text{Ge}(100)$ склали близько 0,6-0,8 еВ. На дефектній поверхні $\text{Ge}(100)$ корозійна дія атомарного водню є більш ймовірною у порівнянні з впорядкованою поверхнею $\text{Ge}(100)$, для якої активаційні бар'єри складають близько 0,8-1,1 еВ [5].

За оцінками енергій активації процесів, корозійна дія водню може конкурувати з реакціями десорбції молекулярного водню з поверхні германію. По оцінкам активаційних бар'єрів утворення германа на поверхнях $\text{Ge}(100)$ ймовірніше буде відбуватися в області вакансійного дефекту в порівнянні з впорядкованою поверхнею.

Геометричні та електронні характеристики
поверхні Ge(100)-2×1 у стані, показаному на рис.
2а.

Таблиця 2

N	Q _N , e	P _{NN}	M	P _{MM}	Q _M , e	P _{NM}	R _{NM} , Å	Е ЛО, eV	s-складов. ЛО _N , %	s-складов. ЛО _M , %
2	-0.15	3.90	1	3.40	+1.38	0.92	2.49	-11.76	0.26	0.43
			11	3.87	+0.34	0.97	2.46	-11.12	0.21	0.27
			5	3.29	-1.46	0.91	2.41	-11.52	0.23	0.25
			6	3.90	-0.11	0.99	2.47	-11.27	0.27	0.28
3	+0.46	3.84	8	3.91	+0.14	0.98	2.45	-11.23	0.37	0.27
			4	3.15	-0.64	0.83	2.38	-11.47	0.33	0.22
			7	3.87	-0.37	0.97	2.43	-11.51	0.41	0.46
1	+1.38	3.40	2	3.90	-0.15	0.92	2.48	-11.76	0.43	0.26
			H3	0.85	-0.39	0.73	1.50	-14.38	0.30	1
			H1	0.85	-0.38	0.83	1.48	-13.73	0.33	1
			H2	0.86	-0.37	0.86	1.48	-13.73	0.34	1
8	+0.14	3.90	3	3.84	+0.46	0.98	2.45	-11.23	0.27	0.37
			10	3.50	+1.21	0.93	2.49	-11.31	0.28	0.40
			9	3.87	-0.29	0.99	2.49	-10.72	0.27	0.24
			H6	0.94	-0.24	0.93	1.49	-12.99	0.24	1
11	+0.34	3.87	2	3.91	-0.15	0.97	2.46	-11.12	0.27	0.21
			13	3.86	-0.37	0.98	2.50	-10.98	0.28	0.24
			12	3.51	+1.20	0.94	2.49	-11.64	0.31	0.39
			H7	0.93	-0.27	0.92	1.49	-13.36	0.25	1

Геометричні та електронні характеристики
поверхні Ge(100)-2×1 у стані, показаному на рис.
2б.

Таблиця 3

N	Q _N , e	P _{NN}	M	P _{MM}	Q _M , e	P _{NM}	R _{NM} , Å	Е ЛО, eV	s-складов. ЛО _N , %	s-складов. ЛО _M , %
2	-1.54	3,87	1	3,33	+1,48	0,88	2,53	-11,21	0,26	0,43
			11	3,88	+0,29	0,98	2,46	-11,01	0,21	0,27
			5	3,33	-1,43	0,91	2,44	-11,19	0,24	0,24
			6	3,91	-0,10	0,99	2,48	-11,10	0,27	0,28
3	+1,27	3,44	8	3,89	-0,17	0,94	2,46	-11,58	0,39	0,26
			4	2,92	-1,87	0,72	2,36	-11,64	0,32	0,20
			7	3,75	-1,68	0,90	2,45	-11,66	0,40	0,25
			H4	0,82	-0,42	0,79	1,47	-14,05	0,24	1
1	+1,48	3,33	2	3,87	-0,15	0,88	2,53	-11,21	0,43	0,26
			H3	0,82	-0,42	0,78	1,48	-13,49	0,33	1
			H1	0,84	-0,40	0,81	1,49	-13,36	0,33	1
			H2	0,84	-0,39	0,82	1,48	-13,42	0,34	1
8	-0,17	3,89	3	3,44	+1,27	0,94	2,46	-11,58	0,26	0,39
			10	3,46	+1,30	0,91	2,48	-11,41	0,26	0,40
			9	3,89	-0,17	0,99	2,50	-10,80	0,25	0,25
			H6	0,96	-0,20	0,95	1,49	-13,01	0,24	1
11	+0,29	3,88	2	3,87	-0,15	0,98	2,46	-11,01	0,27	0,21
			13	3,86	-0,37	0,98	2,49	-10,90	0,28	0,24
			12	3,51	+0,21	0,94	2,47	-11,53	0,30	0,40
			H7	0,93	-0,26	0,92	1,49	-13,17	0,25	1

Позначення в таблицях 2, 3: N , M – номер атома в кластері; Q_N , Q_M – заряд на атомі; P_{NN} , P_{MM} – валентність; R_{NM} – міжатомна відстань; P_{NM} – порядок зв'язку, E_{lo} – енергія локалізованої орбіталі.

Список використаних джерел

1. *Аппельбаум Дж., Хамман Д., Хемосорбция на поверхности полупроводников // Теория хемосорбции / Под ред. Дж. Смита. – М.: Мир, 1983. – С. 60-101.*
2. *Ананьина О.Ю., Котляров А.П., Яновский А.С. Моделирование взаимодействия водорода с упорядоченными поверхностями Ge(100) // Труды Харьковской научной ассамблеи ICVTE-6.-Харьков, Украина. - 2003. - С. 8-10.*
3. *Ананьїна О.Ю., Яновський О.С., Котляров А.П. Моделювання взаємодії атомарного водню з вакансійним дефектом на поверхні Ge(100) // Фізика і хімія твердого тіла.- 2003.- 4, № 4 С. 638-642.*
4. *Ромашин С.Н., Седов А.В., Касаткин Э.В., Самоорганизация при осаждении пленок полупроводников в среде атомарного водорода // Журнал технической физики - 2004.- 74, вып. 8.*
5. *Ananyina O.Y., Yanovsky O.S., Tkachenko A.V. Modelling of hydrogen interaction with Ge(100)-(2×1) surfaces // Abstracts of II International conference "Electronics and applied physics". – Kyiv, Ukraine.- 2006.-P.47.*
6. *Яновский А.С., Герчиков М.Ю., Панеш А.М. Адсорбционные свойства кремния и германия после ионного облучения // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1989. - №8. - С. 5-16.*

Надійшла до редколегії 29.10.2007

Хоменко¹ А. Ю., аспірант, Кислюк² В. В.,
доц., канд. ф.-м. н., Говорун³ Д. М., проф.,
докт. біол. н., член - кор. НАН України

Вплив вологості на вольт – амперні характеристики пуринових основ ДНК у полікристалічному стані

Експериментально досліджено вольт –
амперні характеристики пресованого
полікристалічного гуаніну та аденіну,
канонічних основ ДНК, при різних значеннях
вологості. Встановлено, що при відносній
вологості повітря більше 75% форма ВАХ
змінюється від лінійної на нелінійну для
гуаніну, тоді як для аденіну характеристика
лишається лінійною. Провідність аденіну з
часом збільшується, що, ймовірно, пов'язано з
утворенням гідратів.

Ключові слова: гуанін, аденін, ВАХ,
вологість, кристалізація.

¹ E-mail: antonk@univ.kiev.ua

² E-mail: vkislyuk@univ.kiev.ua

³ E-mail: dhovorun@imbh.org.ua

1. Вступ

Перехід сучасної електроніки від мікро – до
нанорозмірів вимагає нових технологій і
матеріалів [1]. При цьому на перше місце
висувається можливість отримувати матеріали з
наперед заданими параметрами, зокрема,
електропровідністю.

У цьому сенсі особливу увагу дослідників
привертає одна з природних макромолекул, а
саме – ДНК, завдяки перевагам, пов'язаним як з
її біологічним походженням (самоорганізація,
компліментарність, відносна простота отримання
структури з наперед заданими параметрами,
тощо), так і з її здатністю проводити електричний
струм [3]. Залежно від зовнішніх умов, будови та
умов експерименту ця біомакромолекула
демонструє широкий діапазон значень
провідності – від діелектричної до металічної
[3,4].

Теоретичні підходи до пояснення
електричних властивостей ДНК вказують на
складність цієї проблеми [4,5]: більшість
дослідників – теоретиків сходяться на тому, що
базовим механізмом провідності є електричні

Khomenko A. Yu.¹, PhD student, Kislyuk V. V.²,
PhD, Hovorun D. M.³, Prof., doc. biol., Cor.
Mem. of National Academy

Influence of humidity on current-voltage characteristics of DNA purine bases in polycrystalline state

Current-voltage characteristics were
studied for pressed polycrystalline guanine and
adenine canonical DNA bases at room
temperature and various values of humidity. It
was established that I-V curve changed with
humidity higher than 75% from linear to non-
linear for guanine, while it kept linear for
adenine. Adenine conductivity increased with
time, which is, likely, associated with formation
of hydrates.

Key Words: guanine, adenine, I-V
characteristics, humidity, crystallization.

стрибки вздовж гуанінових основ (у
одноланцюговій спіралі) або між гуанін –
цитозиновими парами (у двохланцюжкової
спіралі), які мають найменший потенціал
іонізації [5]. У цьому сенсі привертають увагу
кристали нуклеотидних основ, які стабілізуються
такими ж типами міжмолекулярних взаємодій, як
і просторова будова ДНК, а саме – водневим
зв'язком та так званим стекінгом [2]. Тому
вивчення основ ДНК, особливо гуаніну та
цитозину, дасть змогу детальніше описати
механізм провідності в ДНК.

Ця робота присвячена порівняльному
експериментальному дослідженню електричних
властивостей полікристалічних пуринових основ
ДНК – гуаніну і аденіну.

2. Експеримент

Зразки для вимірювання – таблетки –
виготовляли пресуванням канонічних пуринових
основ ДНК, гуаніну та аденіну, застосовуючи
прес з надлишковим тиском 6000 кг/см². Процес
пресування тривав біля однієї хвилини. Отримані
таким чином таблетки мали діаметр 1,5 або 3 мм,
при цьому товщина зразків відрізнялася не
більше, ніж на 0,01 мм, змінюючись від 0,1 до

0,8 мм. Як електричні контакти використовували тонкі мідні пластинки із золотим покриттям, діаметр яких перевищував діаметр таблетки. Вольт – амперні характеристики (ВАХ) знімали двохоконтактним методом, використовуючи електроди однакових розмірів. Електричну напругу на зразках змінювали від -5,5 до +5,5 В, реєструючи електричний струм через зразок до 300 нА з точністю не менше за 1 пкА. Для контролю вологості середовища, у якому перебували зразки, використовували кліматичну камеру, змінюючи в ній відносну вологість від 30% до 110% та підтримуючи її з точністю $\pm 2\%$.

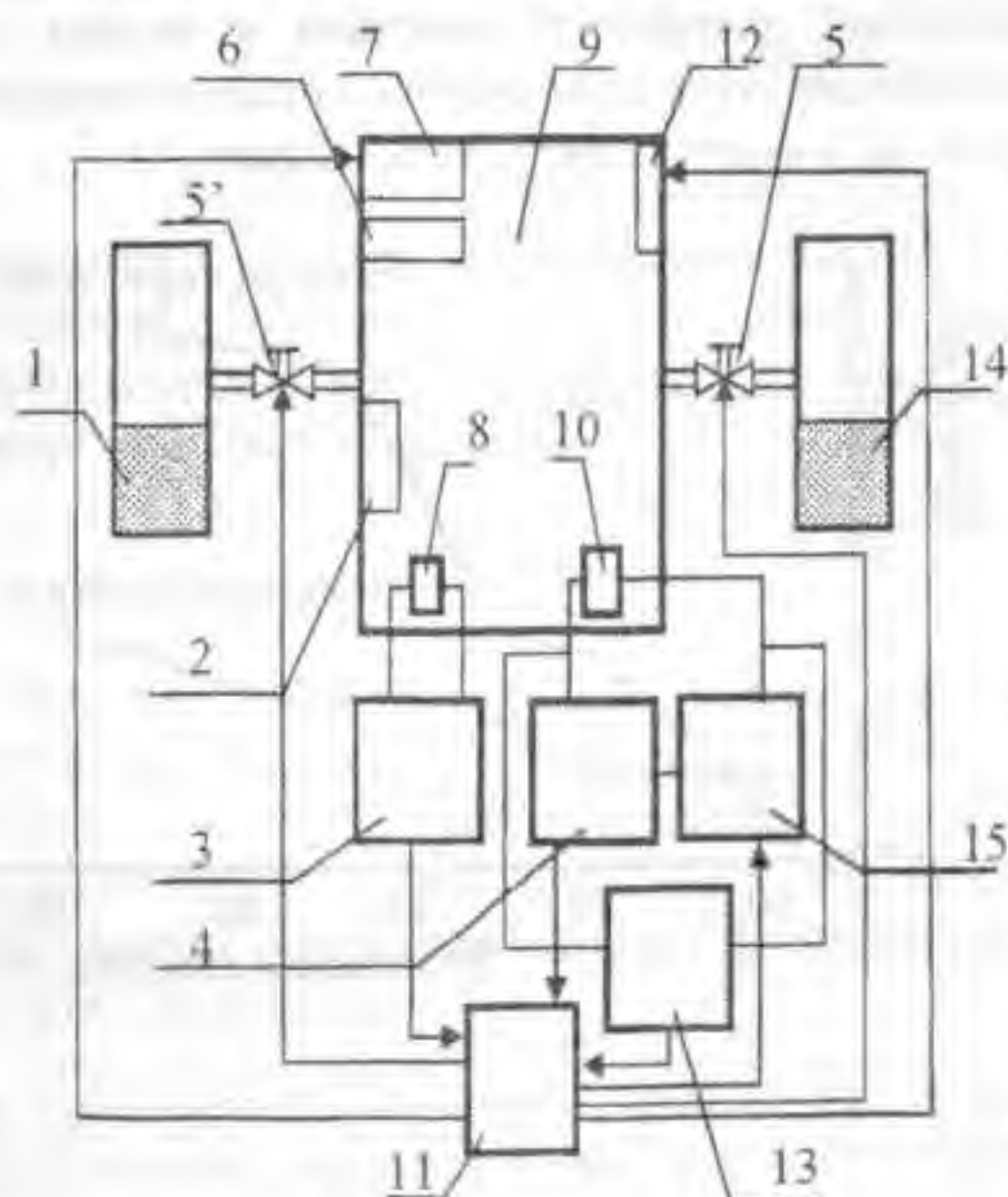


Рис. 1. Принципова схема експериментальної установки: камера з водою - 14, камера для вимірювання - 9, клапан - 5, блок датчиків - 8, зразок - 10, пічка - 12, елемент Пельтьє - 7, система збору конденсату з елемента Пельтьє - 6, вентилятор - 2, камера з силікагелем - 1, комп'ютер - 11, вимірювач вологості й температури - 3, вольтметр - 13, амперметр - 4, ЦАП - 15.

Принципову схему установки наведено на рис. 1, детальніше вона описана у попередній роботі [6]. Усі виміри проведено за кімнатної температури.

3. Результати та їх обговорення

Отримані результати наведено на рис 2 - 7.

У діапазоні відносної вологості 60% - 70% зразок полікристалічного гуаніну має лінійну ВАХ і характеризується електричним опором ~

30 ГОм (рис 2). При 100% вологості омичний опір зразка падає до ~136 МОм на прямій вігді і до 740 МОм на зворотній. Зазначимо, що при цьому початкова величина опору складала ~5,5 ГОм.

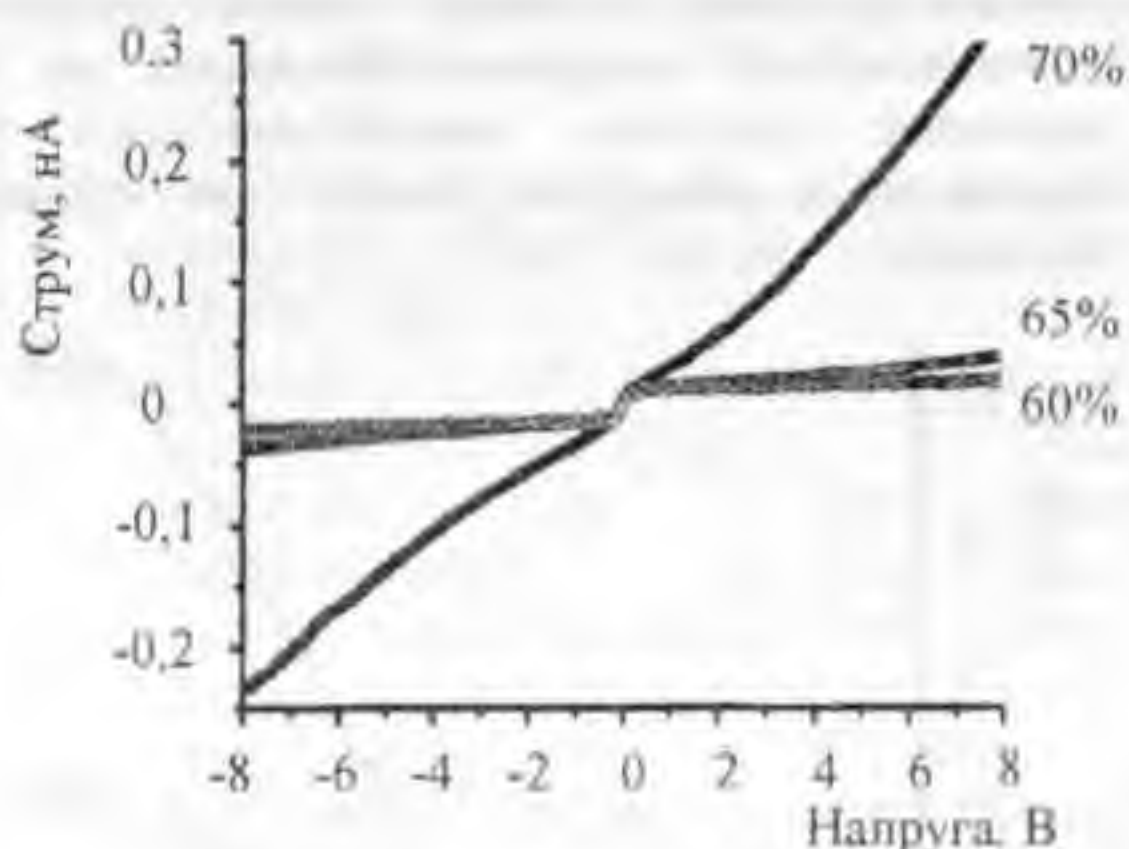


Рис 2. Типова залежність ВАХ полікристалічного пресованого гуаніну від вологості повітря у діапазоні відносних вологостей 60 - 70%.

Нелінійно - асиметричний характер ВАХ полікристалічного гуаніну не зумовлений контактними явищами [7,8], оскільки у діапазоні відносної вологості 60% - 70% його ВАХ лінійна і не залежить від матеріалу, з якого виготовлені контакти.

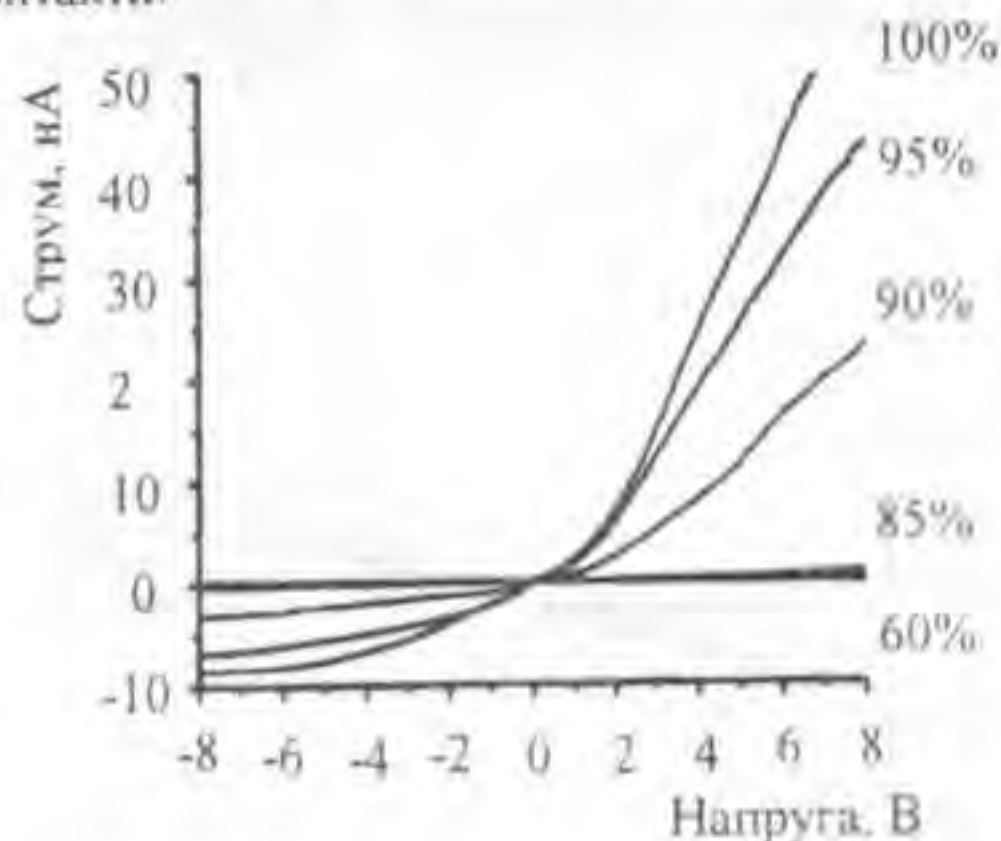


Рис 3. Типова залежність ВАХ полікристалічного пресованого гуаніну від вологості повітря у діапазоні відносних вологостей 40 - 100%.

Цей ефект не може бути також пояснений провідністю, пов'язаною з процесами кристалізації під дією води [6], бо у цьому випадку величина нелінійності мала би зменшуватися при підвищенні вологості, а це не відповідає експериментальним даним.

Раніше [6] ми якісно пояснили цей ефект переходом твердотілого гуаніну із метастабільної аморфної фази у кристалічну під впливом молекул води як «каталізатора» кристалізації [7,8]. Під час такого переходу суттєво зростають стекінгові взаємодії сусідніх молекул гуаніну у кристалічній ґратці, що й спричиняє зростання електропровідності у порівнянні з аморфним станом при низькій вологості.



Рис. 4. Залежність величини електричного струму через зразок пресованого полікристалічного гуаніну від відносної вологості при постійній напрузі на зразку +6 та -6 В.

Яка ж причина того, що ВАХ гуаніну є асиметричною?

На наш погляд, причина цього явища криється у дипольній нестійкості молекули гуаніну, яка зумовлена структурною нежорсткістю його амінного фрагмента $\geq \text{CNH}_2$ [9]. Як відомо, гуанін це єдина молекула з поміж канонічних нуклеотидних основ ДНК, яка має пірамідальну аміногрупу; в інших основах з аміногрупою – аденіні і цитозині – ця пірамідальність має динамічний характер і проявляється як виялове коливання амінного фрагмента великої амплітуди [10]. Таким чином, дипольна нестійкість молекули гуаніну цілком може бути причиною дипольної нестійкості кристала в цілому, яка супроводжується значною його поляризованістю, і може викликати асиметрію ВАХ (рис. 4).



Рис. 6. Залежність величини електричного струму через зразок пресованого полікристалічного аденіну від відносної вологості.

Цю робочу гіпотезу підтверджено нами з використанням зразків полікристалічного аденіну, який на відміну від гуаніну утворює при кристалізації кристалогідрати [7].

На відміну від полікристалічного гуаніну полікристалічний аденін має лінійну, симетричну ВАХ у діапазоні відносних вологостей 40 – 100% (рис. 5). При цьому спостерігається поступове зменшення омичного опору зразка від $\geq 5,5 \text{ ГОм}$ до $1,1 \text{ ГОм}$. Окрім того, для аденіну характерними також є довго-часові зміни струму через зразок (рис. 6), які не спостерігаються для гуаніну. Після дванадцяти-годинного знаходження зразка аденіну у повітрі з відносною вологістю 100% його електричний опір змінюється від $\sim 168 \text{ ГОм}$ до 114 МОм . Цілком імовірно, що тривалочасові зміни провідності зразків аденіну пов'язані з утворенням кристалогідратів [7].

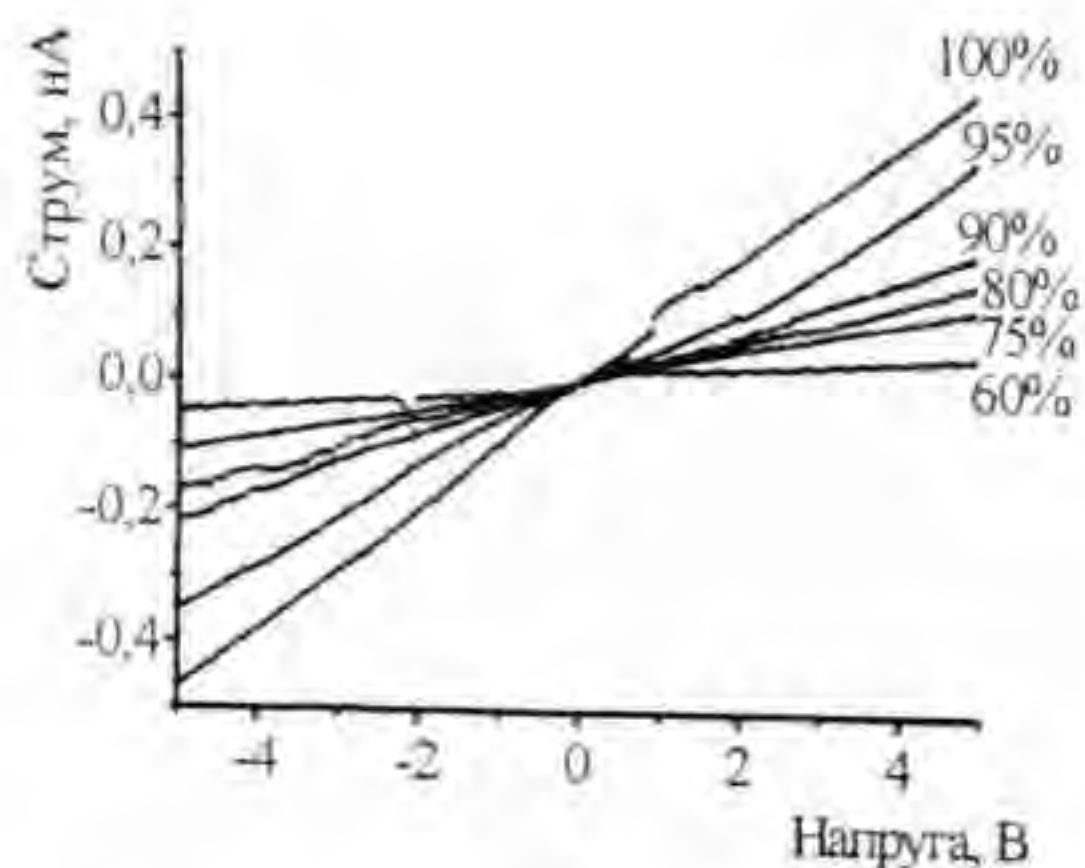


Рис. 5. Залежність ВАХ полікристалічного пресованого аденіну від відносної вологості у діапазоні останньої 60 – 100%, отриманих відразу ж після пресування.

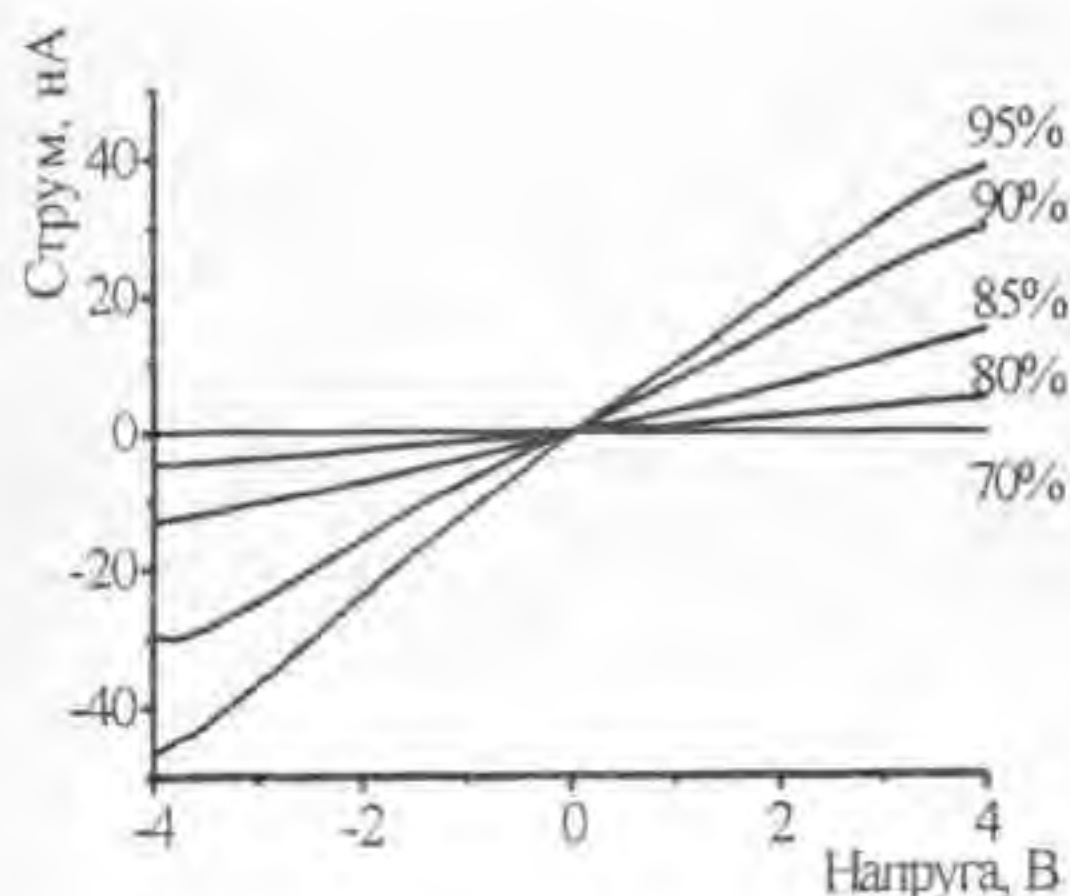


Рис 7. Залежність ВАХ полікристалічного пресованого аденіну від відносної вологості у значеннях останньої 60% – 100% після дванадцятигодинного перебування зразка у повітрі при 100% вологості.

Висновки

Вперше експериментально зафіксовано, що канонічні пуринові основи ДНК – гуанін та аденін – у стані полікристалічної пресованої таблетки мають суттєво різні ВАХ: нелінійно – асиметричну у першому випадку та симетрично – лінійну – у другому.

Окрім того, аденін, у протилежність гуаніну, демонструє доволі сильну довготривалу часову залежність струму через зразок, яка зростає зі збільшенням відносної вологості повітря, у якому він пресувався. Таку поведінку аденіну автори пов'язують з утворенням кристалогідратів, що підтверджуються рентгеноструктурними даними.

Вперше висунуто гіпотезу про те, що асиметрично – нелінійний характер ВАХ гуаніну спричинений дипольною нестійкістю його молекули, пов'язаною з пірамідальною будовою амінного фрагменту CNH_2 та низьким бар'єром площинної інверсії останнього.

Список використаних джерел

1. Чаплыгина Ю. А. Нанотехнологии в электронике – М.: Техносфера. 2005. – 448 с.
2. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот – М.: Мир, 1987. – 584 с.

3. Porath D., Cuniberti G., Di Felice R. Charge Transport in DNA-Based Devices // Top. Curr. Chem. – 2004, 237. – P. 183-227.
4. Kleine H., Wilke R., Pelargus Ch., Rott K., Puhler A., Reiss G., Ros R., Anselmetti D. Absence of intrinsic electric conductivity in single dsDNA molecules // J. Biotech. – 2004, 112, – P. 91-95.
5. Bhalla V., Bajpai P., Bharadwaj M. DNA electronics // EMBO Reports. – 2003, 4, №5, – P. 442 – 445.
6. Хоменко А. Ю., Горчинський А. Д., Коваленко В. Ф., Говорун Д. М. Вплив вологості на вольт – амперні характеристики полікристалічного гуаніну, канонічної основи ДНК // Вісник Київського університету. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2006. – вип. 3. – С. 387 – 392.
7. Гуменюк В.А., Сухоруков Б.И., Хоменко В. Г. ИК – спектроскопическое и рентгенографическое исследование влияния паров воды на структуру и переход аморфное состояние – кристалл пиримидиновых оснований нуклеиновых кислот // Биофизика. – 1976, №4, – С. 597-602.
8. Гуменюк В.А. Кристаллизация гуанина под влиянием воды: спектры поглощения в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазоне // Биофизика. – 1980, №5 – С. 793-795.
9. Говорун Д. М., Мещук Я. Р., Кондратюк І. В. Про квантохімічну природу стереохімічної нежорсткості канонічних нуклеотидних основ // Біополімери и клетка. – 1996. -12, №5, – С. 5 – 12.
10. Говорун Д. М., Мещук Я. Р., Кондратюк І. В. Топологічні властивості гіперповерхні потенціальної енергії канонічних нуклеотидних основ // Біополімери и клетка. – 1996. -12, №5, – С. 13 – 17.

Надійшла до редколегії 25.05.07

The first part of the paper discusses the
 importance of the study of the
 history of the country. It is
 necessary to know the past in order to
 understand the present. The author
 then discusses the various factors
 which have influenced the development
 of the country. These factors include
 the geographical position, the climate,
 the soil, and the human element.

The second part of the paper discusses
 the political system of the country. It
 describes the various branches of the
 government and the way in which they
 function. The author also discusses the
 role of the citizen in the political
 process.

The third part of the paper discusses
 the economic system of the country. It
 describes the various industries and
 the way in which they are organized.
 The author also discusses the role of
 the government in the economy.

The fourth part of the paper discusses
 the social system of the country. It
 describes the various social classes and
 the way in which they interact. The
 author also discusses the role of the
 government in the social system.

The fifth part of the paper discusses
 the cultural system of the country. It
 describes the various cultural traditions
 and the way in which they have
 developed. The author also discusses
 the role of the government in the
 cultural system.

The sixth part of the paper discusses
 the future of the country. It discusses
 the various challenges that the country
 faces and the way in which they can
 be overcome.



УДК 537.32

Новиков М.М.,
Макара В.А.,
Копань В.С.

Кафедра фізики металів фізичного факультету КНУ імені Тараса Шевченка (до 75-річчя з дня заснування)

За 75 років кафедра фізики металів підготувала понад 1000 фахівців, з яких 17-20% захистили дисертації. Лауреатами різних премій стали понад 25 її випускників. Викладачі кафедри надрукували більше, ніж 50 учбових посібників.

Ключові слова: кафедра фізики металів, КНУ імені Тараса Шевченка.

*E-mail: kopa@pulsary.com.ua

Історія. Україна має великі запаси залізної руди і кам'яного вугілля, що добре коксується. Продукція чорної металургії була і зараз є головним товаром експорту. В 1917-1920 рр. металургійна промисловість зазнала руйнації. Іноземні спеціалісти і більшість своїх інженерів та вчених були знищені або емігрували. Для відновлення промисловості потрібно було готувати нові кадри. РНК УРСР Постановою від 02.12.1921 р. створила мережу науково-дослідницьких кафедр (НДК). Наприкінці 1925 року в Україні їх нараховувалось 94. НДК фізики, створена в Індустріальному інституті, мала в своєму складі кваліфікованих фізиків (Лінник В.П., Лашкарьов В.Е., Герцрікен С.Д., Наследов Д.Н.). На її базі 07.01.29 р. організовано Інститут фізики (ІФ) на чолі з директором Гольдманом О.Г. (закінчив Лейпцігський і Київський університети). Провідні співробітники ІФ започаткували нові наукові напрямки. Так, Лашкарьов В.Е. згодом став першим директором Інституту напівпровідників, Герцрікен С.Д. очолив у 1930 р. відділ рентгенофізики ІФ, який перед війною був реорганізований у відділ металофізики, а в 1945 р. став підрозділом Інституту металофізики.

В 1933 р. Інститут профосвіти та фізхімнатінститут назвали Київським державним університетом. На щастя, зміна упаковки та надпису не змінює суті товару. Тому можна вважати, що КНУ існує з 1834 року, незалежно від того, що робили з народом і освітою.

M.M. Novikov,
V.A. Makara,
V.S. Kopan

Metal Physics chair of the Physical Department of Taras Shevchenko Kyiv National University (to 75-th Anniversary)

More than 1000 specialists (17-20% among which defended theses) graduated from Metal Physics chair for 75 years. More than 25 graduates are the winners of different Prizes. The teaching staff have published more than 50 manuals.

Key Words: Metal Physics chair, Taras Shevchenko Kyiv National University.

В 1931 р. на базі спеціалізації ФТТ Герцрікен С.Д. створив лабораторію рентгенометалофізики, яка в 1932 році стала кафедрою. Перший випуск фахівців кафедри відбувся у 1933 р.

Герцрікен Соломон Давидович у 1926 р. закінчив фіз.-мат. факультет Київського інституту народної освіти. У 1927 році у співавторстві з Лашкарьовим В.Е. в „Українських фізичних записках” опублікував першу статтю „Камера для дебаєграм зразків довільної форми”. В 1936 р. він захистив кандидатську дисертацію, а в 1939 р. – докторську.

В 1934 р. на кафедрі винайдено берилієве скло ГЕТАН (перші дві літери від прізвища Герцрікена С.Д.), що добре пропускало рентгеновські промені. Це дозволило налагодити у Петрограді виробництво рентгеновських трубок і зупинити їх імпорт.

В повоєнні роки у галузі металофізики працювали: Герцрікен С.Д., Дехтяр І.Я., Жмудський О.З., Лісник А.Г., Каральник С.М., Кузьменко П.П., Батуринська Н.Л., Кальна Г.І., Супруненко П.О., Рябчун Т.О., Новиков М.М. і Ніколаєва Е.Г., Максимюк П.О., Петренко П.В., Харьков Є.Й., Васильцов С.А.

Переважаючим напрямком досліджень була дифузія. В 1960 р. Герцрікен С.Д. і Дехтяр І.Я. опублікували монографію „Дифузія в металах и сплавах в твердой фазе”. В світовій літературі тоді було лише дві монографії по дифузії (Бугакова В.З. – 1949 р., та В.Зейта – 1959 р.). Монографія (563 с.) прославила колектив

кафедри як провідний в області досліджень дифузії. Вона актуальна і до сьогодні, бо містить нестаріючі методи розрахунку коефіцієнтів дифузії та таблиці параметрів дифузії основних промислових сплавів.

Напрямок рентгеноструктурних та рентгеноспектральних досліджень розвивали Жмудський О.З. і Каральник С.М.

Дослідження по цій тематиці були драматичними для України. Згадаймо коротко історію:

- В 1881 р. І. Пулюй опублікував статтю „Проникнення швидких Х-променів з трубок назовні”;

- В 1901 р. В. Рентген одержав Нобелівську премію за „відкриття” Х-променів;

- В 1913 р. Г. Вульф (народився в Ніжині) опублікував формулу з дифракції рентгенівських променів.

- В 1914 р. М. Лауе одержав Нобелівську премію за відкриття дифракції рентгенівських променів, а в 1915 р. Г. Брегг і Л. Брегг – за формулу Вульфа – Брегга.

Потім були дві Нобелівські премії за рентгеноструктурні дослідження пеніциліну і ДНК.

Ці факти засвідчують, що визнання наукових досягнень вітчизняних вчених часто-густо наступає посмертно.

Жмудський О.З. сконструював оригінальні камери для структурного аналізу, які були виготовлені в майстерні фізфаку. Йому вдалось виміряти параметр кристалічної ґратки з рекордною і до сьогодні точністю – до п'ятого знаку після коми. Щоб на дослід не впливала нестабільність температури, експозиція була доведена до кількох секунд за рахунок збільшення потужності рентгенівської саморобної трубки та збільшення площі зразка, на якому відбувалась дифракція. В рентгенівській лабораторії, коли працювала ця установка, водяні труби і паркет „били” струмом. І хоча Жмудський О.З., Каральник С.М. і Кузьменко П.П. самі проводили експерименти і „підставляли” свої груди під Х-промені, вони були довгожителлями, бо в них був науковий азарт (коли виробляються, як відомо, гормони, що посилюють імунітет). Демократично поведився в лабораторії і Герцирікен С.Д. Він завжди першим проводив новий експеримент, а вже потім доручав своїм учням виконувати серію дослідів. Ввечері (в 20-22 год.) телефонував до лабораторії і запитував, як „лягла на графік точка”. Він був фанатом

фізики, навіть колекціонував леза для гоління, аби дослідити, з якої сталі вони виготовляються.

Герцирікен С.Д. був точним і пунктуальним. В день, коли помер його батько, він прочитав лекцію студентам, а вже потім зайнявся похоронами. Сам він помер в 1961 р. у віці 60-ти років від обширного інфаркту, що трапився у відпустці після веслування на Десні. В м. Остер тоді негайно прилетіла проф. Поволоцька, відомий терапевт-кардіолог і добра знайома хворого. Не врятувала. Поверталось в Київ тіло Соломона Давидовича, лежачи в кузові „газона”, накрите простиралом. Поруч сидів, обпершись спиною об кабінку, його аспірант і думав про суєтність життя, примарність слави і вічності. На похорони зібралось не менше 1000 людей, бо Герцирікен С.Д. був добрим і тактовним, мало брав, а багато давав.

В 1960 р. зав. кафедрою став Кузьменко П.П.

Співробітники кафедри загальної фізики, якою керував Жмудський О.З. були, переважно, випускниками кафедри фізики металів (до 1972 р.). Тому наукова робота на обох кафедрах проводилась у тісній співдружності. Пізніше Петренко П.В. створив кафедру функціональних матеріалів (сучасна назва), яку зараз очолює випускник кафедри фізики металів Куліш М.П. Таким чином, кафедра фізики металів породила ще дві кафедри. Цим були розширені дослідження в області фізики твердого тіла, збільшено випуск спеціалістів. За 75 років лише кафедра фізики металів підготувала понад 1000 фахівців, 17-20% з яких захистили дисертації. Лауреатами різних премій стали понад 25 її випускників. Кузьменко П.П. став визнаним вченим за дослідження явища масопереносу при проходженні струму в металах. До його досліджень вважалося, що електроперенос визначають закони Фарадея. На кафедрі було відкрито інтенсивний масоперенос внаслідок розсіювання носіїв струму на дифундуючи іонах. Аспірант Островський Л.Ф. довів, що сила електронного вітру в 2-10 разів перевершує силу електричного поля. Аспірантка Гриневич Г.П. знайшла, що сила діркового вітру в 100-400 разів перевершує силу поля. Отже, було доведено, що в металах масоперенос не підкоряється законам Фарадея. Аспірант Лозовий В.І. показав, що в розплавах відсутній абсолютний перенос. Це дозволило запропонувати точнішу модель будови розплавів порівняно з моделлю академіка Френкеля.

В 1983 р. Кузьменко П.П. опублікував монографію "Електроперенос, термоперенос і дифузія в металах". Під керівництвом Кузьменка П.П. і його учня Харькова Є.Й. на кафедрах фізики металів і загальної фізики було виконано понад 30 дисертаційних робіт. Явище електропереносу перейшло в площину практичного використання, бо виявилось, що електромасоперенос вкорочує вік сучасної інтегральної мікросхеми (якщо довжина струмових доріжок коротша 10 мкм). За роботи в області дифузії Кузьменко П.П. і Харьков Є.Й. нагороджені держпремією України. Дослідження в галузі дифузії і зараз продовжуються на кафедрі під керівництвом доц. Оглоблі В.І. Було вперше досліджено ізотопний ефект дифузії трьох ізотопів олова в олов'яному розплаві і знайдена формула масової залежності коефіцієнтів дифузії. Розроблена флуктуаційна модель утворення і дисоціації наноконкомплексів в розплавах.

Аби читач мав уявлення про науковий подвиг при дослідженні електропереносу, ми – очевидці, наводимо наступну замальовку. На площі в 40 м² день і ніч гудуть 12 селенових випрямлячів струму, кожен висотою ~ 1 м. Вони разом дають струм 10000 А. В лабораторії духота до 40°C. Шумлять форвакуумні та водяні насоси. Експериментатор регулює напругу, дивлячись через пірометр на радіоактивний зразок, так, щоб його температура становила, наприклад, 1000±10⁰°C. Експозиція - 2-10 годин. Коли 10 годин – то по лабораторії ходить напружений і хмурий „ППК” (студентське прозвісько Кузьменка П.П.). І так було понад 5 років. Це був шторм проблеми, схожий на добування металу при золотій лихоманці.

„ППК” писав вірші, уривок одного дозвольте процитувати:

*„Не тревожь меня, Лира, красою своей.
Не зови у неведомы чудные дали.
Мне судьбою указан не этот удел.
Не тревожь, сердце полно печали”*

В ті часи популярною була пара слів „фізики-лірики”. „ППК” написав не один вірш. Крім того, він збирав політичні анекдоти, знаючи, що є потенціальним кандидатом розважати сибірських лісорубів.

В 1956 р. Новиков М.М. (аспірант Герцикена С.Д.) розпочав вивчення дефектів кристалічної структури. Останні в СРСР вважались примарами, а дислокаційники – марнотратцями. Новиков М.М. сконструював оригінальний дилатометр, що дозволяв

вимірювати зміну об'єму ΔV при введенні у зразок дефектів з чутливістю $\Delta V/V \sim 10^{-6}$. Для цього срібна, наприклад, дротина приварювалась кінцями до срібного брусочка. За стрілою прогину дротини в процесі нагріву визначалась ΔV , що виникала внаслідок анігіляції дефектів кристалічної будови.

В 1956-1962 рр. на цьому дилатометрі були досліджені всі чисті метали, з яких можна було виготовити фольги чи дріт. Було доведено, що енергії утворення і руху вакансій становлять кожна приблизно половину енергії активації самодифузії, а енергія анігіляції дислокацій залежить від їх типу. Разом зі студентом Копанем В.С. в 1957 р. Новиков М.М. виготовили установку, що вимірювала гранично малу електрорушійну силу (до $3 \cdot 10^{-8}$ В при вихідному опорі джерела 0,01 Ом). Тоді було відкрито: при деформації одної вітки термопари виникає термо-е.р.с., що пропорційна густині дислокацій. Опубліковані в 1959 р. дві статті на цю тему і понині вважаються піонерськими.

В 1962 р. Горідько М.Я., Новиков М.М. і Кузьменко П.П. повідомили про відкриття фотомеханічного ефекту (ФМЕ). Його суть: при освітленні кристалів сурми змінюються механічні властивості поверхні (пластичність, мікротвердість тощо). ФМЕ був пізніше ними виявлений в Ti, CdS, Ni, Cu, Al, Ge, Si, NaCl, KCl, LiF та інших кристалах. Були відкриті фотокапілярний, електромеханічний і концентраційний ефекти.

В 1968 р. аспірант Макара В.А. почав досліджувати дислокації, що виходять на поверхню лужногалоїдного кристалу і, отже, сильно відчують зміну стану поверхні. Такі дислокації увійшли в науку під терміном „короткі дислокації”. У 1977 р. Новиков М.М., Макара В.А. та Стебленко Л.П. повідомили про вплив на рухливість коротких дислокацій оксидів, що були сформовані на поверхні кристалу Si. Так була започаткована тематика досліджень багатошарових напівпровідникових систем, яка інтенсивно розвивається і понині. Вона важлива для вдосконалення інтегральних схем, які по своїй суті є багатошаровими. Робота науковців була відзначена Державною премією України у 1987 р, премією МОН у 1983 р по темі „Кремній”.

Велика група дослідників (Новиков М.М., Макара В.А., Горідько М.Я., Хименко М.В., Швидкий В.А., Руденко О.В., Котикова Т.Д., Мельниченко М.М., Драненко А.С., Стебленко Л.П., Весна Г.В., Теселько П.О., Кольченко

Ю.Л., Шевченко В.Б., Науменко С.М., Робур О.Г., Курилюк А.М., Колпак О.В. та понад 30 студентів) за останні 40 років дослідила вплив фізичних полів (електричного, магнітного, електромагнітного) та різноманітних технологічних обробок (лазерної, радіаційної, ультразвукової) на особливості динамічної поведінки дислокацій та інших дефектів структури і їх нанокластерів в напівпровідниках. Одержана серія результатів піонерського характеру, що стосуються електропластичних, електромеханічних, магнітопластичних, магнітомеханічних ефектів, ефектів зміни в полях електрофізичних характеристик і розсіювання рентгенівських променів.

Ця тематика перемагала в міжнародних конкурсах і одержувала відповідне фінансування: проект 1995 р. в рамках фонду Сороса, проект 2004-2006 рр. з республікою Білорусь. Результати, що мають практичне значення, захищені 35 авторськими свідоцтвами СРСР на винаходи і патентом України.

Новим в області надпровідників є також дослідження властивостей наноструктурованих плівок кремнію. Вже створено робочі елементи фотолюмінесцентних сенсорів біологічних речовин і молекулярних забруднень середовищ.

В 1962-1964 рр. Копань В.С. почав виготовляти багат шарові композиційні матеріали, прокатуючи пакет з фольг, що чергувались. Товщина шару доходила до 10-20 нм. Перші дві роботи про композиції він опублікував в 1964 і 1965 рр. Так був започаткований в Україні новий напрямок – фізика нанокристалічних композиційних матеріалів (НКМ). Було доведено, що ділянки, які прилягають до границі контакту двох металів, мають параметри електроопору, термо-е.р.с., міцності, пластичності, магнетизму відмінні від таких параметрів в об'ємі. В біметалах ці ділянки становлять менше 1% об., а в НКМ – 30-50%. Це є причиною унікальних властивостей НКМ. Значний вклад у розвиток тематики внесли: Кузьменко П.П., Копань В.С., Лисенко О.В., Майборода В.П., Рево С.Л., Іменинник В.Г., Михалко В.Д., Пов'якель В.М., Безсонов В.Б., Подоба А.П., Дорохович В.П., Силенко П.М., Король Л.О., Ковальчук І.Г., Семенько М.П., Дашевський М.М., Скрипка О.І., Іваненко К.О., Хуторянська Н.В., Караман Д.Ю., Беженар А.А., Дун Зан Мін (аспірант з КНР). По тематиці нанокомпозицій одержано понад 60 авторських свідоцтв про винаходи і 3 патенти. Опубліковано 2 монографії та учбовий посібник.

Дослідження магнітних властивостей було започатковано в 1968 р. (Кузьменко П.П., Супруненко П.О.). Були досліджені фазові діаграми сплавів Cr з V, Nb, Ta, Ni та Mo (Захаренко М.І. і Бабич М.Г.) та пояснені магнітні властивості особливостями взаємодії d -електронів домішки і матриці.

В останні роки інтенсивно досліджуються неупорядковані системи – металеве скло і нанокристалічні матеріали (Захаренко М.І., Семенько М.П., Бабич М.Г., Наконечна О.І., Плющай І.В.). Відкрито ефекти заморожування спінового моменту атомів внаслідок структурної неупорядкованості. Відомо, що в полікристалічних феромагнетиках атоми зчеплені міцно, обмінний інтеграл d -електронів додатний, існує однонаправленість спінів, яка відчуває дію зовнішнього магнітного поля. В металевих стеклах порушені міжатомні зв'язки, спіни частини d -електронів „заморожені” в полях своїх атомів і слабо реагують на зовнішнє поле. Розроблена багатозонна модель, що дозволяє розраховувати електронну структуру широкого класу матеріалів включно з ДНК.

Відкрито нове явище – аномальний тензоопір аморфних і нанокристалічних сплавів. Його суть: при розтягуванні металевого скла відносна зміна електроопору на порядок перевершує цей параметр полікристалічного зразка. Наукова група співпрацює з вченими США, Німеччини, Франції, Росії, Угорщини, Швейцарії та Іспанії. Опубліковано 3 монографії та понад 200 статей.

В кінці семидесятих років минулого сторіччя на кафедрі було сформовано колектив під керівництвом Марківа В.Я. (який вже тоді був визнаним фахівцем по визначенню структур монокристалів будь-яких складних систем). Наукова група (Білявина Н.М., Гавриленко І.С., Шевченко І.П., Рачинський В.Г.), заробивши кошти при виконанні госп. – договірних робіт, закупила сучасну апаратуру і виготовила обладнання для синтезу та термообробки сплавів. Суттєвими науковими результатами є: вперше побудовано ізотермічні перерізи діаграм біля 150 нових потрійних систем, синтезовано більше 450 інтерметалічних сполук (50 нових структурних типів). Опубліковано понад 300 статей, значну частину – в зарубіжних виданнях (Handbook of Ternary Alloy Phase Diagram, Pearson's Handbook Crystallographic Data for Intermetallic Phases, The Powder Diffraction File and Related Products та ін.).

Випускники – фахівці досліджень структури – працюють в США, Франції, Швейцарії, Фінляндії, Німеччині. Такий значний інтерес до вивчення структури обумовлений незаперечним фактом: перш, ніж досліджувати явище в будь-якій природничій науці, потрібно знати, з яким об'єктом маємо справу, як розташовані в ньому атоми і молекули, тобто, потрібно знати його структуру.

Мрією матеріалознавців є створення пластичної кераміки, оскільки вона може працювати при температурах, що перевершують 1200°C (верхня робоча межа переважної кількості конструкційних металевих сплавів).

В 1996 р. Новиков М.М. і Копань Т.В. вперше створили керамічний композиційний матеріал з порівняно пластичної нанокристалічної матриці SiC , армованої неперервними волокнами SiC .

Нині на кафедрі широким фронтом розгорнуті дослідження (Макара В.А., Казо І.Ф., Когутюк П.П., Попов О.Ю., Чорнобук С.В., Тоцький І.М.) міцності та пластичності широкого спектру безкисневих керамік, що є перспективними для виготовлення деталей атомних реакторів нового типу.

Значним науковим досягненням групи є відкриття наявності в кераміках фулеренів C_{60} , C_{70} , а також стабільних нанокластерів карбоборатів.

Перспективи розвитку кафедри.

1. Для опису таблиці Менделєєва достатньо 100 сторінок тексту. Те, що зібрали матеріалознавці світу, записано на 10^7 сторінках. Це океан, в якому тонуть практики. Потрібна хороша теорія, яка б усе набуте зробила придатним до використання. На фізичному факультеті КНУ студенти одержують серйозну математичну підготовку. Було б доцільно розширити роботи по комп'ютерному моделюванню і теоретичній металофізиці. Наукова група такого типу могла б створювати тематичні довідники, реферативні збірки тощо.

2. Для дослідження нових явищ промисловість не випускає приладів. Відповідні наукові установки потрібно створювати. Як любив повторювати Кузьменко П.П., „голь на видумки хитра”. Але необхідні нові, капітальні прилади (мікроскопи, дифрактометри, аналізатори тощо). Вони дорогі. Для їх обслуговування потрібні високооплачувані інженери. За рубежом існують фірми, в яких можна взяти напрокат такі прилади, разом з

обслуговуючим персоналом. Зараз 10 застарілих електронних мікроскопів університету завантажені на 10-15%, займають десятикратну площу, їх обслуговують 10-15 інженерів. Потрібно кілька сучасних мікроскопи, які б працювали у дві зміни.

3. Оцінка роботи науковця буде здійснюватись, напевно, за величиною цитат-фактора, чи точнішого – Хірш-фактора. Вченим з великим Хірш-фактором легше шукати спонсорів, брати участь в розробці міжнародних наукових програм, налагоджувати співробітництво. Щоб Хірш-фактор був високим, необхідно піонерські статті друкувати в журналах, що мають високий імпакт-фактор.

4. В структуру НАНУ входить 170 наукових установ та 202 організації (конструкторські бюро, технопарки, науково-технічні центри). В НАНУ працює 44 тисячі фахівців (для порівняння: у французькому Національному центрі наукових досліджень працює 30 тисяч). Гріхом було б не використовувати цей могутній потенціал.

На кафедрах працюють за сумісництвом фахівці з інститутів Металофізики, Надтвердих матеріалів, Проблем матеріалознавства. Частина студентів виконує лабораторні роботи в цих інститутах. І надалі доцільно використовувати на педагогічній ниві потенціал НАНУ.

На кафедрі вже 10 років функціонує під керівництвом Макари В.А. Навчально-науковий центр „Фізико-хімічне матеріалознавство”, де вчаться магістри, відряджені з інших ВУЗів України. Випускники центру становлять переважну частину аспірантів. Такий досвід необхідно розширювати.

5. Викладачі кафедри надрукували 16 учбових та 34 науково-методичних посібників. Приклад доц. Корочкіної Л.М. – вона авторка 23 посібників – вказує на те, що наші викладачі мусять значно посилити роботу над педагогічною літературою.

Кафедрі фізики металів – 75 років. Але не хочеться вживати епітет „одна з найстаріших”, бо колектив працює з молоддю і розвиває вічно молоду науку.

Надійшла до редколегії 30. 03.07.

УДК 532.536

Альошин О.Д., доктор ф.-м. наук, професор
Білоус О.І., кандидат ф.-м. наук
Подкур Ю.В., студентка

Експериментальна перевірка рівняння критичної в'язкості

В роботі на основі теоретичних розрахунків М.Фіксмана запропоновано рівняння флуктуаційної частини в'язкості речовини поблизу критичної точки. Врахування просторової дисперсії системи забезпечує скінченність в'язкості в критичній точці. Отримане рівняння узгоджується з експериментальними даними поведінки в'язкості подвійних розчинів поблизу критичної температури розшарування.

Ключові слова: флуктуаційна частина в'язкості, критична температура розшарування, радіус кореляції

E-mail: alekhin@ntpu.kyiv.ua, o.bilous@ukr.net

Експериментальні і теоретичні дослідження індивідуальних рідин та подвійних розчинів поблизу їх критичних станів [1, 2], особливо кінетичних властивостей рідинних систем [3-5], продовжують залишатися одними із актуальних задач фізики конденсованого стану речовини.

Раніше в роботах [6,7] на основі існуючих експериментальних даних в'язкості рідин поблизу критичної точки (КТ) і рівнянь критичної в'язкості М.Фіксмана [8] було зроблено висновки про скінченність в'язкості рідин в критичному стані. На основі цих досліджень нами в даній роботі було запропоновано наступний вираз для оберненої величини флуктуаційної частини в'язкості

$$\eta_f^{-1} = (\Delta\eta_0)^{-1} \left[1 + (qr_c)^2 \right]^{-1} = r_0^{-1} \left[1 + \left(\frac{a_0}{b_0} t^2 \right) \right]^{-1}, \quad (1)$$

$$a_0 = \frac{qr_0}{\Delta\eta_0}, \quad b_0 = \frac{1}{\Delta\eta_0},$$

де $R_c = r_0 t^{-1/2}$ - радіус кореляції системи; r_0 і $\nu \approx \frac{2}{3}$ - амплітуда і критичний показник радіусу кореляції [1]; q - параметр, що має розмірність хвильового вектора; $t = (T - T_c)/T_c$, T_c - критична температура.

УДК 532.536

Alekhin A.D., Sci.Dr., Prof.
Bilous O.I., Ph.D.
Podkur Yu.V., student

Experimental verification of the equation of critical viscosity

The equation of the fluctuation part of the viscosity of substance near the critical point is proposed in the work on the basis of the theoretical calculations of M.Fiksmana. The calculation of the spatial dispersion of system ensures the finiteness viscosity at critical point. The obtained equation will agree with the experimental data of the behavior of the viscosity of the dual solutions near the critical temperature of the stratification.

Key Words: fluctuation part of viscosity; exfoliation critical temperature; correlation length

У різних граничних випадках: $qR_c \gg 1$ і $qR_c \ll 1$ рівняння (1) відповідно набуває вигляду:

1) $qR_c \gg 1$:

$$\eta_f^{-1} = a_0 + \frac{1}{2} \frac{h_0^{-2}}{a_0} t^2, \quad (2)$$

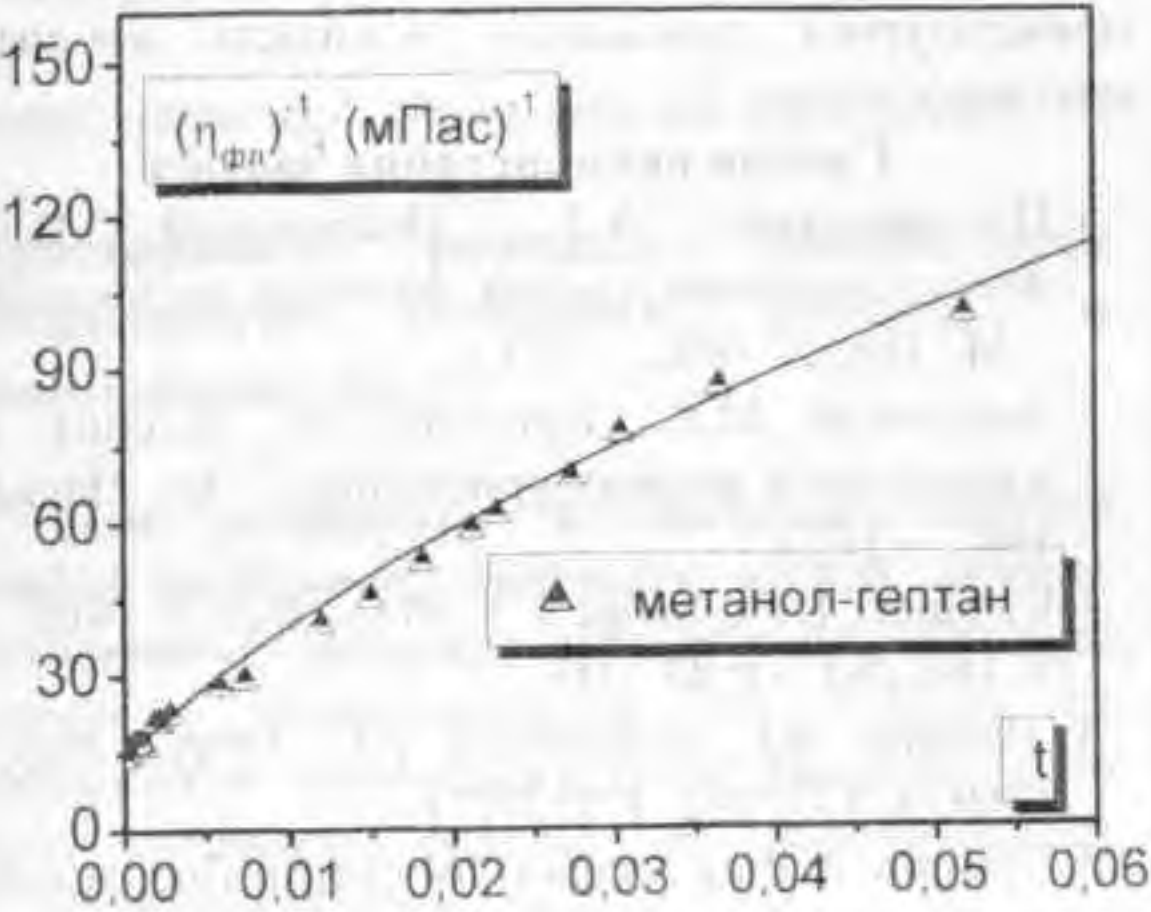
Як видно з (2) при критичній температурі ($t=0$) в'язкість приймає кінцеве значення $\eta_f = \frac{\Delta\eta_0}{r_0 q}$. При віддаленні від КТ обернене значення η_f^{-1} змінюється за квадратичним співвідношенням $\eta_f^{-1} = const + a_0 (t^2)^{-1}$.

2) $qR_c \ll 1$:

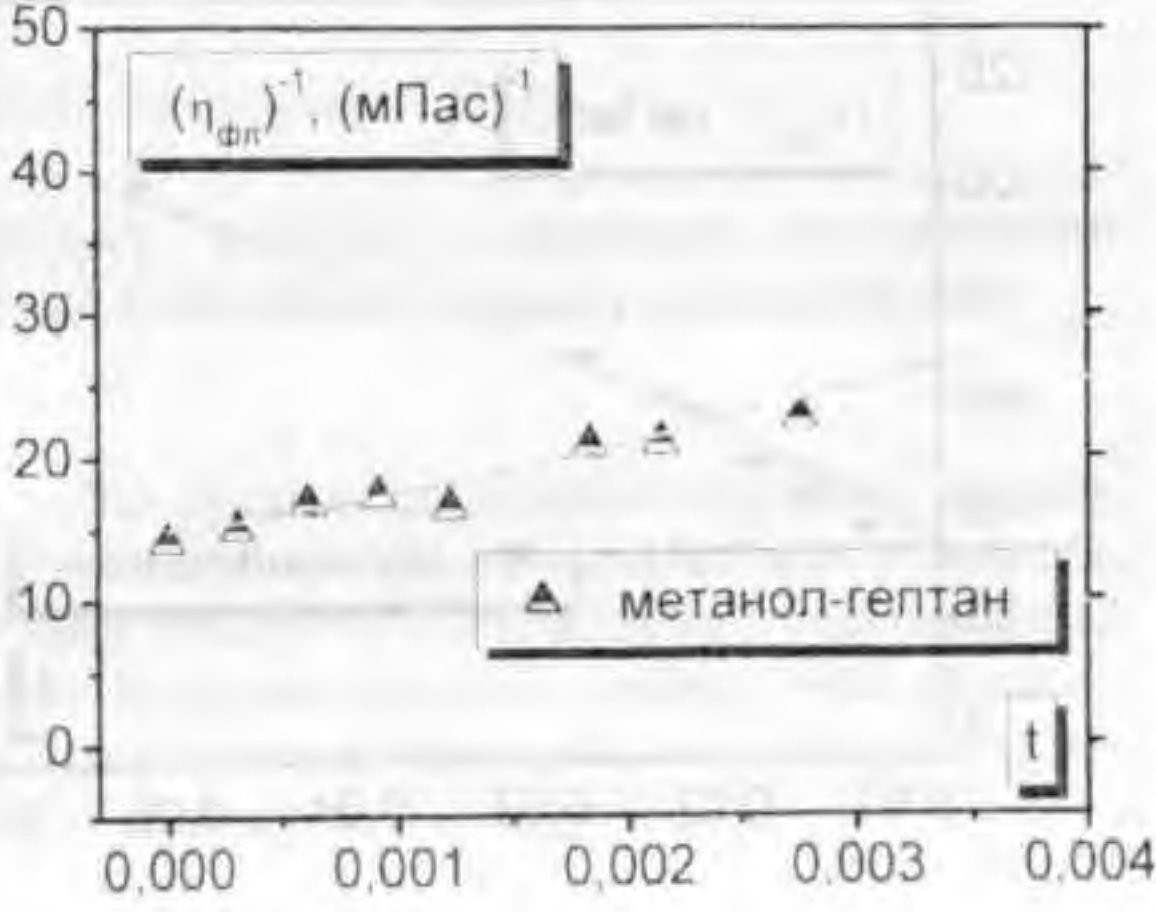
$$\eta_f^{-1} = b_0 t^2 + \frac{1}{2} \frac{a_0^{-2}}{b_0} t^{-1}, \quad (3)$$

Отримані співвідношення були проаналізовані і перевірені на підставі експериментальних даних [6, 7, 9, 10] температурних залежностей флуктуаційної частини в'язкості подвійних розчинів метано-гептан та триметилпіридин+важка вода (3МП+D₂O), з критичною концентрацією поблизу критичної температури розшарування.

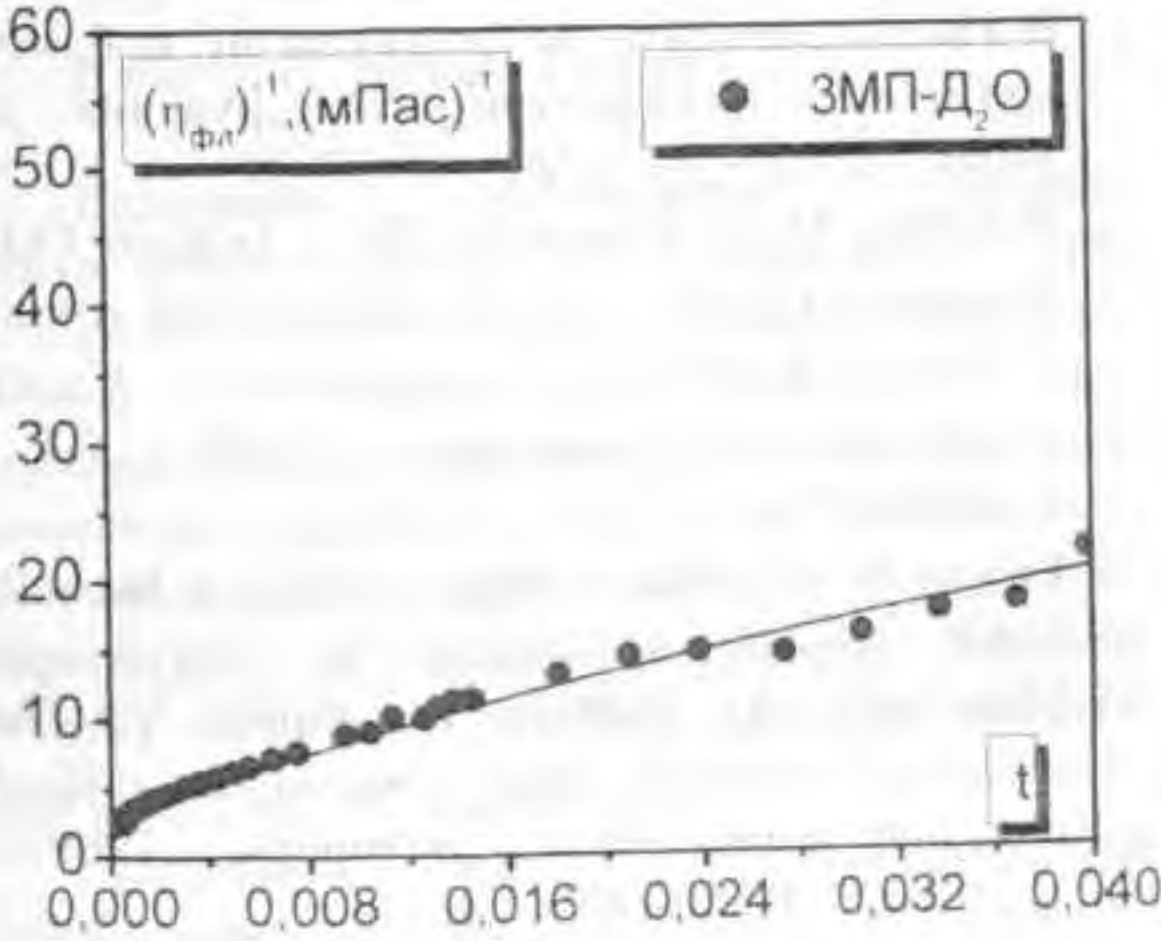
Ці дані представлено на рис. 1-3.



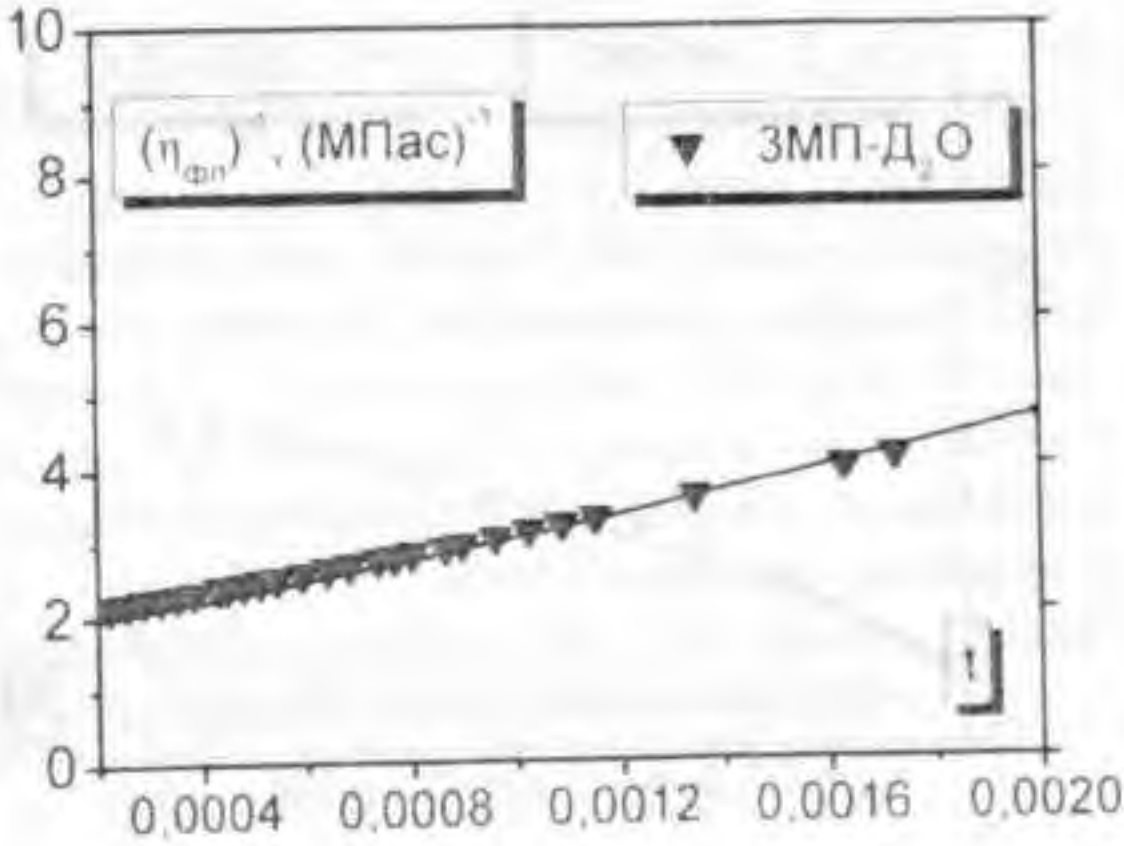
a)



a)



b)



b)

Рис. 1. Температурна залежність флуктуаційної частини в'язкості: а) отримані нами експериментальні дані, б) літературні дані [9, 10]. Суцільні лінії описують вид рівняння (1), параметри якого a_0 та b_0 представлені в табл. 1

Суцільними лініями на рис. 2, 3 показані асимптотики, параметри яких a_0 , b_0 , ν та добуток (qR_c) , представлені в табл. 1.

Таблиця 1

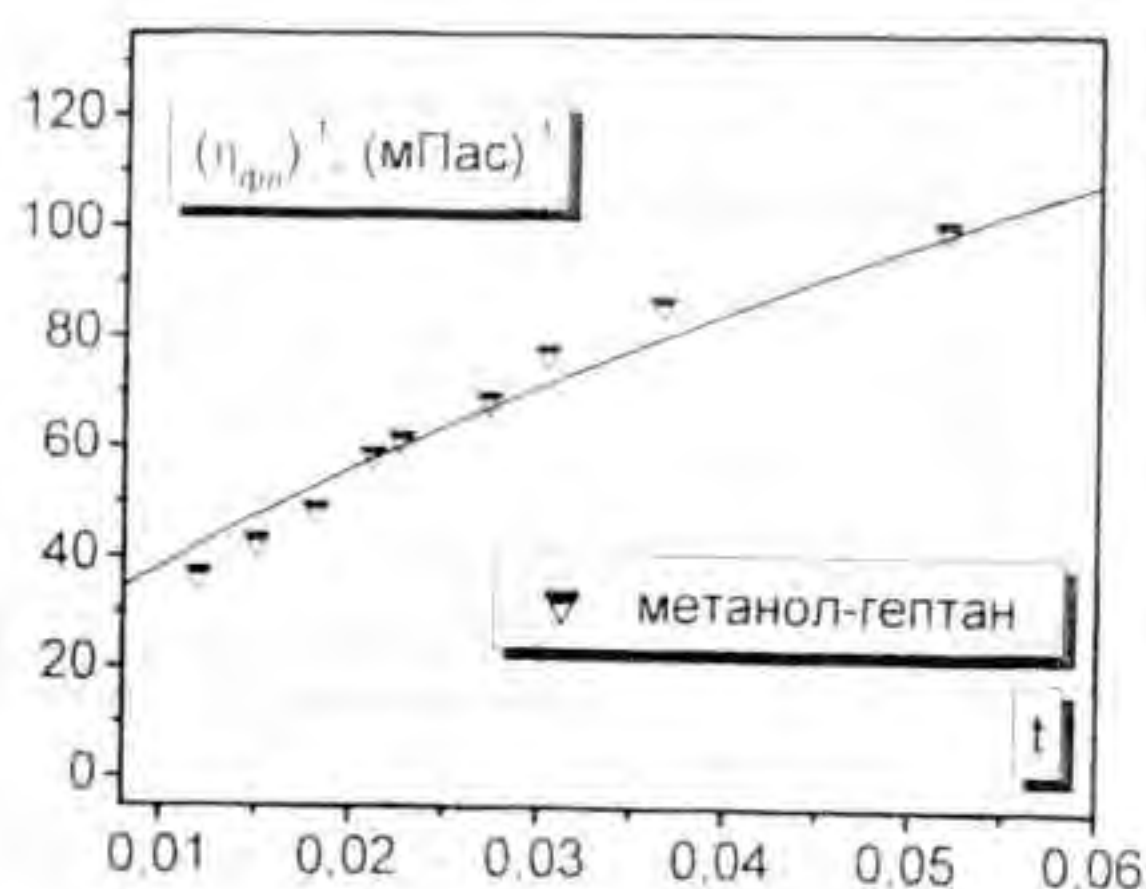
Параметри, що визначають рівняння асимптотик флуктуаційної частини в'язкості досліджуваних рідинних систем

Назва системи	a_0 , мПа·с	b_0 , мПа·с	ν	(qR_c)
Метанол-гептан	15	650	0.63	0.023
3МП-D ₂ O	2	150	0.64	0.013

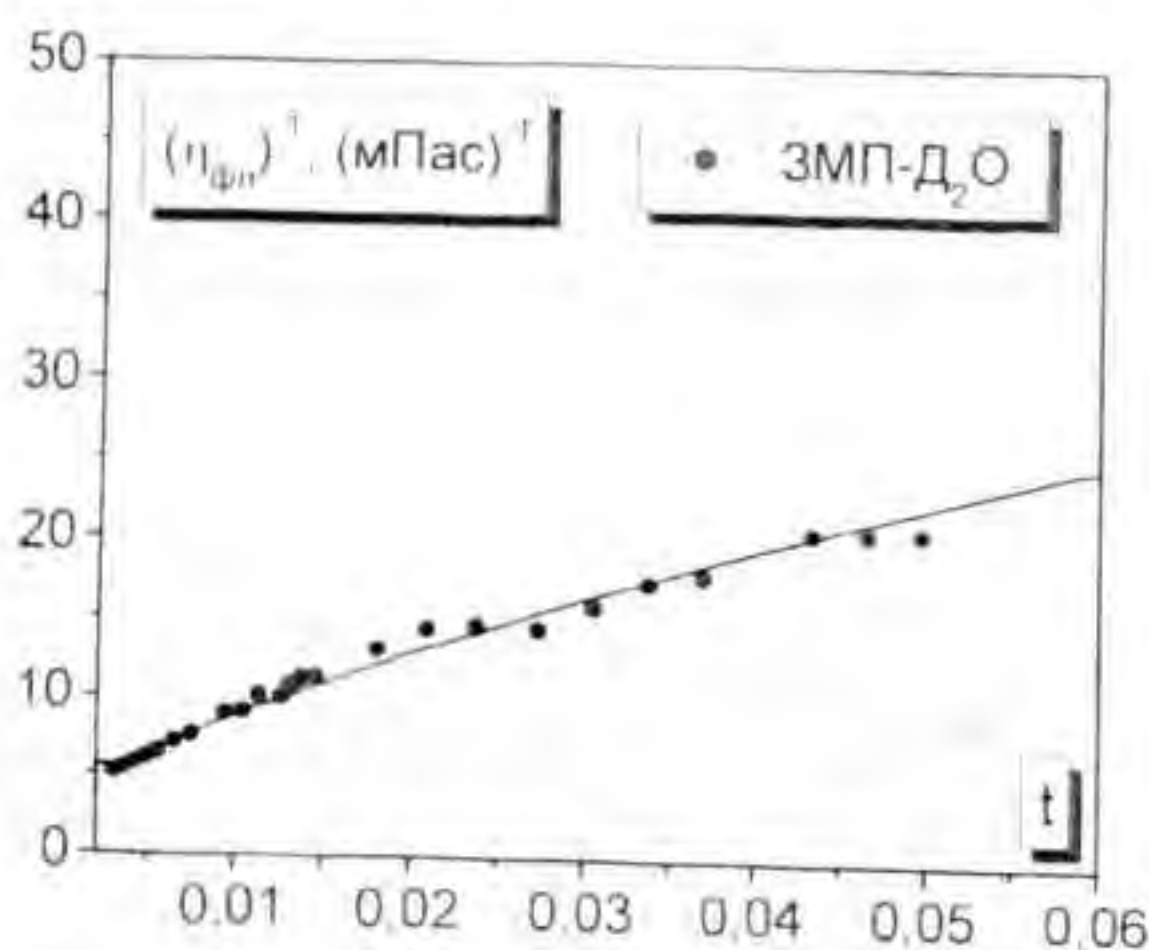
Рис. 2 Поведінка в'язкості $\eta(t)_c$ досліджуваних систем в близькому okolí критичної температури ($qR_c \gg 1$): а) отримані нами експериментальні дані, б) літературні дані [9, 10]

Як бачимо представлені в загальному вигляді експериментальні дані $\eta(t)_c$ (рис.1), а також поведінка $\eta(t)_c$ на асимптотиках $qR_c \gg 1$, $qR_c \ll 1$ (рис.2, 3) добре узгоджуються з виглядом рівнянь асимптотик (2), (3) при значеннях їх параметрів представлених в табл.1.

Проведений нами подібний аналіз інших літературних даних [11-13] також підтверджує зроблені вище висновки.



a)



b)

Рис. 3 Поведінка в'язкості $\eta(t)_c$ досліджуваних систем в гідродинамічній області температур ($qR_c \ll 1$): а) отримані нами експериментальні дані; б) літературні дані [9, 10]

Це дало можливість, за даними $\eta(t)$ розрахувати цілий ряд параметрів, що характеризують флуктуаційну частину в'язкості різноманітних рідинних систем поблизу КТ: амплітуди і критичні показники радіусу кореляції та в'язкості; визначити кінцеве значення в'язкості в критичній точці.

Таким чином, на основі проведених експериментальних досліджень температурної залежності зсувної в'язкості досліджених рідинних систем різної природи: діелектричних рідин [6, 7], рідинних і іонних систем [9, 10], металевих розплавів [12, 13], рідинних кристалів [11] можна зробити висновок, що запропоноване рівняння флуктуаційної частини в'язкості, що узгоджується з рівнянням М.Фікмана [8],

адекватно описує існуючі експериментальні дані температурної залежності в'язкості поблизу критичної точки.

Список використаних джерел

1. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. - М.: Наука, 1982. - 381 с.
2. Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. - М.: Наука, 1987. - 272 с.
3. Kadanoff L.P., Swift J. // Phys. Rev. - 1968. - V.166, №1. - P.89 - 101.
4. Halperin B.I., Hohenberg P.C. // Phys. Rev. - 1969. - V.177, №2. - P.952-971.
5. Dynamic scaling function for critical fluctuations in classical fluids / H.C. Burstyn, S.V. Sengers, S.K. Bhattacharjee and R.A. Ferrell // Phys. Rev. A. - 1983. - V.28, №3. - P.1567 - 1578.
6. Альохін О.Д., Сперкач В.С., Білоус О.І. В'язкість розчину метанол-гексан поблизу критичної температури розшарування // УФЖ. - 2002. - Т.47, №1. - С. 37-38.
7. Альохін О.Д., Сперкач В.С., Білоус О.І. В'язкість рідини поблизу критичної точки // Вісник Київського університету. Серія фізико-математичних наук. - 2000. - №3. - С. 374-377.
8. Fixman M. // J. Chem. Phys. - 1962. - 36. - P. 1961.
9. Oleinikova A., Bulavin L., Pipich V. The viscosity anomaly near the lower critical consolute point // Int. J. Thermophys. - 1999. - V.20, №3. - P.870 - 889.
10. Oleinikova A., Bulavin L., Pipich V. Critical anomaly of shear viscosity in a mixture with an ionic impurity // J. Chem. Phys. Lett. - 1997. - V.278. - P.121 - 126.
11. Альохін О.Д., Сперкач В.С., Абдикарімов Б.Ж., Білоус О.І. В'язкість рідкого кристалу пентилціанобіфенілу поблизу точки фазового переходу нематик-діелектрична рідина // УФЖ. - 2000. - Т.45, №9. - С. 1067-1069.
12. Плевачук Ю.О., Склярчук В.М., Альохін О.Д., Булавін Л.А. В'язкість розплаву Ca-Pb у ділянці розшарування // Журнал фізичних досліджень. - 2005. - Т.9, №4. - С. 333-336.
13. Plevachuk Y., Sklyarchuk V., Alekhin A., Bulavin L. Liquid-liquid phase equilibrium in ternary immiscible In-Ge-Te melts // Journal of Molecular Liquids. - 2006. - V.127. - P.33-36.

Надійшло до редакції 21.06.07

УДК 512

Гаврюшенко Д.А., канд. фіз.-мат наук, доцент

Просторовий розподіл концентрації компонентів бінарного розчину в зовнішньому полі

Для розрахунку концентрації бінарної суміші розглянуто гратчасту модель рідини. Побудовано розклад концентрації бінарної суміші у функціональний ряд Тейлора за потенціалом зовнішнього поля, внаслідок чого було отримано розклад за 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]:

$$\mu(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}), \quad (1)$$

де μ_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

$$\mu(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}) + aV^2n(\vec{r}) \quad (2)$$

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 рідини в широкому окілі зміни термодинамічних параметрів, включаючи критичну точку [4, 5].

D.A. Gavryushenko, Ph.D.

Binary solution component concentration spatial distribution under external field

To calculate concentration profile of a binary solution lattice mode of liquid has been revised. An binary solution concentration has been expanded into functional series on external field potential. Expansion on correlation functions of any order has been obtained in the result.

Key words: liquid lattice model, nonuniform system, critical point, correlation function.

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

$$\mu(\vec{r}) = \mu_0 - \mu(\vec{r}) + \Delta\mu_{cor}(\vec{r}), \quad (3)$$

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 гратки, причому загальне число частинок N співпадає з кількістю вузлів гратки N' :

$$N = N' = N_A + N_B \quad (4)$$

Очевидно, що відсутність незайнятих вузлів гратки (тобто відсутність «третього компоненту розчину», тобто незайнятих частинками вузлів гратки – 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, 9], що має місце, зокрема,

для рідини в наноб'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:

$$H = H_0 + \sum_i u_{BA}^i x_i, \quad (7)$$

$$\text{де } H_0 = H_0' + \sum_{i=1}^M N_i u_{BA}^i = \frac{u_B - u_A}{N_i}.$$

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

$$H = H_0 + \sum_i u_{BA}^i x_i, \quad (8)$$

$$\text{де } u_{BA}^i = \frac{u_B - u_A}{N_i}, \quad N_i = N \frac{2L}{l} = \text{const.} \quad \text{Для}$$

подальшого опису системи по аналогії з теорією рідин введемо кореляційну функцію s -го порядку «концентрація-концентрація» у відповідних шарах розчину з урахуванням δ -подібних особливостей $F_s(z, z_1, z_2, \dots, z_{s-1})$:

$$F_s(z, z_1, \dots, z_{s-1}) = \frac{\delta^{s-1} x(z)}{\delta(\beta u_{BA}(z_1)) \dots \delta(\beta u_{BA}(z_{s-1}))} \Big|_{\beta u_{BA}(z_1) = \beta u_{BA}(z_2) = \dots = \beta u_{BA}(z_{s-1}) = 0} \quad (9)$$

$$\text{де } \beta = 1/kT.$$

Як було зазначено у [6,7], розклад потенціалу зовнішнього поля в ряд за густиною призводить

до необхідності розв'язувати диференціальне рівняння, яке в загальному випадку є нелінійним, і в силу деяких його особливостей побудова розв'язку становить дуже складну задачу. Аналогічна ситуація має місце і у випадку знаходження просторового розподілу концентрацій двокомпонентної суміші. Тому, розглядаючи фізично нескінченно тонкі шари як математично нескінченно малі, розв'яжемо обернену задачу: розкладемо концентрацію розчину $x(z)$ у функціональний ряд Тейлора за величиною $\beta u_{BA}(z)$ [7]:

$$x(z) - x = \int_{-l}^l dz_1 \frac{\delta x(z)}{\delta \beta u_{BA}(z_1)} \Big|_{\beta u_{BA}(z_1) = 0} \beta u_{BA}(z_1) + \frac{1}{2!} \int_{-l}^l dz_1 \int_{-l}^l dz_2 \frac{\delta^2 x(z)}{\delta \beta u_{BA}(z_1) \delta \beta u_{BA}(z_2)} \Big|_{\beta u_{BA}(z_1) = 0} \times \beta u_{BA}(z_1) \beta u_{BA}(z_2) + \dots \quad (10)$$

Ряд (10) збігається завдяки обмеженості інтегралу $\int_{-l}^l dz |\beta u(z)|$ [10].

Записавши для зовнішнього потенціалу формальний вираз

$$\beta u_{BA}(z_1) = \beta u_{BA}(z) + [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)], \quad (11)$$

і підставивши його у формулу (10), з урахуванням виразу (9) отримаємо

$$x(z) - x = \beta u_{BA}(z) \int_{-l}^l dz_1 F_2(z, z_1) + \int_{-l}^l dz_1 F_2(z, z_1) [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)] + \frac{1}{2!} [\beta u_{BA}(z)]^2 \int_{-l}^l dz_1 \int_{-l}^l dz_2 \int_{-l}^l dz_3 F_3(z, z_1, z_2) F_3(z, z_1, z_2) + \beta u(z) \int_{-l}^l dz_1 \int_{-l}^l dz_2 F_3(z, z_1, z_2) \times [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)] + \frac{1}{2!} \int_{-l}^l dz_1 \int_{-l}^l dz_2 F_3(z, z_1, z_2) [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)] \times [\beta u_{BA}(z_2) - \beta u_{BA}(z)]. \quad (12)$$

Часткове сумування у цьому виразі доданків, що містять лише нульові моменти кореляційних функцій $F_s(z, z_1, \dots, z_{s-1})$ (як це було зроблено для густини рідини в [7]), призводить до

локального наближення для концентрації бінарного розчину:

$$x_{loc}(z) = x(\mu(z)) - x. \quad (13)$$

Доданки, що залишились, описують кореляційний внесок у профіль концентрації $x_{cor}(z)$:

$$\begin{aligned} \Delta x_{cor}(z) = & \int_{-L}^L dz_1 F_2(z, z_1) [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)] + \\ & + \beta u(z) \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 F_3(z, z_1, z_2) \times \\ & \times [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)] + \\ & + \frac{1}{2!} \int_{-L}^L dz_1 \int_{-L}^L dz_2 F_3(z, z_1, z_2) [\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)] \times \\ & \times [\beta u_{BA}(z_2) - \beta u_{BA}(z)] + \dots \end{aligned} \quad (14)$$

Таким чином, вираз (12) можна записати у вигляді

$$x(z) = x_{loc}(z) + x_{cor}(z). \quad (15)$$

Легко бачити, що урахування у виразі (15) лише локального доданку $x_{loc}(z)$ можливо лише у випадку, коли зміна зовнішнього поля $\beta u_{BA}(z_1) - \beta u_{BA}(z)$ на відстанях порядку "дії" приведеної кореляційної функції $F_s(z, z_1, \dots, z_{s-1})$ мала – тобто коли система знаходиться далеко від критичних точок (приведені кореляційні функції короткодійні), і градієнти зовнішнього поля малі. При наближенні до критичної точки навіть таке слабе плавне зовнішнє поле, яким є гравітаційне, призводить до того, що його зміна на відстанях порядку радіуса кореляції ξ стає досить великою, і для розрахунку профілів густини необхідно враховувати наявність кореляційних доданків (14).

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.
9. Tobochnik J., Chapin Ph.M. Monte Carlo simulation of hard spheres near random closest packing using spherical boundary conditions // *J.Chem.Phys.*, 88 (9) – P.5824–5830.
10. Леви П. Конкретные проблемы функционального анализа: Пер. с фр. – М.: Наука, 1967, – 510 с.

Надійшла до редколегії 01.03.07

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

УДК 520.17

Держипольська¹ Л.А., студентка,
Гнатовський² О.В., к.ф.-м.н.,
Удалов³ С.П., к.ф.-м.н.

Моделювання роботи цифрового голографічного корелятора за умови фазових перешкод в робочому пучку

Вивчається вплив нестационарних фазових перешкод на якість інтерферограм в оптичному тракті цифрового голографічного корелятора. Моделювалися фазові перешкоди з різними статистичними розподілами і їх вплив на контрастність інтерференційної картини. Для експериментальної перевірки розрахунків застосовувалась модифікована схема голографічного інтерферометра на базі регулярного світловодного джгути.

Ключові слова: цифрове моделювання, голографічний корелятор, фазові перешкоди, світловодний джгут.

L.A. Derzhypolska¹, student,
O.V. Gnatovskyi², Ph.D. of phys. & Math.,
E.P. Udalov³, Ph.D. of phys. & Math.

Modeling work of the digital holographic correlator under conditions of phase distortions in working beam

Studied was the effect of non-stationary phase distortions in the optical part of digital holographic correlator to the quality of the interferogram. Influence on contrast of the interference pattern the phase distortions with various statistical distributions simulated have been investigated. The modified scheme of holographic interferometer with regular lightguide bundle was used for the experimental verification of calculations.

Key Words: computational modeling, holographic correlator phase distortions, lightguide bundle.

¹E-mail: luda@iop.kiev.ua

WWW: www.phys.univ.kiev.ua/ua/derzhypolska.html

²E-mail: m_a_gnat@mail.ru

³E-mail: udalov@univ.kiev.ua

WWW: <http://www.mechmat.univ.kiev.ua/ua/udalov.html>

Пропоновані дослідження орієнтовані на використання лазерних пучків із складною і нестационарною формою хвильового фронту, а також зі змінними фронтами внаслідок просторової модуляції в оптичному тракті корелятора чи інтерферометра.

Спираючись на статистичний підхід, розвинутий в [1], а також розглядаючи інтерферометр як спеціалізований корелятор, який подає інформацію як згортку чистої інтерференційної картини з кроскореляційним розподілом реальних полів, стає зрозуміло, що вирішення задачі вимірювань з використанням нестационарних складних полів, можливе тільки за умови широкого і продуманого застосування методів апостеріорної обробки зображень. А також чисельного моделювання різноманітних ситуацій, які впливають на фонову частину кроскореляційної функції, а отже і на кінцевий результат експерименту.

Тому актуальним є дослідження цифрового голографічного корелятора, в якому експериментальні дані входять складовими в загальний чисельний алгоритм обробки

зображень, на відміну від того, коли чисельне моделювання призначається тільки як допоміжний засіб. В роботі зроблені спроби окреслити підґрунтя для подальшого застосування корелятора-інтерферометра на прикладі найбільш розповсюджених практичних задач.

1. Теоретичні передумови для голографічної інтерферометрії за наявності фазових збурень.

Чи то в реальному стані, чи то у віртуальному вигляді, в процесі співставлення хвильових фронтів зображень об'єкту в його різних станах лежить передумова про те, що порівнюються реалізації одного і того ж самого хвильового фронту, хоча і при деяких змінах. Тобто "якість" хвильового фронту в процесі дослідження залишається незмінною. Але окрім зміни станів об'єкта, які, власне, і становлять предмет досліджень, можливі і непередбачені його зміни. Наприклад, в просторовій структурі освітлювального лазерного променя, викривлення в схемах передачі зображень.

викривлення в схемах передачі зображень, осідання пилу, тощо. Подібні фактори будуть погіршувати якість інтерференційних смуг, що відображають корисну інформацію, і впливатимуть на точність вимірів.

Розглянемо в загальному вигляді схему формування зображень в голографічному інтерферометрі, за тієї умови що можливе виникнення фазових збурень при їх формуванні. Схема містить об'єкт дослідження C , зображення якого в площину спостереження SC . Перед нею знаходиться голограма. Голографічні зображення при відтворенні голограми формуються також в площині SC , де інтерферують між собою. Під час запису другої голограми можливі непередбачені зміни на поверхні об'єкту, які порушують тотожність зображених об'єктів і тому погіршують якість інтерференційної картини. Конкретний приклад описаної схеми наведений на рис.3.

Отже, запишемо вираз для комплексної амплітуди поля на об'єкті в стані C в момент часу t_0 у вигляді:

$$\tilde{a}_1(x, y) = a_0(x, y) \exp[i\varphi_0(x, y)] \quad (1)$$

де $a_0(x, y)$ і $\varphi_0(x, y)$ початковий розподіл амплітуди і фази поля безпосередньо на об'єкті.

На екрані SC цьому стану відповідає розподіл поля $\tilde{a}'_1$ в зображенні:

$$\tilde{a}'_1(x', y') = a'_1(x', y') \exp\{i[\varphi(x', y') + \psi_1(x', y')]\} \quad (2)$$

де розподіл $\psi_1(x', y')$ враховує зміни фази поля $\tilde{a}_1(x', y')$, набуті завдяки збуренню фази на поверхні об'єкту.

Для другого зображення при зміні форми поверхні C' в момент t_1 отримаємо комплексну амплітуду поля:

$$\tilde{a}'_2(x', y') = a'_2(x', y') \exp\{i[\varphi(x', y') + \psi_2(x', y') + \alpha(x', y')]\} \quad (3)$$

де виразом $\alpha(x', y')$ позначено досліджувану зміну хвильового фронту об'єкту яка несе корисну інформацію (від поверхні C до поверхні C'), а розподіл фази $\psi_2(x', y')$ відповідає збуренням фази під час формування другого зображення.

Надалі доцільно спростити форму запису полів, і не нагадувати про залежність відповідних

полів від поперечних координат чи послідовності їх запису.

Інтерферограма утворюється при взаємодії двох світлових полів з відмінними амплітудами та фазами коливань поля:

$$\tilde{a}_\Sigma = \tilde{a}_1 + \sqrt{n} \tilde{a}_2, \quad (4)$$

де враховано, що інтенсивності зображень I_1 та I_2 можуть відрізнятися в n разів, тобто $I_1 = n I_2$; $I_1 = |\tilde{a}_1|^2$; $I_2 = |\tilde{a}_2|^2$.

Інтенсивність інтерференційної картини визначається виразом:

$$I_\Sigma = |\tilde{a}_1 + \sqrt{n} \tilde{a}_2|^2 = (1+n) a_1^2 [1 + \gamma \cos(\alpha + \psi)] \quad (5)$$

де позначено: $\gamma = \frac{2\sqrt{n}}{1+n}$; $\psi = \psi_2 - \psi_1$.

З (5) випливає, що просторовий розподіл інтенсивності в інтерференційній картині залежить від декількох параметрів: n (або γ) - що визначає енергію інтерферуючих пучків; ψ - який описує просторовий розподіл фази неконтрольованих збурень та α - який визначає зміну поверхні досліджуваного об'єкту.

При відсутності нестационарного збурюючого середовища, коли $\psi=0$, вираз (5) набуває загальновідомого вигляду [2,3].

$$I_\Sigma = (1+n) a_1^2 [1 + \gamma \cos \alpha],$$

$$\text{або ж } I_\Sigma = (I_1 + I_2) \left(1 + \frac{\sqrt{I_1 I_2}}{I_1 + I_2} \cos \alpha \right) \quad (5a)$$

Фактор інтенсивності впливає на важливий параметр - контрастність інтерференційної картини V , який визначається значеннями інтенсивності поля в максимумах та мінімумах розподілу інтерференційної картини [2].

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} \quad (6)$$

Врахуємо, що значення $I_{\max}$ та $I_{\min}$ будуть визначатися виразом (5a) за умови, відповідно, $\cos \alpha = +1$ та $\cos \alpha = -1$, і отримаємо [2,3].

$$V = \frac{(n+1) a^2 [1 + \gamma] - (n+1) a^2 [1 - \gamma]}{(n+1) a^2 [1 + \gamma] + (n+1) a^2 [1 - \gamma]} = \gamma \quad (7)$$

2. Вплив статистичних характеристик розсіювачів на контрастність інтерференційної картини.

Проаналізуємо ситуацію, коли в процесі вимірювань відбуваються непередбачені збурення хвильового фронту зображень. Будемо вважати, що інтенсивності полів голографічних зображень, які утворюють інтерферограму, однакові, а в процесі дослідів відбувається лінійне збільшення фази поля в зображенні об'єкта C , тобто $\alpha(x', y') = \alpha x$.

У такому випадку маємо:

$$\begin{aligned} &(\psi_1 \neq \psi_2, \psi \neq 0) \\ \Rightarrow 1 - [1 + \cos(\alpha x' - \psi)] &= 1 + I_{\psi} \end{aligned} \quad (8)$$

Оскільки ψ – це випадкова величина, то $\cos(\alpha x' - \psi)$ має різне значення при однакових значеннях $\alpha x'$ в різних точках інтерференційної картини. Тому, щоб отримати максимальне і мінімальне значення інтенсивності інтерференційної картини, потрібно усереднити I_{ψ} по всіх значеннях ψ по цих точках.

$$I_{\psi} = M \cos(\alpha x' - \psi) \quad (9)$$

де $M \cos(\alpha x' - \psi)$ – математичне очікування $\cos(\alpha x' - \psi)$.

Щоб знайти математичне очікування $\cos(\alpha x' - \psi)$, яке визначається за формулою [4].

$$\begin{aligned} M \cos(\alpha x' - \psi) &= \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\psi) \exp[i(\alpha x' - \psi)] d\psi = \\ &= \text{Re} \left[\exp[i\alpha x'] \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\psi) \exp[-i\psi] d\psi \right] \end{aligned} \quad (10)$$

потрібно знати функцію розподілу $\rho(\psi)$. Тому варто приділити увагу різним статистичним розподілам збурень на поверхні об'єкту.

2.1. Розподіл Гауса.

Припустимо, що величина ψ може бути розподілена *нормально* (тобто за розподілом Гауса). Зробимо позначення: $M\psi = 0$ – середнє значення випадкової величини (оскільки $M\psi$ –

сталий зсув фази по всьому полю і не змінює контрастності смуг, тому ми його вважаємо рівним нулю), та $\sigma^2 = M\psi^2$ – квадратична дисперсія. Тоді розподіл Гауса відповідно до [4] можна записати так:

$$\rho(\psi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\psi^2}{2\sigma^2}\right] \quad (11)$$

Підставивши отриману формулу (11) в (10) та згідно [5] запишемо

$$\begin{aligned} M \cos(\alpha x' - \psi) &= \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \text{Re} \left[\exp[i\alpha x'] \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\psi^2}{2\sigma^2}\right] \exp[-i\psi] d\psi \right] = \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \text{Re} \left[\exp[i\alpha x'] \sigma\sqrt{2\pi} \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] \right] = \\ &= \cos(\alpha x') \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] \end{aligned} \quad (12)$$

Тепер можна записати вираз для контрастності інтерференційної картини, порахувавши її за формулою (6):

$$\begin{aligned} I_{\max}(\cos \alpha x' = 1) &= 1 + \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] \\ I_{\min}(\cos \alpha x' = -1) &= 1 - \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] \\ V &= \frac{1 + \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] - 1 - \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right]}{1 + \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] + 1 - \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right]} = \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогічний результат для розподілу Гауса був отриманий в [6], але на підставі інших передумов.

Графік контрастності інтерференційних смуг в залежності від величини середньоквадратичної дисперсії фазових шумів, який побудований згідно виразу (13), приведений у лівій частині рис.1. В його правій частині показаний вигляд інтерференційних смуг, які були змодельовані на ЕОМ для декількох точок графіка. Видно, що поява фазових шумів в досить широких межах не перешкоджає спостереженню і інтерпретації смуг.

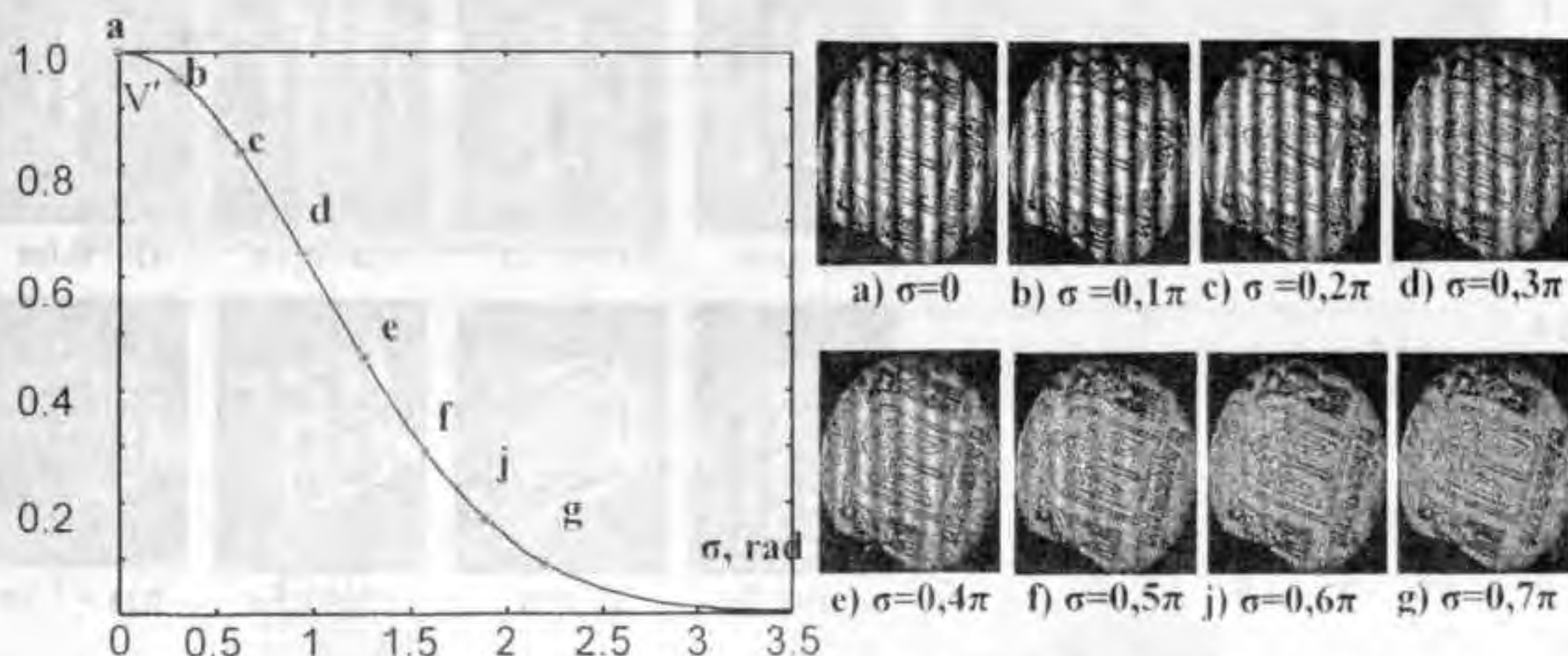


Рис.1-Графік залежності $V'(\sigma)$ і відповідні інтерферограми для різних σ

2.2. Рівномірний розподіл.

Наступним з статистичних розподілів, які цікаво розглянути є *рівномірний (прямокутний)* розподіл. Аналогічно до випадку нормального розподілу покладемо, що $M\psi=0$ – середнє значення випадкової величини. З урахуванням цього і відповідно до [4] функція рівномірного розподілу матиме вигляд:

$$\rho(\psi) = \begin{cases} \psi > a \Rightarrow \rho(\psi) = 0 \\ \psi < a \Rightarrow \rho(\psi) = \frac{1}{2a} \end{cases} \quad (14)$$

де a – півширина діапазону.

Підставимо (14) в (10) і запишемо вираз для математичного очікування в цьому випадку:

$$\begin{aligned} M \cos(\alpha x' - \psi) &= \\ &= \text{Re} \left[\exp[i\alpha x'] \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \exp[-i\psi] d\psi \right] = \\ &= \text{Re} \left[\exp[i\alpha x'] \frac{2 \sin(a)}{2a} \right] = \cos(\alpha x') \text{sinc}(a) \end{aligned} \quad (15)$$

Тепер знайдемо максимальне і мінімальне значення інтенсивності інтерференційної картини. З формули (15), як і в нормальному розподілі, видно, що максимальне значення матимемо, коли $\cos(\alpha x') = +1$, а мінімальне, коли $\cos(\alpha x') = -1$, тоді можна записати

контрастність інтерференційної картини, порахувавши її за формулою (6):

$$\begin{aligned} I_{\max}(\cos(\alpha x')=1) &= 1 + \text{sinc}(a) \\ I_{\min}(\cos(\alpha x')=-1) &= 1 - \text{sinc}(a) \\ \Rightarrow V &= \frac{1 + \text{sinc}(a) - 1 - \text{sinc}(a)}{1 + \text{sinc}(a) + 1 - \text{sinc}(a)} = \text{sinc}(a) \end{aligned} \quad (16)$$

Графік контрастності інтерференційних смуг в залежності від величини півширини діапазону можливих збурень, який був побудований згідно (16), наводиться у лівій частині рис.2. В правій частині рисунку показаний вигляд інтерференційних смуг, які змодельовані на EOM для декількох точок графіка.

В обох випадках (рис.1 та рис.2) розрахунки інтерференційних картин проводились в математичному пакеті MatLab. Реальне зображення об'єкта (цифрова фотографія монетки) представлялось у вигляді матриці чисел і всі подальші операції проводились із отриманою матрицею.

На наступному етапі розрахунків синтезувалось друге зображення (тобто відповідна йому матриця чисел), що в числовому експерименті відповідає другій експозиції. Для цього до матриці зображення об'єкта додається матриця чисел, яка відповідає досліджуваному повороту об'єкта в реальному експерименті.

Одночасно також додається матриця чисел, яка в реальному експерименті відповідає

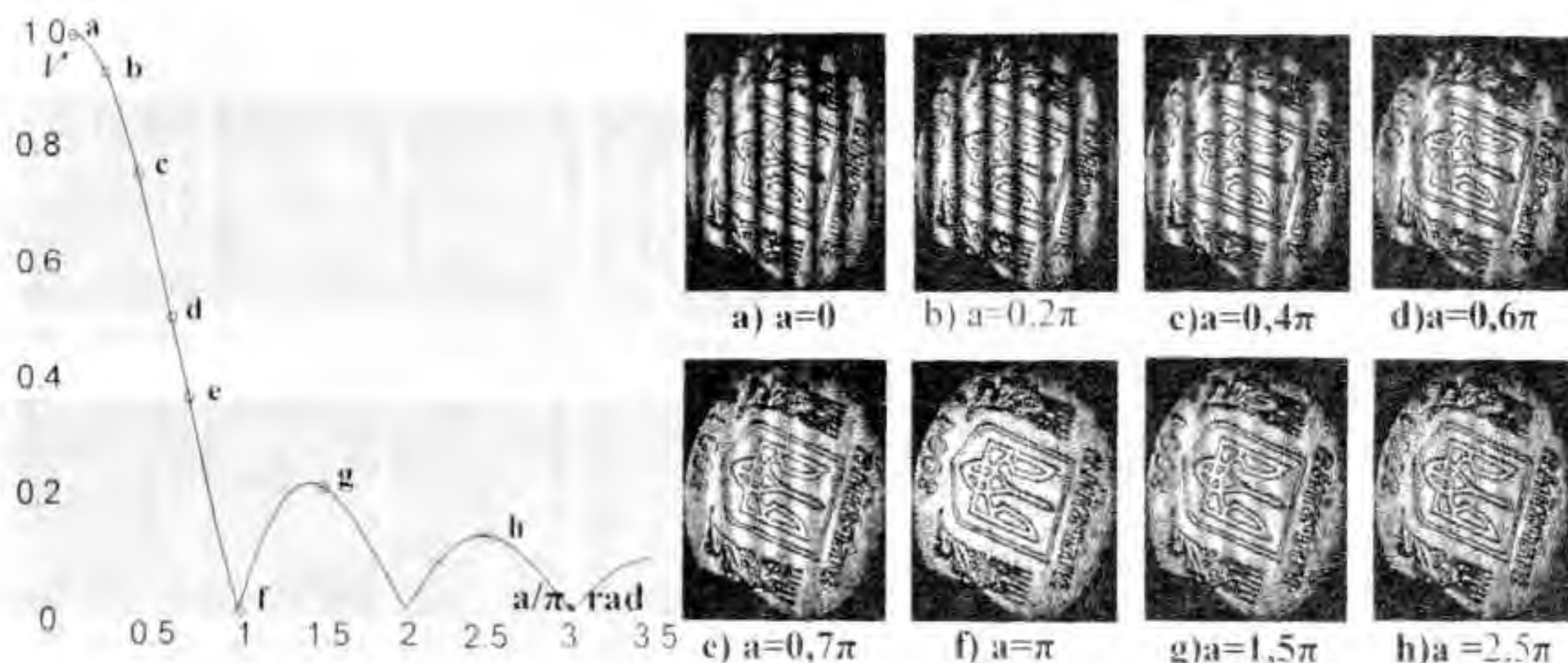


Рис.2 - Графік залежності $I'(a)$ і відповідні інтерферограми для різних значень a

випадковому набігу фази. На останньому етапі розрахунку було отримано інтерферограми об'єкта, які зображені на рис.1 та рис.2. Для цього згідно формули (5) використовувались матриця реального зображення об'єкту (перша експозиція) та матриці синтезованого зображення об'єкта для другої експозиції.

Експериментальна частина.

Експериментально досліджувався вплив фазових збурень у світловодному джгуті при передачі зображення, а також фазовий шум стандартизованих еталонів шорсткості.

Загальна схема голографічного інтерферометра з світловодним багатомодовим джгутом (призначеним для дистанційного знімання оптичної інформації), наведена на рис.3. Лазерний пучок L розширюється телескопом T , і освітлює об'єкт C (монетку). Частина енергії, відбирається для формування опорного пучка (скельце Sp_1 і дзеркало M_2). Відбите від об'єкта світло об'єктивом O_1 проєктується на вхідний торць джгута B . Його довжина становила 50 см, при вхідній і вихідній апертурах 10 мм. Зображення об'єкта з вихідного торця джгута об'єктивом O_2 проєктується на екран Sc . Светлочутливе середовище голограми H розміщується між O_2 і Sc . На вхідний торць джгута зображення об'єкта проєктувалось з невеликим зменшенням. З вихідного торця

зображення об'єкта перекидалось в площину, близьку до площини розміщення голограми.

Ми перевіряли використання схеми за умови деформації джгута між моментами запису

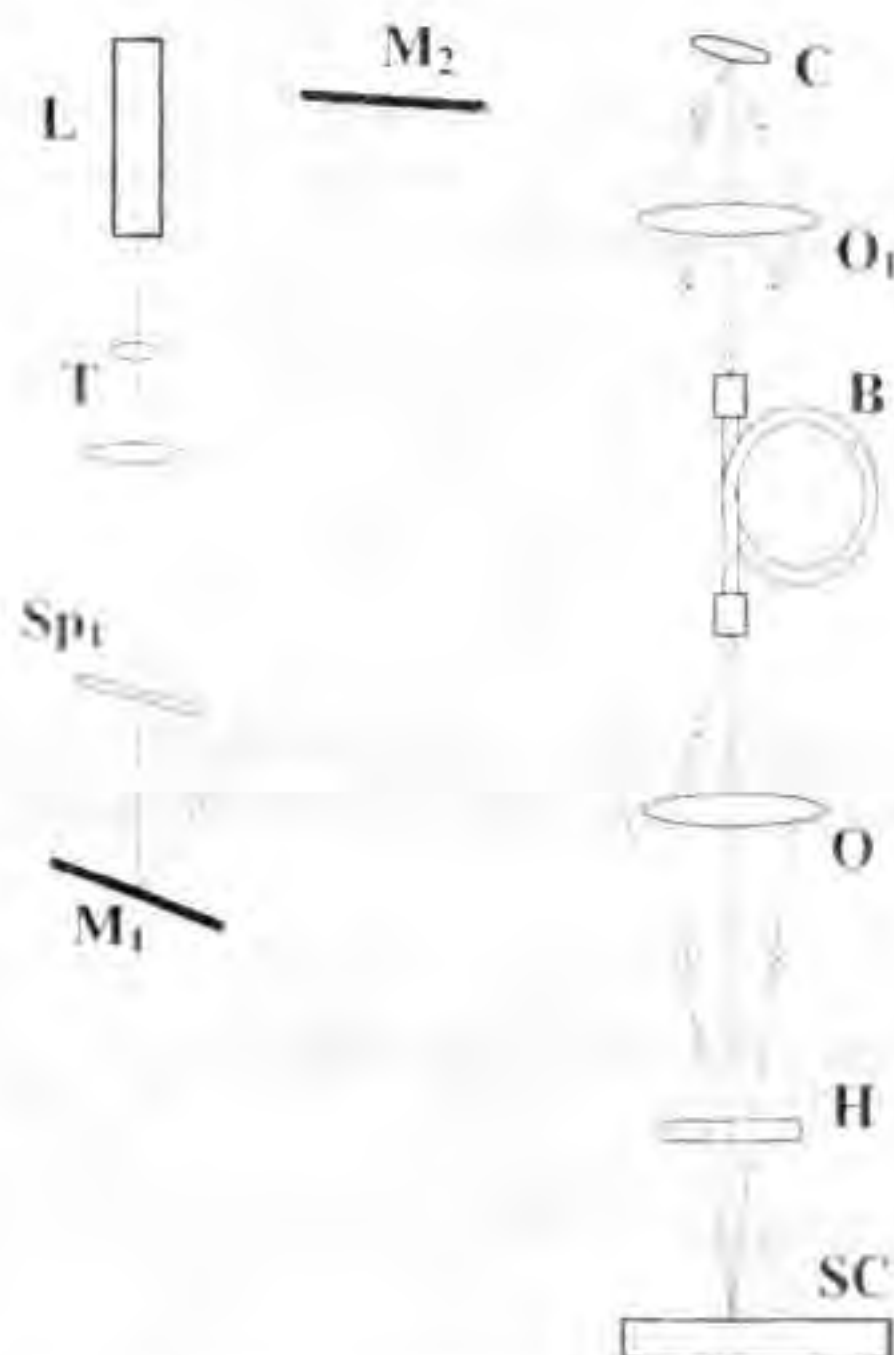


Рис.3 - Схема голографічного інтерферометра на базі світловодного джгута.

голограм об'єкта в двох станах. У другому стані, по аналогії з теоретичними оцінками, об'єкт повертався на невеликий кут α . Оскільки вхідний

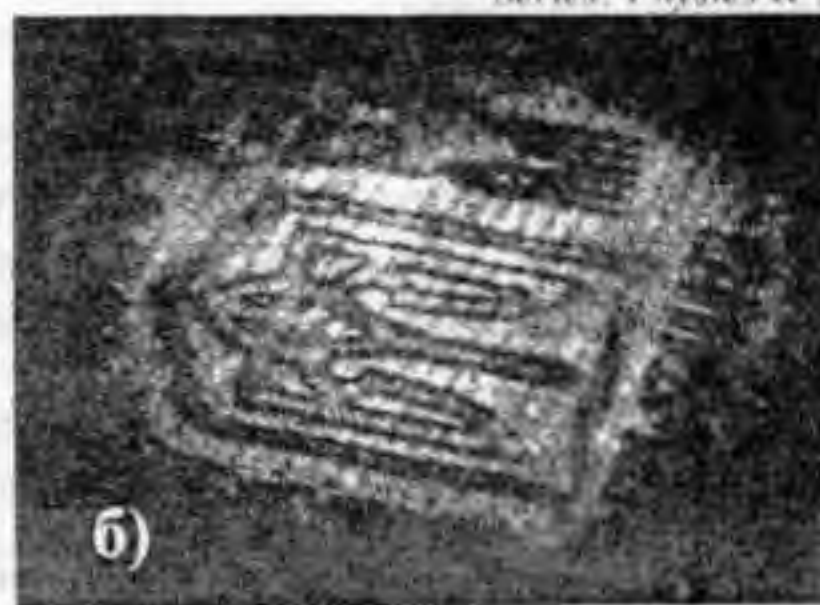


Рис.4- а) Інтерферограма об'єкта без збурень джгута та б) з легко збуреним джгутом і, відповідно, графіки нормалізованої інтенсивності усередненої вздовж інтерференційних смуг картини.

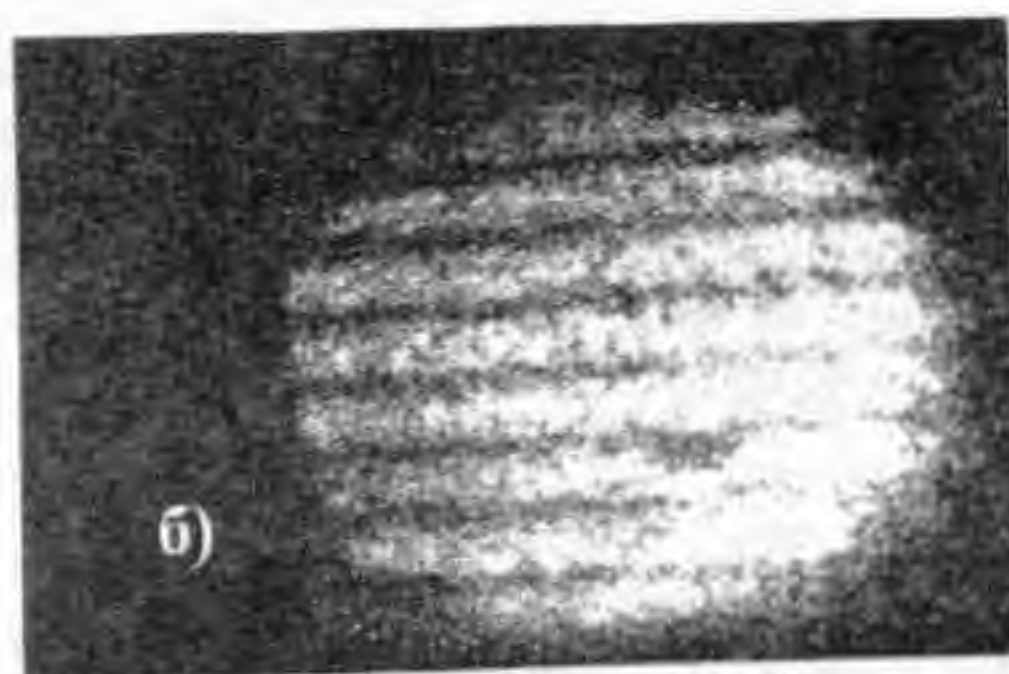
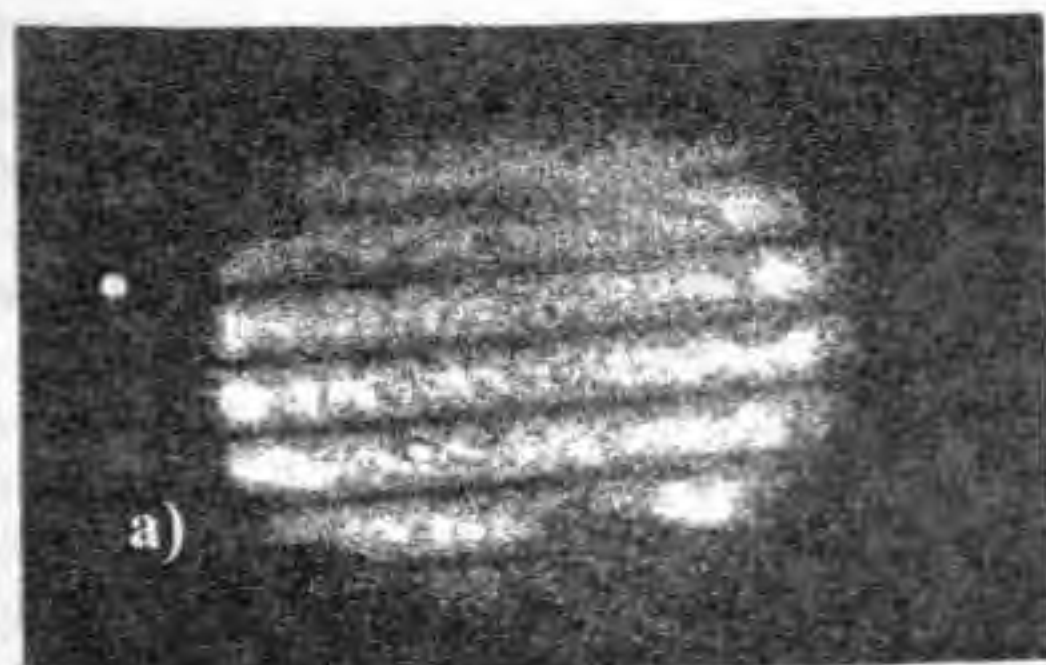
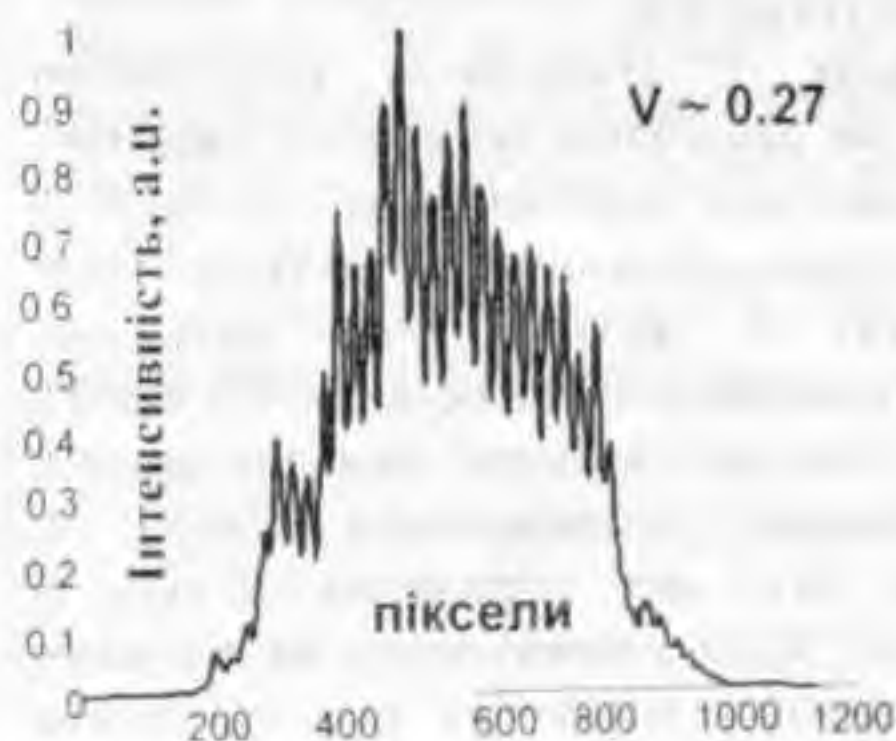
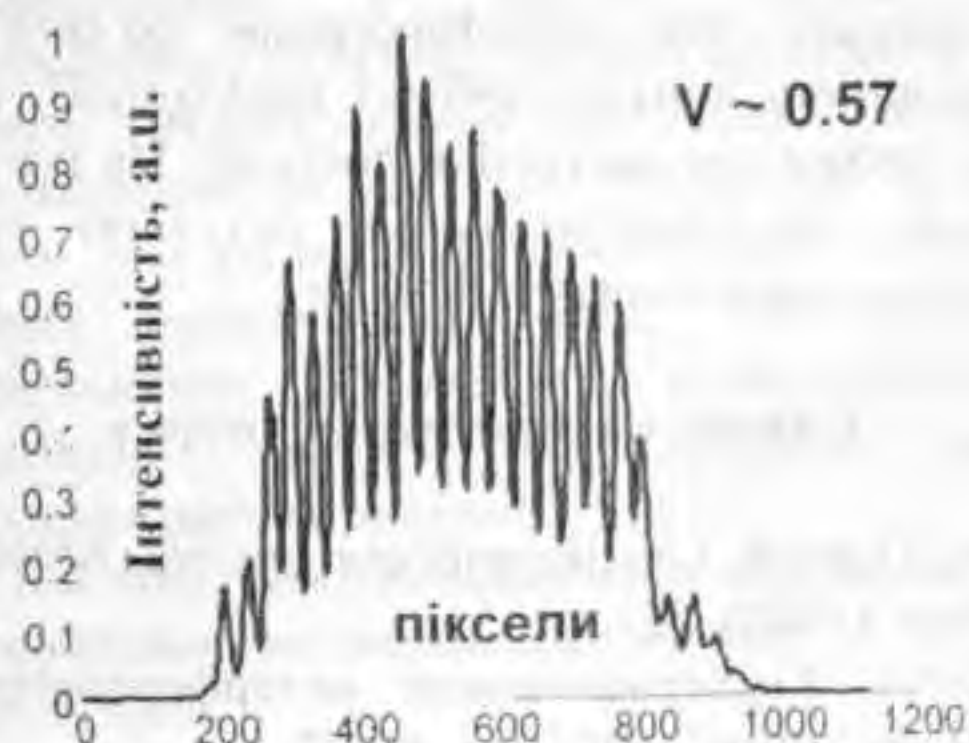
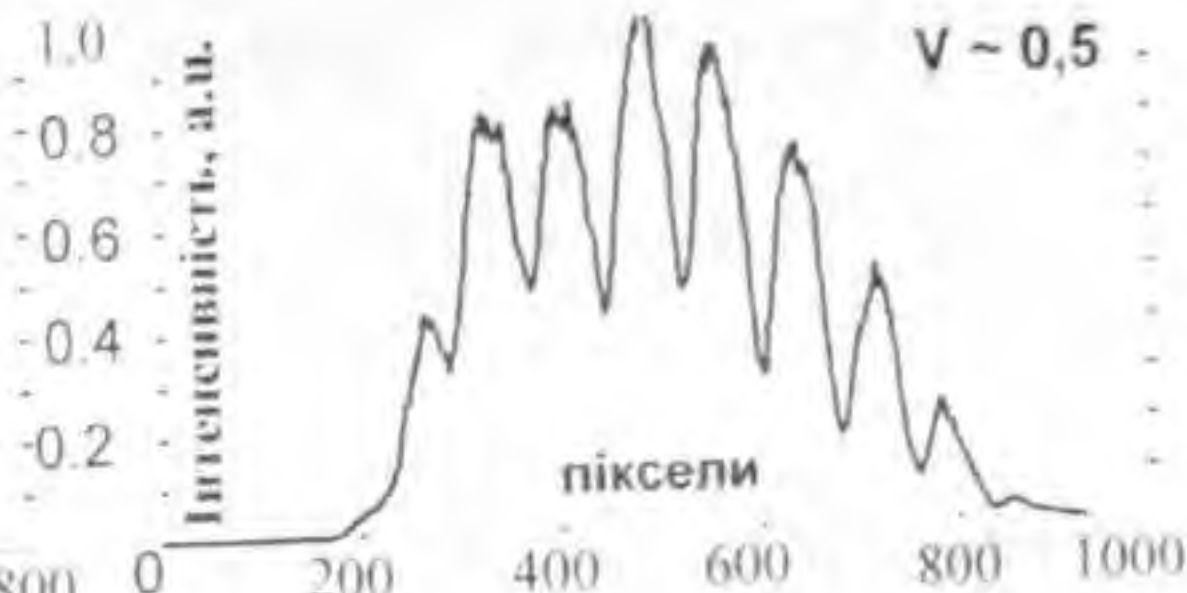
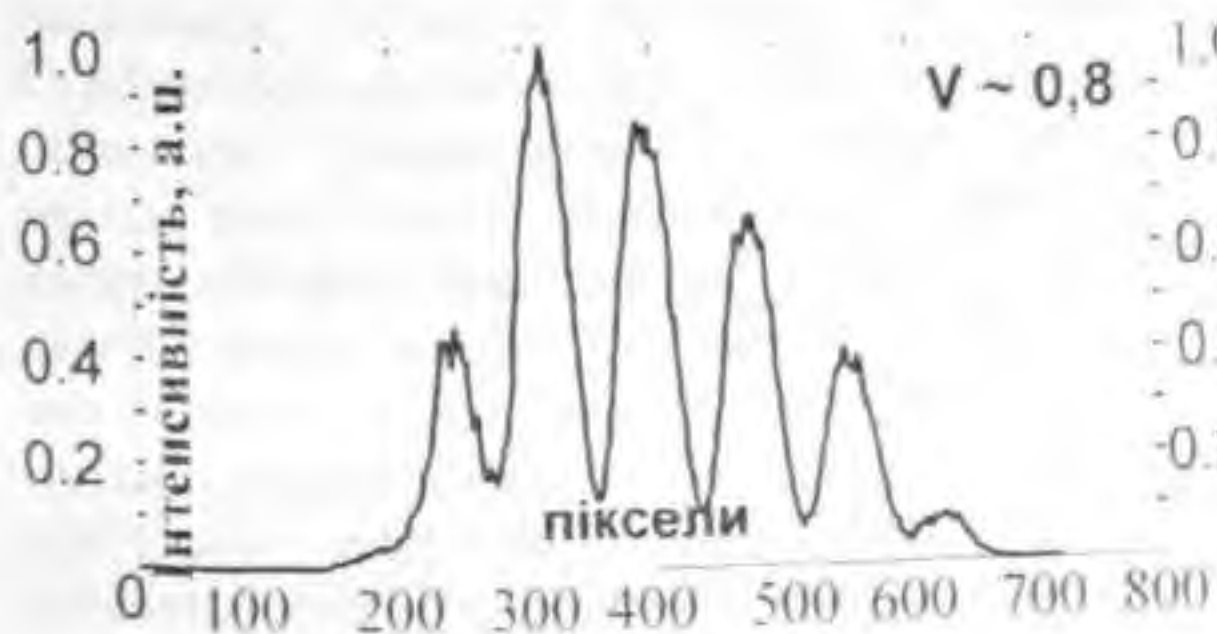


Рис.5- а) Інтерферограма об'єкта (стаціонарний випадок) та б) з фазовим шумом і, відповідно, графіки нормалізованої інтенсивності усередненої вздовж інтерференційних смуг картини.



і вихідний торці джгута жорстко закріплювались в тримачах, то роль «генератора» фазових збурень виконували випадкові набіги фази в окремих волокнах при переміщеннях середини джгута. Стріла прогину джгута досягала 7см. При більших деформаціях смуги візуально не спостерігались.

На рис.4а, як приклад, наведена фотографія і вимірний розподіл енергії для інтерферограми об'єкта при стаціонарному стані джгута, без його збурень, які слугують паспортом для настройки системи. На рис.4б результати у випадку згинання джгута на 2см.

В дослідях з еталонними пластинками шорсткості ми намагались перевірити наскільки добре узгоджується запропонована математична теорія з експериментальними результатами. При цьому об'єкт С являв собою дзеркальну пластинку з каліброваною шорсткістю (13 клас) і, відповідно, стандартизованим фазовим шумом. Використовувався інтерферометр РнеЗ, за відмінністю того, що зображення об'єкту С безпосередньо було спроектовано на площину екрана. Дзеркальна пластинка між моментами запису голограм об'єкта в двох порівняльних станах, зсувалася у своїй площині. У другому стані об'єкт також повертався на невеликий кут α .

При відомому середньоарифметичному відхиленні R_x абсолютної величини для певного класу зразків (R_x для 13 класу становить 0,16рад [7]), і припущенні про Гаусів розподіл, ми (аналогічно до вище наведеної теорії) можемо виразити σ через R_x .

За означенням [4] $R_x = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi| \rho(\psi) d\psi$,

де $\rho(\psi)$ – функція розподілу, яка визначається формулою (11). З урахуванням сказаного можна записати:

$$\begin{aligned} R_x &= \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi| \exp\left[-\frac{\psi^2}{2\sigma^2}\right] d\psi = \\ &= \frac{2}{\sigma \sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \psi \exp\left[-\frac{\psi^2}{2\sigma^2}\right] d\psi = \\ &= \left[\frac{\psi^2}{2\sigma^2} = x \right] \frac{\sqrt{2}\sigma}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp[-x] dx = \end{aligned}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sigma (1 - 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sigma \Rightarrow \sigma = \sqrt{\frac{\pi}{2}} R_x \quad (17)$$

При цьому фазовий шум між двома експозиціями (при зсуві об'єкта) буде рівний $\sigma_z = 2\sigma$ [4]. Тому для об'єкта 13 класу шорсткості поверхні маємо теоретичне значення дисперсії $\sigma_z = 0,2\pi$ і, відповідно, теоретичне значення контрастності інтерференційної картини (з рис.4) рівне $V' = 0,8$.

На рис.5а подано фотографія і розподіл інтенсивності для інтерферограми об'єкта у стаціонарному випадку (об'єкт нерухомий), яка слугує паспортом настройки системи. На рис.5б наведено експериментальний результат для нестационарного випадку ($\sigma_z = 0,2\pi$).

Список використаних джерел

1. Дж. Гудмен, Статистическая оптика, Москва "Мир" (1988), 527 ст.
2. Ч.Вест, Голографическая интерферометрия, Москва "Мир" (1982), ст. 69-77.
3. Кольер Р., Беркхарт К., Лип Л. Оптическая голография, Москва, "Мир", (1973), ст.472-509.
4. Г.Корн, Т.Корн, Справочник по математике, ст. 831, М., "Наука" (1978), 832ст.
5. L.A. Derzhypolska, O.V.Gnatovskij, Holographic interferometry under phase distortions // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics, №3 (2006), pp56-59
6. В.П.Рябухо, А.А.Чауский, И.Ф.Терентьева. Лазерная интерферометрия случайно неоднородных объектов. Материалы 24 Всесоюзной школы по голографии, Л-д, стр. 26, 1996.
7. Шорсткість поверхні, ГОСТ 2.309-73.

Надійшла до редакції 04.04.2007

УДК 536.521

Зеленський С.Є., канд.фіз.-мат.наук, доцент,
Колесник О.С., інженер, Копишинський О.В.,
канд.фіз.-мат.наук, асистент

Простий оптичний метод оцінки температури за кривою загасання світіння

Запропоновано новий оптичний метод оцінки температури в процесі охолодження розжареного об'єкта. Метод ґрунтується на аналізі форми кривої загасання теплового випромінювання на одній фіксованій довжині хвилі. Для розрахунку температури необхідно знати апроксимуючий вираз для швидкості тепловіддачі. Проведено експериментальну перевірку метода на прикладі нитки розжарювання в вакуумі.

Ключові слова: теплове випромінювання, вимірювання температури, оптична пірометрія.

*E-mail: zelec@univ.kiev.ua

Оптичні методи вимірювання температури розжарених об'єктів є добре відомими і мають широку сферу застосування [1-3]. В цій роботі запропоновано ще один оптичний метод, який дозволяє оцінити температуру розжареного тіла за кривою загасання його світіння на фіксованій довжині хвилі. Аналіз форми кривої загасання світіння дозволяє визначити температуру тіла у будь-який момент часу в процесі загасання. Для оцінки температури необхідно знати (з точністю до сталого множника) закон тепловіддачі як функціональну залежність швидкості втрати енергії тіла від його температури. В більшості випадків така залежність з достатньою точністю може бути апроксимована простими виразами, наприклад, законом Ньютона або законом Стефана-Больцмана. Для експериментальної перевірки справедливості запропонованого метода вимірювання температури в цій роботі в якості об'єкта дослідження використовується нитка розжарювання в вакуумі. Основним механізмом природного охолодження тонкої нитки розжарювання в вакуумі є механізм теплового випромінювання, отже кінетика зниження температури такого об'єкта може бути апроксимована законом Стефана-Больцмана.

Розглянемо планківський випромінювач (чорне тіло), яке охолоджується внаслідок втрат

S.E.Zelensky, O.S.Kolesnik, O.V.Kopyshinsky

Simple optical method for estimation of temperature using the emission decay curve

A new optical method is proposed for estimation of temperature during cooling down of an incandescent object. The method is based on the analysis of shape of thermal emission decay curve measured at a fixed wavelength. For calculation of temperature, it is necessary to know the approximate expression for the rate of heat release. The method is tested experimentally with a filament under vacuum.

Key Words: thermal radiation, temperature measurement, optical pyrometry.

енергії на випромінювання. Згідно із законом Стефана-Больцмана можна записати

$$C dT = -\sigma(T^4 - T_0^4) S dt \quad (1)$$

де C – теплоємність тіла, σ – стала Стефана-Больцмана T – температура тіла, T_0 – температура оточуючого середовища, S – площа поверхні тіла. Нехай випромінювання такого об'єкта реєструється фотоприймачем на фіксованій довжині хвилі λ . Позначимо через P потужність теплового випромінювання, зареєстровану фотоприймачем. Залежність цієї потужності від часу $P(t)$ будемо називати кривою загасання світіння. Для характеристики форми кривої загасання світіння застосуємо наступну логарифмічну похідну

$$D = \frac{dP/P}{dt} = \frac{dP/P}{dT/T} \cdot \frac{dT/T}{dt} = \gamma_1 \frac{dT/T}{dt} \quad (2)$$

Очевидно, що похідна D є функцією часу $D(t)$.

Диференційний параметр γ_1 , який з'явився у виразі (2), може бути розрахований з використанням формули Планка для теплового випромінювання абсолютно чорного тіла

$$\gamma_i = \frac{C_2 \cdot \lambda T}{1 - \exp(-C_2 / \lambda T)} \approx \frac{C_2}{\lambda T} \quad (3)$$

де $C_2 = hc/k$ – пірометрична стала, h – стала Планка, c – швидкість світла, k – стала Больцмана. Наближене значення в (3) відповідає переходу від формули Планка до формули Віна. В тому ж наближенні криву загасання світіння можна представити наступним виразом

$$P(t) = \text{Const} \cdot \exp(-C_2 / \lambda T(t)) \quad (4)$$

Розглянемо два моменти часу t_1 і t_2 в межах кривої загасання світіння. Прийнемо наближення $T_1 \gg T_0$. До виразу (2) підставимо $(dT/dt)T^{-1}$ з виразу (1) і γ_i з виразу (3). Тоді з (2) і (4) отримаємо наступні співвідношення для температури тіла

$$\begin{cases} T(t_1) = \frac{C_2}{\lambda} \frac{\sqrt{D(t_1) \cdot D(t_2)} - 1}{\ln[P(t_1) / P(t_2)]} \\ T(t_2) = T(t_1) \sqrt{D(t_2) / D(t_1)} \end{cases} \quad (5)$$

Таким чином, на основі чотирьох експериментальних значень $P(t_1)$, $P(t_2)$, $D(t_1)$, $D(t_2)$, можна оцінити температуру об'єкта в моменти часу t_1 і t_2 . Інтервал часу $(t_1 - t_2)$ необхідно вибирати так, щоб відношення $D(t_1)/D(t_2)$ помітно відрізнялось від одиниці, оскільки саме ця обставина суттєво впливає на точність оцінки температури.

Для експериментальної перевірки запропонованого метода проводились виміри з використанням розташованої в вакуумі довгої тонкої металевої нитки, яка розжарювалася електричним струмом. В експериментах використовувався ниткоподібний катод прямого розжарювання вакуумного діода ІЦІС з видаленим оксидним покриттям. Нитка розжарювання підключалася до стабілізованого джерела напруги через транзисторний комутатор, який було синхронізовано з цифровим осцилографом. Теплове випромінювання центральної частини нитки розміром приблизно 0,2 мм направлялося на вхідну щілину монохроматора МДР-12 і реєструвалося фотопомножувачем ФЕП-79 на довжині хвилі 670 нм. Для контролю температури нитки в стаціонарному режимі використовувався візуальний оптичний пірометр ЛЮП-72.

В першу чергу необхідно перевірити, що для центральної ділянки нитки розжарювання основним механізмом тепловіддачі є механізм теплового випромінювання. З роботи [4] випливає,

що в режимі стаціонарного світіння тепловіддача досліджуваної ділянки нитки описується законом Стефана-Больцмана. Але у випадку охолодження нитки цей висновок потребує додаткового обґрунтування, оскільки не можна апіорі виключити можливість зміни режиму тепловіддачі в процесі охолодження нитки.

Для перевірки справедливості припущення про основний механізм тепловіддачі центральної частини нитки розжарювання можна скористатися наступними міркуваннями. Оскільки крива загасання світіння описується виразом (4), то на основі пірометричних вимірів температури досліджуваної ділянки нитки в момент початку загасання ($t = 0$) за експериментальними даними $P(t)$ (рис.1, крива 1) можна однозначно отримати залежність $T(t)$ (рис.1, крива 2), що дає можливість перевірити справедливості рівняння (1). Так, виходячи з (1), величина $(dT/dt)T^{-4}$ в процесі загасання світіння повинна залишатися незмінною, що

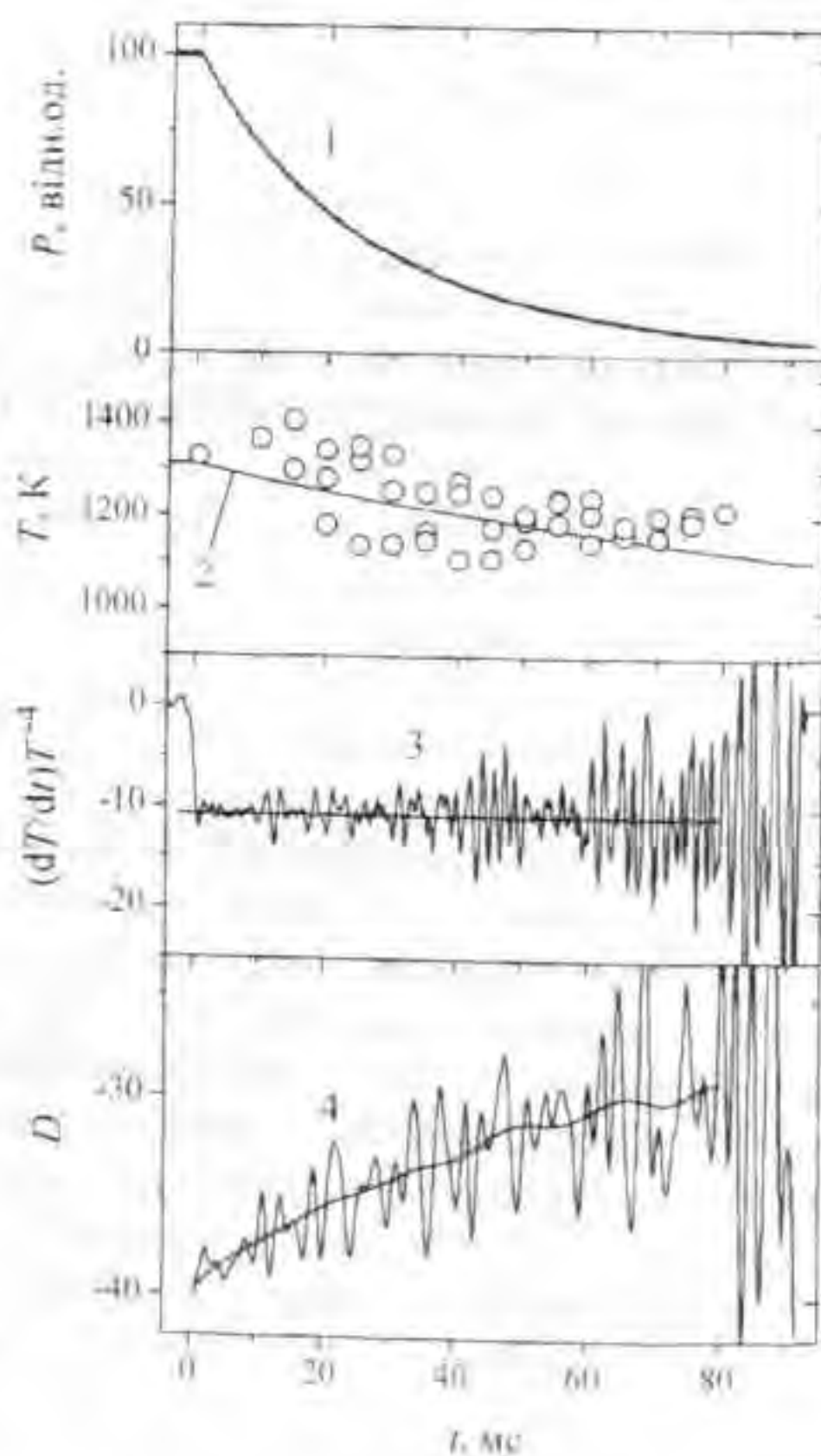


Рис.1 Крива загасання світіння (1), температура (2) та похідні $(dT/dt)T^{-4}$ (3) і $(dD/dt)T^{-4}$ (4).

підтверджується результатами вимірів, наведеними на рис.1, крива 3. Таким чином, для центральної ділянки нитки розжарювання процеси тепловіддачі задовільно описуються законом Стефана-Больцмана.

Необхідно звернути увагу на ще одну обставину. Наведені вище міркування неявно спираються на наближення, що процеси теплової релаксації всередині досліджуваного об'єкта відбуваються так швидко, що можна вважати температуру однаковою у всіх частинах досліджуваного об'єкта. У випадку нитки розжарювання час внутрішньої теплової релаксації можна оцінити як

$$\tau \approx r^2/\chi \approx 0.01 \text{ мс},$$

де $r \approx 0.02$ мм – радіус нитки, χ – коефіцієнт температуропроводності. Отримане значення τ значно менше за характерний час загасання світіння, який становить десятки мілісекунд (рис.1).

Таким чином, центральна частина нитки розжарювання в вакуумі задовольняє рівнянню (1) і може бути використана для експериментальної перевірки запропонованого метода оцінки температури за кривою загасання світіння.

Експериментальна крива загасання світіння $P(t)$ та її похідна $D(t)$ наведено на рис.1, криві 1 та 4 відповідно. Із застосуванням співвідношення (5) до цих експериментальних кривих була розрахована температура досліджуваної ділянки нитки розжарювання в процесі загасання світіння. Результати розрахунку нанесено на графік $T(t)$ на рис.1 у вигляді точок-кружків. Видно, що значення температури, які отримані новим методом, задовільно збігаються із значеннями, які отримані з використанням пірометра ЛОП-72.

Аналіз точності запропонованого метода виходить за рамки цієї роботи. Як видно з рис.1, відхилення величини температури є значним, що вказує на оціночний характер метода. Серед причин похибок метода вкажемо на застосування наближення абсолютно чорного тіла, заміну диференціювання лінійними приростами, наближений характер рівняння (1). Проте запропонований метод має такі переваги як простота, відсутність візуальних вимірів, можливість автоматизації вимірів. Зокрема, метод може виявитися корисним для оцінки температури мікрооб'єктів, які розжарюються внаслідок дії короткого лазерного імпульсу [5-7], коли характерний час загасання світіння становить (10...100) нс.

Підкреслимо, що розглянутий варіант метода базується на припущенні, що основним механізмом тепловіддачі є теплове випромінювання. Таке припущення реалізується для довгої нитки, розташованої в вакуумі. Щоб використати цей метод для контролю температури газонаповнених ламп або інших об'єктів, необхідно внести відповідні зміни до рівняння (1). Це зумовить зміни виразу (5), але ідея методу залишиться незмінною.

Список використаних джерел

1. *Снопко В.Н.* Спектральные методы оптической пирометрии нагретой поверхности. – Минск: Наука и техника, 1988. – 152 с.
2. *Свет Д.Я.* Оптические методы измерения истинных температур. – Москва: Наука, 1982. – 296 с.
3. *Магунов А.Н.* Лазерная термометрия твердых тел. – Москва: Физматлит, 2001. – 224 с.
4. *Зеленский С.Е.* Простой оптический метод измерения температуры нити накала в вакууме // Журн. прикл. спектр. – 2006. – 73, № 3. – С. 414-416.
5. *Zelensky S.* Laser-induced heat radiation of suspended particles: a method for temperature estimation // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. – 1999. – 1. – P.454-458.
6. *Zelensky S.* Laser-induced heat radiation in borate glass // J. Phys.: Condens. Matter. – 1998. – 10. – P.7267-7272.
7. *Schulz C., Kock B.F., Hofmann M. et al.* Laser-induced incandescence: Recent trends and current questions // Appl. Phys. B. – 2006. – 83, N.3. – P.333-354.

Надійшла до редколегії _____ 2007

УДК 621.763: 620.18

Копань Ю.В.,
Хуторянська Н.В.,
Копань В.С.

Булат і багатошаровий композиційний матеріал

КМ зі сталей У9А (0,85 – 0,94%С; 0,15 – 0,30% Мп; 0,15 – 0,35% Si) та 30Х5М2СФА (0,3%С; 5%Cr; 2%Мо; 0,2%Si; 0,3%V) був виготовлений виливанням на параболоїд. Кількість шарів – 600-1500, товщина шарів 2-5 мкм. Умовна границя текучості КМ $\sigma_{0,2} = (250 \pm 30) \cdot 10^7$ Па, а булату $\sigma_{0,2} \geq 250 \cdot 10^7$ Па. Ударна в'язкість КМ $\sigma_u = (100 \pm 10)$ Дж/см². КМ придатний для виготовлення ножів паперово-різальних машин.

Ключові слова: булат, композиційний матеріал, границя текучості.

*E-mail: kopa@pulsary.com.ua

На сьогоднішня ми знаємо про булати наступне.

1. Булат складається з мікрошарів Fe і Fe₃C та макрошарів, має візерунки на поверхні, які формують термообробкою та куванням.

2. Беруні (1054 р.) стверджує, що булат виплавляли невеликими порціями під флюсом у горщиках [1, 2]. Так виплавляв булат і Аносов П.П. [4]. У Швеції тривалий час виплавляли у печах, що містили 3500 невеликих тиглів [2].

3. З Індії у Дамаск булат завозився у вигляді дисків діаметром 12,5 см, товщиною 0,25 см і вагою 900 г [1]. Ці числа недостовірні, бо диск вказаних розмірів важить ~242 г. Невідомий першоавтор не міг помилитись у розмірах (ширина долоні рівна радіусу диску, при купівлі диск розрубували навпіл – отже він не був товщий 3 мм). Напевно, помилка – у вазі.

4. Булатною шаблею караванщики підперізувались як поясом (з метою маскування). Отже, її довжина була близько $L=80$ см, ширина 3 см, товщина $H=0,3$ см, а важила вона близько 560 г. На виготовлення шаблі потрібно було приблизно три диски. Це означає, що вона могла бути зварена з шести половинок дисків, тобто бути мінімально шестишаровою.

5. При згинанні шаблі навколо талі у товстій частині шаблі виникають напрути:

U. Kopan,
N. Hutoryanska,
V. Kopan

Damask steel and multilayered composite material

CM from steels Y9A (0,85 – 0,94%С; 0,15 – 0,30% Мп; 0,15 – 0,35% Si) and 30Х5М2СФА (0,3%С; 5%Cr; 2%Мо; 0,2%Si; 0,3%V) was produced by moulding on paraboloid. Number of layers – 600-1500, thickness of layers – 2-5 μ . Roof stress CM $\sigma_{0,2} = (250 \pm 30) \cdot 10^7$ Pa, in damask steel $\sigma_{0,2} \geq 250 \cdot 10^7$ Pa. Knock toughness of CM $\sigma_u = (100 \pm 10)$ J*cm². The CM is fit to make of paper – cutting machine knife.

Key Words: damask steel, composite material, roof stress

$$\sigma \approx \frac{EH}{2R} = \frac{\pi EH}{L}, \quad (1)$$

де R – радіус кривизни, E – модуль Юнга. При $E=21000 \cdot 10^7$ Па $\sigma \approx 250 \cdot 10^7$ Па. Після звільнення шаблі, вона випрямлялась без залишкової пластичної деформації. Це означає, що границя текучості при згинанні булату $\sigma_T > 250 \cdot 10^7$ Па, а відносна пружна деформація поверхневих шарів $\epsilon > 1,2\%$. Для найкращої холоднопротягнутої дротини $\sigma_T=253 \cdot 10^7$ Па [5]. Листова вольфрамо-кремнієва ресорна сталь марки 65С2ВА має $\sigma_T=170 \cdot 10^7$ Па [6]. Отже, булатна листова сталь була якісніша по σ_T , ніж ресорна сталь, і порівняна з канатною сталлю.

6. Булат вивчали фізики Ф.Савар (1791 - 1841), М.Фарадей (1791 - 1867). Вони довели, що булат складається з заліза, вуглецю та містить малі домішки платини. Виноградов А.П. [3] дослідив, що специфічний візерунок на поверхні булатних виробів досягається куванням і шліфуванням. Технологію булату розробляли Аносов П.П. (1828 – 1837 рр., м. Златоуст), Чернов Д.К., Беляєв Н.Т., Іжевський В.П. Доведено, що вміст вуглецю у булатах становить 1,3 – 1,8% ваг. Сучасну технологію відновлювального електроплавлення булатних сталей розробляли у Дон.ПІ Лалпа С.П. і Дорофеев Г.А. [2].

7. Значних успіхів у виробництві булатних виробів досягли Басов В.І. (Володимиро – Суздальський музей), Архангельський Л. (м. Корольов Московської обл.), Сосков С. (Москва), Куликов І. (Ярославль), Федотов А. (м. Павлово) та ін. майстри.

8. Якість булатних ножів при купівлі – продажу оцінюється переважно по чотирьом факторам: виробник, краса візерунку, здатність перерубувати гвіздки, гострота при розрізанні легких тканин. Продавець не погодиться, аби ножа випробували на згин, бо вони часто ламаються, а ціна їх, як предметів мистецтва, величезна. Так, на XI Міжнародній виставці (Москва, березень, 2005 р.) вартість ножів становила від 50 – 60 тис. до 100 у.о. за один екземпляр [7].

9. Індійські майстри, перевезені Тамерланом у Самарканд, не змогли розвивати своє ремесло, хоч Тамерлан вмів примушувати. Це наводить на думку, що в Індії була специфічна сировина, якої не було ні в Самарканді, ні в Європі. Не було її і в Дамаску, бо використовували імпортовану індійську сталь. Професор Ларіков Л.Н. (Інститут металофізики НАНУ) стверджував, що індійську сталь виготовляли з африканської озерної руди і цейлонського графіту. Тамерлан розірвав це міжнародне співробітництво.

Висновок: сучасна технологія забезпечує булатним виробам характерний візерунок [3], високі ріжучі характеристики леза [2, 7], але не забезпечує водночас достатньої пружності потовщених ділянок. Тому подальше дослідження булату (мета даної роботи) – актуальне.

Техніка експерименту

У Дамаску сталь гартували від кольору “ранкового сонця в пустелі” [2] ($850 \pm 50^\circ\text{C}$) – до “кольору царського пурпуру” ($550 \pm 50^\circ\text{C}$) в потоці холодного повітря. Це означає, що сталь була легованою і близька за хімічним складом до самокальних. Внаслідок деформаційного зміцнення, мартенситного перетворення і дисперсійного твердіння в деяких високоміцних сталях досягають рекордно великої граничної міцності $\sigma_b = (200 - 500) \cdot 10^7$ Па і значної пружності. Наприклад, сталь 30X5M2CФА має $\sigma_T = \sigma_{0.2} = 200 \cdot 10^7$ Па. Холодновитягнута дротина з патентованої зарубіжної сталі з 0,93% ваг.С має $\sigma_b = 450 \cdot 10^7$ Па [5]. Вітчизняним аналогом цієї сталі є У9А (0,85 – 0,94%С; 0,15 – 0,30 Мп; 0,15 –

0,35 %Si; $P < 0,03\%$; $S < 0,02\%$), а також сталі У11А, У12А, У13А. Найбільш придатною для одержання булату є сталь У12А, бо вміст вуглецю в ній (1,15 – 1,24%) близький (див. п.5) до вмісту в індійській сталі. Крім того, при гартуванні до 300°C за $t \leq 100$ с в ній зберігається аустенит. Сталь У12А ми виплавали в алундових закритих тиглях порціями по 300 г, бо саме таку кількість сталі потрібно (п. 3) для виготовлення одного диску. Плавлення здійснювали в горні так, що частина газів від згорання вугілля витісняла повітря з простору навколо тигля. Це зменшувало окислення поверхні розплаву. Сталь виливали на мідну виливницю ОА (рис. 1а), що оберталась на вертикальному валу 2. Чи виливали сталь ковалі – індуси?

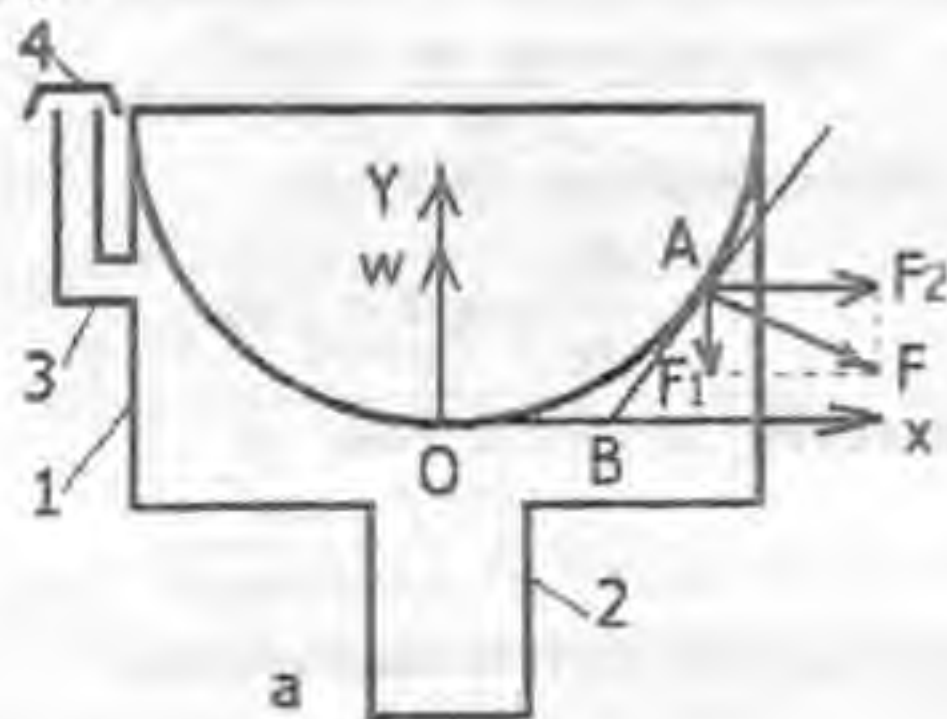


Рис. 1а. Будова параболічної виливниці ОА; w – кутова швидкість обертання виливниці на валу 2.

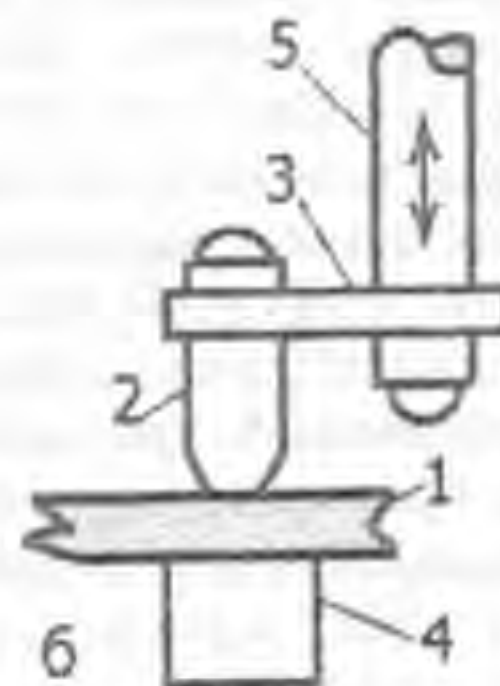


Рис. 1б. Схема кування злитка 1 дозованим зусиллям молотка 2; 3 – пружина, 4 – підігріта наковальня, 5 – шток.

Якби вони кристалізували булат в тиглях, то зливок мав би усадкові пустоти. Їх потрібно було б відрубати, що є трудомісткою операцією. Крім того, купці поставляли в Дамаск диски. Їх розковувати зі стержневого злитка важко і недоцільно, адже холодну зброю легше робити зі

смути чи прутка. Тому логічним є припущення про те, що індуksi виливали сталь на плиту, наприклад, мідну, що оберталась на гончарному верстаті.

Виливниця (рис. 1а) була викована з мідного листа, товщиною 3 мм і припаяна латунню до залізного кожуха 1. В простір між кожухом і виливницею ОА заливали через патрубок 3 (з запобіжним клапаном 4) трансформаторне мастило чи воду. Діаметр виливниці 150 мм. Якщо виливниця має форму параболоїда, то при її обертанні з кутовою швидкістю w елемент розплаву масою m залишається в точці $A(x, y)$, куди попав при литті, коли результуюча сила $F = F_1 + F_2$ векторно (F_1 – сила гравітації, F_2 – відцентрова сила) орієнтується нормально до дотичної АВ.

Якщо виливниця має твірну

$$y = ax^2, \quad (2)$$

то $\angle ABX = \alpha$ знайдемо з рівняння

$$\frac{dy}{dx} = \operatorname{tg} \alpha = 2ax. \quad (3)$$

З іншого боку, $\alpha = \angle F_2FA$. Тому

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{F_2}{F_1} = \frac{mw^2x}{mg}. \quad (4)$$

Порівнюючи (2), (3) і (4), знаходимо, що

$$y = \frac{w^2}{2g} x. \quad (5)$$

При виливанні сталі одного сорту $w_1 = 2\pi$ рад/с, а при виливанні двох сортів зі спарених тиглів $w_2 = 4\pi$ рад/с. Відповідно w_1 і w_2 виливниці мали твірні $y_1 = 2x_1^2$, $y_2 = 8x_2^2$. Для $x_1 = 0,075$ м $y_1 \approx 0,013$ м. Для $x_2 = 0,075$ м $y_2 \approx 0,052$ м.

Перевага параболічної виливниці перед плоскою в тому, що товщина злитка не залежить (теоретично) від координат точки $A(x, y)$. При одношаровому литті потік розплаву рухають один раз по твірній ОА, при багатшаровому – багатократно. Практично, товщина злитка ($H \sim 5$ мм) та рівномірність по товщині ($\pm 0,5$ мм) залежать від маси розплаву (~ 300 г) та майстерності ливарника. Час виливання одношарового злитка 5 – 6 с., багатшарового 10 – 300 с (з підігрівом тиглів у процесі лиття киснево – газовим пальником). Щоб полегшити відокремлення злитка від виливниці, поверхню останньої перед кожним виливанням полірували і закопчували. Через 10 – 15 секунд після початку виливання одношарового злитка температура початкової ділянки знижувалась до $300-350^\circ\text{C}$ (температура розплаву $1500-1550^\circ\text{C}$). Тому відбувалась не лише кристалізація, а й

загартування на аустеніт вибраних нами сталей. Гарячий ($300-350^\circ\text{C}$) злиток 1 негайно кували на спеціально виготовленому пристрої (рис. 1б). Молоток 2 закріплений на пружині 3, остання – на штокові 5. Наковальня 4 – торець сталюого циліндру діаметром 30 мм. Шток 5 приводиться в колильний рух від синхронного двигуна (750 об./хв., 300 Вт) через кривошипний механізм. Для стабілізації швидкості обертання на валу був встановлений маховик масою 10 кг. Частота коливання молотка 2 (12,5 Гц) співпадає з частотою обертання двигуна. Сила удару регулюється відстанню між поверхнею клину молотка 2 і відстанню до заготовки 1. Маса молотка – 200 г. Температура ділянки злитка, що кується ($300-350^\circ\text{C}$), підтримується внаслідок електропідігріву наковальні до $400-450^\circ\text{C}$. Інші ділянки злитка мали температуру $150-200^\circ\text{C}$. Кування здійснювали клиновидним кінцем молотка так, щоб гребінь клину весь час падав на поверхню паралельно одному й тому ж, вибраному на початку, реперному діаметру злитка. Злиток тому видовжувався переважно в перпендикулярному до реперного діаметру напрямку.

Такий спосіб кування зрозумілий з наступних міркувань. При швидкій кристалізації аустеніт має дрібні зерна, а площина (111) паралельна підкладинці. При куванні ребром легкого молотка виникають дислокації переважно з крайовою компонентою, так що вектор Бюргерса має орієнтацію [111]. Паралельно реперному діаметру злитка тягнуться дислокаційні лінії від границі до границі кожного зерна. До дислокацій дифундує вуглець. Отже, вони являють собою зародки пластин Fe_3C , що ростуть вздовж щільнопакованих площин (111) матриці – аустеніту. Тому виникає перліт, пластинки якого майже паралельні площині злитка [10]. Така структура дозволяє віднести булат до класу багатшарових композиційних матеріалів [8]. Кування легкими молотками необхідне для того, щоб при ударі не виникали дислокаційні скупчення, а лише ряди дислокацій. Крім того, малі обтиснення потрібні для того, щоб цементитні пластинки деформувались пластично. Кування має переваги перед вальцюванням, бо при куванні утворюються атоми – акселерени [12, 13], що збільшує швидкість дифузії, отже, швидкість утворення цементитних пластин. Час кування диску (з початковим діаметром 12 см і товщиною 5 мм) до товщини $3 \pm 0,3$ мм становив 25-35 хв. Цього часу достатньо для розпаду аустеніту (при $300-350^\circ\text{C}$) вибраних нами сталей. Час кування такого диску

в давнину міг становити 3 – 4 години (2 молотки, частота 2 Гц). Після кування злиток розрізали абразивними кругами на смужки, слідкуючи, щоб зона різання не перегрівалась вище 300-350°C.

Всі технологічні операції, виконані планово в кустарних умовах, наближених до умов роботи індійських ковалів, в майстерні зварювальника і коваля Копаня І.С., за що висловлюємо йому щиру подяку (по смертню).

Експериментальні результати та їх обговорення

Критичною характеристикою сучасних булатів є границя текучості σ_T (п. 5). Ми визначали σ_T , поклавши зразок на дві призми, навантажуючи його силою F за допомогою третьої посередині, вимірюючи стрілу прогину λ . Після якогось великого λ зразок не повертався у початкове положення. Тоді, згідно [11],

$$\sigma_T = \frac{3 Fl}{2 ba^3} \left(1 - \frac{4a}{3\pi l} \right), \quad (6)$$

де $b=9$ мм та $a=3$ мм – ширина і товщина зразка, $l = 50$ мм – відстань між гранями крайніх призм.

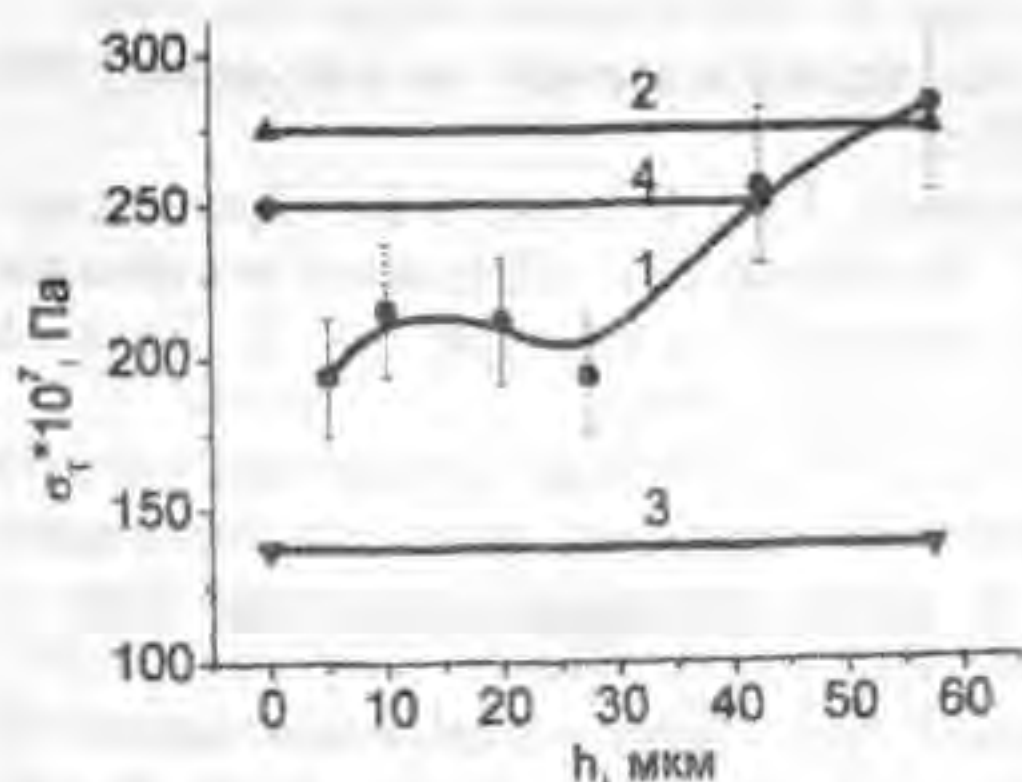


Рис.2. Залежність $\sigma_T(h)$ границі текучості $\sigma_T=\sigma_{0.2}$ багатошарової кованої сталі 30X5M2CF від товщини шару h – крива 1 та рівні σ_T цієї сталі для одношарових кованого при 300-350°C і відпаленого (320°C, 4 год.) зразків – 2, 3, відповідно. 4 – рівень σ_T дамаської сталі (пункт 5).

Ударна в'язкість σ_H визначена (рис.4) на зразках призматичної форми з трикутником 3,5x3,5x3,5 мм³ в перерізі та довжиною 50 мм. Відстань між опорами копра – 40 мм. Результати досліджень σ_T і σ_H можна пояснити наступним чином.

1. Границя текучості $\sigma_T(h)$ досліджених багатошарових сталей практично не залежить від товщини шару h (криві 1 рис. 2, 3). Отже, границі між шарами не відрізняються від границь між зернами, бо виливали пошарово одну й ту ж сталь. Тому ці границі однаково блокують рух дислокацій при деформації зразків. Головне блокування здійснюється цементитними пластинками, – а вони однакові, незалежно від h , адже кування багатошарової сталі здійснювали ідентично при різних h .

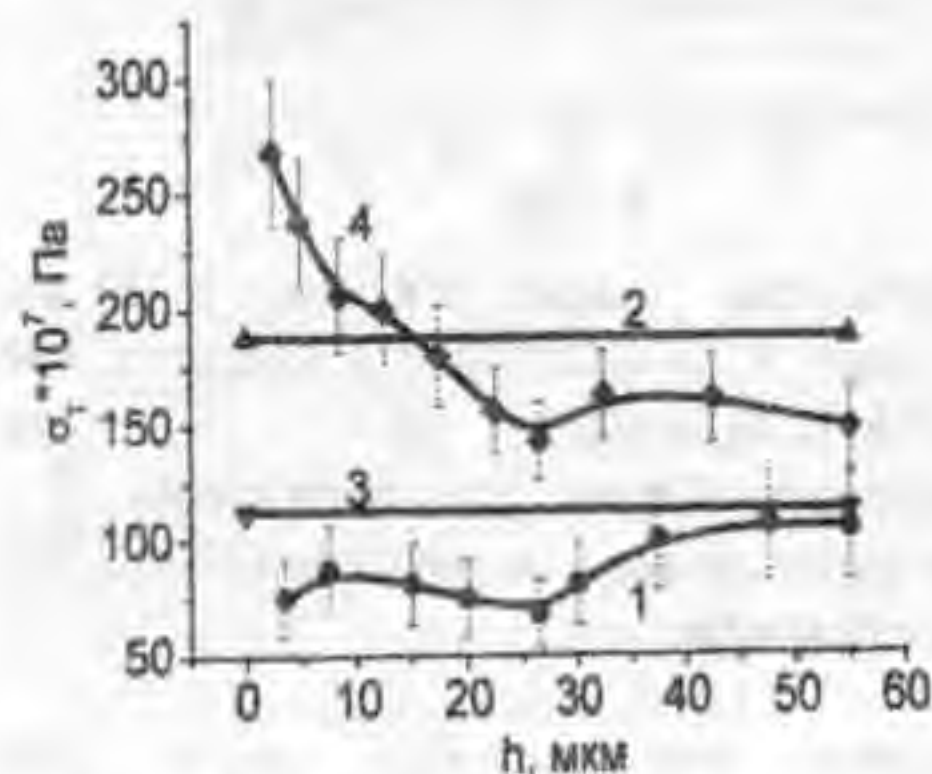


Рис.3. Залежність $\sigma_T(h)$ границі текучості $\sigma_T=\sigma_{0.2}$ багатошарової кованої сталі Y12A від товщини шару h – крива 1 та рівні σ_T цієї сталі для одношарових кованого при 300-350°C і відпаленого (320°C, 4 год.) зразків – 2, 3, відповідно. 4 – $\sigma_T(h)$ багатошарового кованого КМ Y12A-30X5M2CF (50±10% об.).

2. В КМ Y12A-30X5M2CF (рис.3, крива 4) $\sigma_T(h)$ наростає зі зменшенням h , бо шари вилиті з різних сталей і границі між шарами ефективніше блокують рух дислокацій, ніж границі між зернами. Доведено [14], що у мікророзрідках і тонких шарах блокування тим сильніше, чим більша напруга

$$\tau = \frac{Gb}{h} = \alpha \sigma, \quad (7)$$

де G – модуль зсуву, b – вектор Бюргерса, α – числовий коефіцієнт. “Псевдобулати” давно виготовляли, зварюючи смужки зі сталей, зварених у різних горнах [1, 2]. Ефект був навіть тоді, коли кількість шарів не перевищувала десятка. Сучасний майстер Л.Архангельський кує ножі з 250 шарів [7]. У [8] наведено й інші причини зростання σ_T зі зменшенням h .

3. Ударна в'язкість $\sigma_H(h)$ наростає зі зменшенням h (криві 1, 2 рис. 4), бо границі між

шарами блокують поширення мікротріщин. Блокування ефективне, коли ударна хвиля поширюється впоперек шарів [8]. Тому крива 1 крутіше йде при зменшенні h , ніж крива 2.

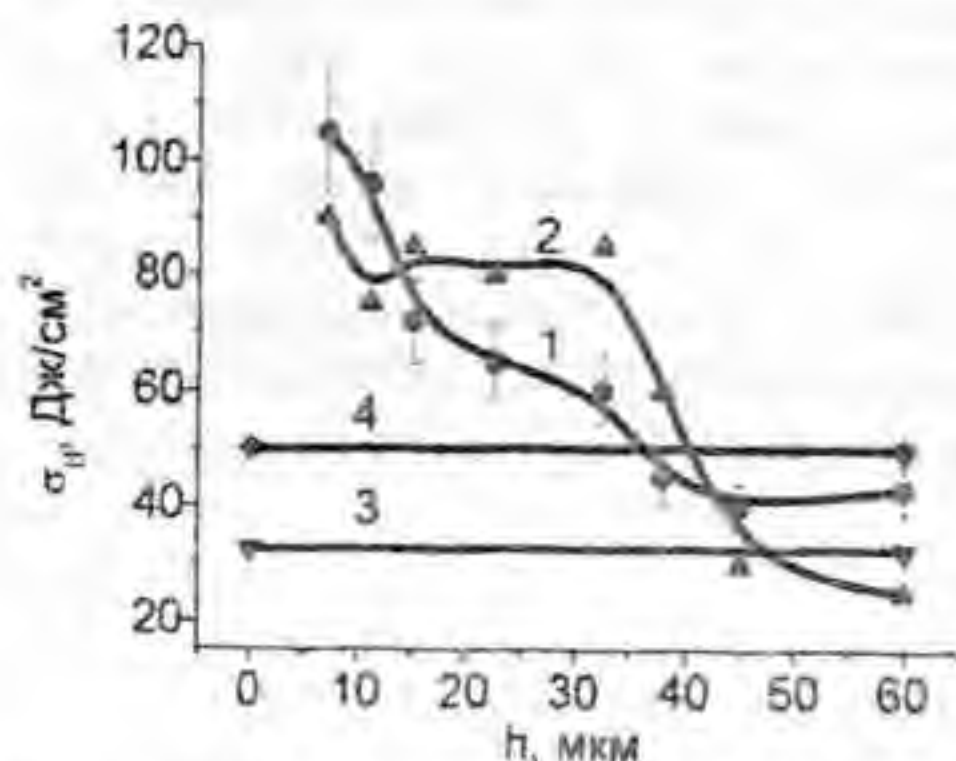


Рис.4. Залежність ударної в'язкості $\sigma_{11}(h)$ від товщини шару h багат шарового кованого КМ У12А-30Х5М2СФ (50±10% об.): 1- удар перпендикулярно шарам, 2 – паралельно, 3 – рівень σ_{11} одношарової і відпаленої (300-350°C) сталі У12А та кованої – 4.

Булатні ножі повинні довго бути гострими. Не існує одиниці вимірювання гостроти. Визначають лише твердість леза, але цього недостатньо.

Нами був відкований радіально диск з КМ У12А-30Х5М2СФ. З нього шліфуванням був виготовлений дисковий ніж для папероворізальної машини, в якій ножі працюють попарно. Ніж пропрацював у чотири рази довше ножа – напарника. Вартість дискових ножів з КМ може бути знижена до вартості сучасних серійних, якщо виливання здійснювати на внутрішню поверхню циліндричної виливниці, а замість гарячого кування здійснювати гаряче вальцювання.

Висновки

1. Лиття розплавів двох тиглів, у кожному з яких своя марка сталі, на внутрішню поверхню параболоїда і дозоване по силі кування злитка є самодостатніми операціями для одержання багат шарового композиційного матеріалу з товщиною шару до 2 мкм.

2. КМ У9А-30Х5М2СФА (50% об.) по границі текучості рівноцінний дамаській сталі.

3. Багат шарові злитки зі сталі одної марки не мають переваг перед одношаровими злитками. Їх властивості визначаються хімічним складом і термомеханічною обробкою.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Мезенин Н.А. Занимательно о железе. – М: Металлургия, 1972. – 200 с.
2. Валентинов А.А. Что нового в Старом Осколе? – М: Металлургия, 1979. – 118 с.
3. Виноградов А.П. Происхождение булатного узора // Техничко – экономический вестник, М. – 1924. – Т.4. – С.8-9.
4. Аносов П.П. О булатах. – 1841.
5. Гряднев В.И., Гаврилюк В.Г., Мешков Ю.Я. Прочность и пластичность холоднодеформированной стали. – К: Наукова Думка - 1974. - 231 с.
6. Самохвалов Я.А., Левницкий М.Я., Григораш В.Д. Справочник техника – конструктора. – Київ: Техніка, 1978. – 521 с.
7. Комсомольская правда в Украине, 25-31 марта 2005, www.kp.kiev.ua
8. Копань В.С., Композиційні матеріали. – Київ: Університетське видавництво „Пульсари”, 2004. – 196 с.
9. Соколов Н. Дамасская сталь, Техническая энциклопедия, М. – 1929. – Т.6. – 922 с.
10. Чалмерс Б. Физическое металловедение. – М: Изд. черной и цветной металлургии, 1963. – 455 с.
11. Писаренко Г.С., Руденко В.Н., Третьяченко Г.Н., Трощенко В.Т. Прочность материалов при высоких температурах. – К: Наукова Думка – 1966. – 795 с.
12. Філатов О.В. Міграція атомів при ударній деформації ідеальних металевих кристалів. Автореферат докторської дисертації. Київ. – 2005. – 32 с.
13. Sugakov V.J. Atom acceleration caused by screw dislocation slip in crystals // Physica Status Solidi (B), 1997, vol.200, p. 19-25.
14. Копань В.С. Исследование несовершенств кристаллического строения на микропроводах. Автореферат кандидатської дисертації. Київ. – 1966. – 17 с.

Надійшла до редколегії 18.05.07

УДК 539.213

В.І. Лисов, доктор фіз.-мат. наук, проф.
Т.Л. Цареградська, к. фіз.-мат. наук, доцент
О.В. Турков, інженер,
В.В. Яриш, студент

**Квантово-механічний
розрахунок основних характеристик
процесу фазового розшарування в
рідких бінарних сплавах**

Проведено теоретичні дослідження процесу фазового розшарування в рідких бінарних сплавах. У рамках методу псевдопотенціалу отримано аналітичні вирази для теплоти утворення сплаву і відносної зміни об'єму при утворенні сплаву як функції різниці величин однорідної частини електронної густини компонентів, які утворюють сплав. За результатами проведених розрахунків побудовано концентраційні залежності відносної інтегральної вільної енергії Гіббса та діаграма стану для системи Li-Na, яка добре узгоджується з експериментальними даними.

Ключові слова: фазове розшарування, метод псевдопотенціалу, відносна інтегральна вільна енергія Гіббса

*E-mail: tsar_grd@mail.univ.kiev.ua

Вступ

Експериментальне визначення та теоретичний розрахунок термодинамічних властивостей рідких бінарних сплавів являє собою актуальну область сучасної фізики. При розрахунку рівноважних властивостей рідких бінарних сплавів за допомогою квантовомеханічної теорії ставляться підвищені вимоги до точності обрахунку структурнозалежних доданків, що входять у рівняння для вільної енергії.

Вихідною інформацією для розрахунку внутрішньої енергії рідких бінарних сплавів є параметри неекранованих індивідуальних псевдопотенціалів компонент і структурні параметри сплаву у рамках бінарної суміші твердих сфер. Використання методу псевдопотенціалу і застосування модельної рідини твердих сфер дає можливість отримати рівняння для розрахунку повної внутрішньої

V. I. Lysov, Dr.Sc., Prof.,
T. L. Tsaregradskaya, PhD.,
O. V. Turkov, engineer,
V. V. Yarish, student

**Quantum-mechanical
calculation of the basic characteristics of
phase stratification process in liquid
binary alloys**

Theoretical researches of process of phase stratification in liquid binary alloys are carried out. Within the framework of a method of pseudo-potential expressions for heat of formation of the alloy and relative change of volume at formation of the alloy as functions of difference of sizes of homogeneous part of electronic density of components of the alloy are received. By results of the carried out calculations concentration dependences of relative integrated Gibbs free energy and the state diagram for Li-Na system are constructed. Results of calculation will well be coordinated to experimental data.

Key words: phase stratification, method of pseudo-potential, relative integrated free Gibbs energy.

енергії рідких бінарних сплавів неперехідних металів. Явище фазового розшарування в рідкій фазі пов'язано з поведінкою концентраційної залежності відносної інтегральної вільної енергії Гіббса $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$. Конкуруюча поведінка величин ΔH і ΔS приводить до того, що концентраційна залежність ΔG має S-подібну форму, що віддзеркалює тенденцію до розшарування рідкої системи. У даній роботі отримано основні термодинамічні характеристики бінарного сплаву в рамках методу псевдопотенціалу та розглянуто процес фазового розшарування рідких бінарних сплавів. Проведено розрахунок концентраційної залежності відносної інтегральної вільної енергії Гіббса та побудована діаграма стану для системи Li-Na.

1. Розрахунок термодинамічних характеристик бінарного сплаву в рамках методу псевдопотенціалу

Для визначення термодинамічних властивостей сплаву необхідно розрахувати дві його характеристичні функції: повну внутрішню енергію E та ентропію S . Повна внутрішня енергія може бути обрахована в рамках дифракційної моделі як сума енергії прямої іон-іонної взаємодії, кінетичної енергії іонів та енергії підсистеми електронів провідності; остання обраховується за допомогою методу псевдопотенціалу.

Розглянемо бінарний сплав, який складається із атомів сорту 1 та 2. Введемо наступне позначення: Z_1 і Z_2 – валентність атомів сортів 1 і 2; $V = c_1 V_1 + c_2 V_2 + \Delta V$ – об'єм сплаву; ΔV – зміна об'єму при утворенні сплаву; $N = N_1 + N_2$ – сумарне число атомів сорту 1 і 2; $c_1 = N_1/N$, $c_2 = N_2/N$ – концентрації атомів відповідних сортів.

Вираз для повної внутрішньої енергії бінарного сплаву має наступний вигляд [1]:

$$\begin{aligned} E(V) = & \frac{3}{2} RT + \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3} \frac{h^2}{m} Z_{sp} \left(\frac{Z_{sp}}{V} \right)^{2/3} - \\ & - 0,916 \left(\frac{\pi}{6} \right)^{1/3} e^2 N^{4/3} Z_{sp} \left(\frac{Z_{sp}}{V} \right)^{1/3} + \\ & + \frac{0,115}{2a_0} e^2 N Z_{sp} - \\ & - \frac{e^2 N}{\pi a_0} \left[c_1 \frac{Z_1^2}{R_{11}} F_1(x_1) + c_2 \frac{Z_2^2}{R_{22}} F_1(x_2) \right] + \\ & + 1,47 \pi e^2 N^2 (0,65 \cdot 6 / \pi N)^{2/3} \alpha \left(\frac{Z_{sp}}{V} \right)^{1/3} \times \\ & \times \left[c_1 \frac{Z_1^{4/3} R_{11}}{x_1} + c_2 \frac{Z_2^{4/3} R_{22}}{x_2} \right] + \\ & + 2\pi a_0 e^2 N^2 \frac{Z_{sp}}{V} \left[c_2 Z_2 R_{22}^2 \frac{F_2(x_2)}{x_2} \left(\pi^{1/2} - \frac{1}{x_2} \right) + \right. \\ & \left. + c_1 Z_1 R_{11}^2 \frac{F_2(x_1)}{x_1} \left(\pi^{1/2} - \frac{1}{x_1} \right) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

де R_{11} , R_{22} – параметри псевдопотенціалів компонентів, a_0 , e , h , N – світові константи.

Визначивши внутрішню енергію сплаву та його компонентів, можна записати вираз для теплоти утворення сплаву

$$\Delta H = \Delta E + P \Delta V, \quad (2)$$

де ΔE і ΔV – зміна внутрішньої енергії і об'єму при утворенні сплаву відповідно.

При нормальних зовнішніх умовах ($P = 10^5$ Па) величина $|P \Delta V| \ll |\Delta E|$ (2) набуває вигляду

$$\Delta H \cong \Delta E. \quad (3)$$

Зміну внутрішньої енергії ΔE можна записати як

$$\Delta E = E(V) - c_1 E_1(V_1) - c_2 E_2(V_2), \quad (4)$$

де $E_1(V_1)$ і $E_2(V_2)$ – внутрішні енергії чистих компонентів.

Використовуючи аналітичний вираз для внутрішньої енергії сплаву та його компонентів (1) та (3), з урахуванням (4), розрахуємо величину ΔH . Складність обчислення ΔH пов'язана із тим, що величина ΔH має порядок величини 10^9 Дж/моль, а величини E , E_1 , E_2 змінюються в межах $(10^5 - 10^6)$ кДж/моль. Таким чином, для того, щоб ΔH розраховувати з допустимою похибкою 20-30%, необхідно внутрішню енергію сплаву і компонентів розраховувати з похибкою, що не перевищує 0,01-0,1%.

Тому вираз для внутрішньої енергії сплаву $E(V)$ представимо у вигляді суми внутрішніх енергій чистих компонентів плюс доданок, величина якого має порядок величини порівняний із порядком значення ΔH .

Розкладемо вираз для $E(V)$ в ряд Тейлора поблизу V_0 , враховуючи, що величина ΔV мала:

$$E(V) = E(V_0) + \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{V_0} \Delta V + \dots \quad (5)$$

де $E(V_0)$ – внутрішня енергія сплаву з об'ємом $V_0 = c_1 V_1 + c_2 V_2$, $V = V_0 + \Delta V$.

Із аналізу виразів для внутрішньої енергії сплаву та його компонентів слідує, що всі члени $E(V)$ є функцією $(Z/V)^n$, де $n=1/3, 2/3, 1$.

Записуючи відношення $\frac{Z_{sp}}{V_0}$ у вигляді тотожної рівності

$$\begin{aligned} \frac{Z_{sp}}{V_0} &= \frac{c_1 Z_1 + c_2 Z_2}{c_1 V_1 + c_2 V_2} = \\ &= \frac{Z_1 + Z_2}{V_1 + V_2} \left[1 + (c_1 - c_2) \frac{V_1 Z_1 - V_2 Z_2}{(Z_1 + Z_2) V_0} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

отримаємо наступний розклад:

$$Z_{sp} \left(\frac{Z_{sp}}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} = c_1 Z_1 \left(\frac{Z_1}{V_1} \right)^{\frac{1}{3}} + c_2 Z_2 \left(\frac{Z_2}{V_2} \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{3} \frac{c_1 c_2}{V_0} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{(Z_1 V_2 - Z_2 V_1)^2}{V_1 V_2} \times \left[1 - \frac{Z_1 V_2^2 [V_0 + V_1(c_1 - c_2)] + Z_2 V_1^2 [V_0 + V_2(c_2 - c_1)]}{3(Z_1 + Z_2)V_1 V_2 V_0} \right], \quad (7)$$

$$Z_{sp} \left(\frac{Z_{sp}}{V_0} \right)^{\frac{2}{3}} = c_1 Z_1 \left(\frac{Z_1}{V_1} \right)^{\frac{2}{3}} + c_2 Z_2 \left(\frac{Z_2}{V_2} \right)^{\frac{2}{3}} - \frac{2}{3} \frac{c_1 c_2}{V_0} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{(Z_1 V_2 - Z_2 V_1)^2}{V_1 V_2} \times \left[1 - \frac{Z_1 V_2^2 [V_0 + V_1(c_1 - c_2)] + Z_2 V_1^2 [V_0 + V_2(c_2 - c_1)]}{6(Z_1 + Z_2)V_1 V_2 V_0} \right], \quad (8)$$

Рівняння (6) запишемо в іншій тотожній формі

$$\frac{Z_{sp}}{V_0} = c_1 \frac{Z_1}{V_1} + c_2 \frac{Z_2}{V_2} - c_1 c_2 \frac{(V_2 - V_1)(Z_1 V_2 - Z_2 V_1)}{V_0 V_1 V_2}, \quad (9)$$

Із аналізу виразів (7)–(9) випливає, що при рівності концентрації електронів в чистих металах, тобто $Z_1/V_1 = Z_2/V_2$, справедливий вираз

$$\left(\frac{Z_{sp}}{V_0} \right)^n = c_1 \left(\frac{Z_1}{V_1} \right)^n + c_2 \left(\frac{Z_2}{V_2} \right)^n,$$

де n – будь-яке дійсне число. Підставляючи (7)–(9) в (1), у якому прийемо $V = V_0$, отримаємо:

$$E(V_0) = c_1 E_1(V_1) + c_2 E_2(V_2) + c_1 c_2 \Delta \Gamma(V_0, V_1, V_2), \quad (10)$$

$$\text{де } \Delta \Gamma = \frac{A(V_1, V_2)}{V_0} + (c_1 - c_2) \frac{B(V_1, V_2)}{V_0^2}; \quad (11)$$

$$A(V_1, V_2) = A_K + A_{OK} + A_{3L}^{(1)} + A_{3L}^{(2)};$$

$$B(V_1, V_2) = B_K + B_{OK} + B_{3L}^{(2)};$$

$$A_K = -\frac{1}{5} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{1}{3}} \times$$

$$\times \frac{(Z_1 V_2 - Z_2 V_1)^2}{V_1 V_2} \left[1 - \frac{Z_1 V_2^2 + Z_2 V_1^2}{6(Z_1 + Z_2)V_1 V_2} \right];$$

$$A_{OK} = \frac{0,916}{3} \left(\frac{\pi}{6} \right)^{2/3} e^2 N^{4/3} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{2}{3}} \times$$

$$\times \frac{(Z_1 V_2 - Z_2 V_1)^2}{V_1 V_2} \left[1 - \frac{Z_1 V_2^2 + Z_2 V_1^2}{3(Z_1 + Z_2)V_1 V_2} \right];$$

$$A_{3L}^{(1)} = 2\pi e^2 N^2 a_0 (Z_2 V_1 - Z_1 V_2) \times \left[\frac{Z_1}{V_1} R_{c1}^2 \frac{F_1(x_1)}{x_1} \left(\pi^{1/2} - \frac{1}{x_1} \right) - \frac{Z_2}{V_2} R_{c2}^2 \frac{F_2(x_2)}{x_2} \left(\pi^{1/2} - \frac{1}{x_2} \right) \right];$$

$$A_{3L}^{(2)} = 0,98\pi e^2 N^2 (0,65 \cdot 6 / \pi N)^{2/3} \alpha \times$$

$$\times (Z_2 V_1 - Z_1 V_2) \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{1}{3}} \times$$

$$\times \left[\frac{R_{c1}}{x_1} \frac{Z_1^{4/3}}{V_1} - \frac{R_{c2}}{x_2} \frac{Z_2^{4/3}}{V_2} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{6} \frac{Z_2 V_1 - Z_1 V_2}{Z_1 + Z_2} \left(\frac{R_{c1}}{x_1} \frac{Z_1^{4/3}}{V_1^2} + \frac{R_{c2}}{x_2} \frac{Z_2^{4/3}}{V_2^2} \right) \right]$$

$$B_K = -\frac{1}{30} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{(Z_2 V_1 - Z_1 V_2)^3}{V_1 V_2 (Z_1 + Z_2)};$$

$$B_{OK} = \frac{0,916}{9} \left(\frac{\pi}{6} \right)^{2/3} e^2 N^{4/3} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{(Z_2 V_1 - Z_1 V_2)^3}{V_1 V_2 (Z_1 + Z_2)};$$

$$B_{3L}^{(2)} = 0,49\pi e^2 N^2 (0,65 \cdot 6 / \pi N)^{2/3} \alpha \times$$

$$\times \alpha \frac{(Z_2 V_1 - Z_1 V_2)^2}{3(Z_1 + Z_2)} \left(\frac{V_1 + V_2}{Z_1 + Z_2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{R_{c1}}{x_1} \frac{Z_1^{4/3}}{V_1} - \frac{R_{c2}}{x_2} \frac{Z_2^{4/3}}{V_2} \right];$$

Підставляючи (10), з урахуванням (5), в (4), отримуємо

$$\Delta H = c_1 c_2 \Delta \Gamma + \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{T, p} \Delta V, \quad (12)$$

Для розрахунку величини відносної інтегральної ентропії можна використати наступний вираз [2]:

$$\Delta S = -R[c_1 \ln c_1 + c_2 \ln c_2] + R[1 + \nu(\eta_0)] \frac{\Delta V}{V_0}, \quad (13)$$

Для знаходження відносної зміни об'єму $\Delta V/V_0$ при утворенні сплаву скористаємося термодинамічним рівнянням

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T \cong T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T, \quad (14)$$

що справедливе при тиску, близькому до атмосферного.

Представимо похідні, що входять у рівняння (14) у вигляді рядів по степенях ΔV поблизу V_0

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial E}{\partial V_0} \right)_T + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V_0^2} \right)_T \Delta V + \dots \quad (15)$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial S}{\partial V_0} \right)_T + \left(\frac{\partial^2 S}{\partial V_0^2} \right)_T \Delta V + \dots$$

Підставляючи (15) в (14), отримаємо

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{1}{D_0} \frac{V_0}{RT} \left[T \left(\frac{\partial S}{\partial V_0} \right)_T - \left(\frac{\partial E}{\partial V_0} \right)_T \right], \quad (16)$$

$$\text{де } D_0 = \left[\frac{V_0^2}{RT} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V_0^2} \right)_T - \frac{V_0^2}{R} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial V_0^2} \right)_T \right].$$

Похідну $\left(\frac{\partial S}{\partial V_0} \right)_T$, що входить у вираз (16)

будемо описувати за допомогою виразу

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S^{tot}}{\partial V} \right)_{T_0} &= c_1 \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1} \right)_T + c_2 \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2} \right)_T + \\ &+ c_1 c_2 \frac{V_2 - V_1}{V_0} \left[\left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2} \right)_T - \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1} \right)_T \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Для знаходження $\left(\frac{\partial E}{\partial V_0} \right)_T$

продиференціюємо (10) послідовно по V_1 і V_2 , з урахуванням $V_0 = c_1 V_1 + c_2 V_2$ і додамо отримані результати

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E(V_0)}{\partial V_0} \right)_T &= c_1 \left(\frac{\partial E_1}{\partial V_1} \right)_T + c_2 \left(\frac{\partial E_2}{\partial V_2} \right)_T + \\ &+ c_1 c_2 \left[\frac{\partial \Delta E}{\partial V_0} + \frac{\partial \Delta E}{\partial V_1} + \frac{\partial \Delta E}{\partial V_2} \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Підставляючи (17) і (18) в (16), з урахуванням того, що для чистих компонент виконуються умови

$$\left(\frac{\partial E_1}{\partial V_1} \right)_T = T \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1} \right)_T, \quad \left(\frac{\partial E_2}{\partial V_2} \right)_T = T \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2} \right)_T,$$

отримаємо

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{c_1 c_2}{D_0} \times \quad (19)$$

$$\times \left\{ \frac{V_2 - V_1}{R} \left[\left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2} \right)_T - \left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1} \right)_T \right] - \frac{V_0}{RT} \left[\frac{\partial \Delta E}{\partial V_0} + \frac{\partial \Delta E}{\partial V_1} + \frac{\partial \Delta E}{\partial V_2} \right] \right\}$$

Наведені вище вирази для ΔE , ΔH , ΔS і ΔV , дають можливість описати відносну інтегральну енергію Гіббса $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

$$\begin{aligned} \Delta G &= c_1 c_2 \Delta G + \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{T_0} \Delta V - \\ &- RT \left[(1 + y(\eta_0)) \frac{\Delta V}{V_0} - c_1 \ln c_1 - c_2 \ln c_2 \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Згідно з рівнянням (16)

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V_0} \right)_T = T \left(\frac{\partial S}{\partial V_0} \right)_T = \frac{\Delta V}{V} \frac{DRT}{V_0},$$

де $\left(\frac{\partial S}{\partial V_0} \right)_T = (1 + y(\eta_0)) \frac{R}{V_0}$, що дає можливість формулу для ΔG записати у вигляді

$$\Delta G = c_1 c_2 \Delta G + RT(c_1 \ln c_1 + c_2 \ln c_2) - \left(\frac{\Delta V}{V_0} \right)^2 D_0 RT. \quad (21)$$

Останній член в (21) має порядок величини $\left(\frac{\Delta V}{V_0} \right)^2$ і в практичних розрахунках ним можна знехтувати.

2. Результати розрахунку концентраційної залежності вільної енергії Гіббса та діаграми стану для системи Li-Na

Згідно отриманого рівняння (21) для ΔG розраховано концентраційні залежності відносної інтегральної енергії Гіббса для бінарної системи Li-Na. Результати розрахунку приведені на рис.1.

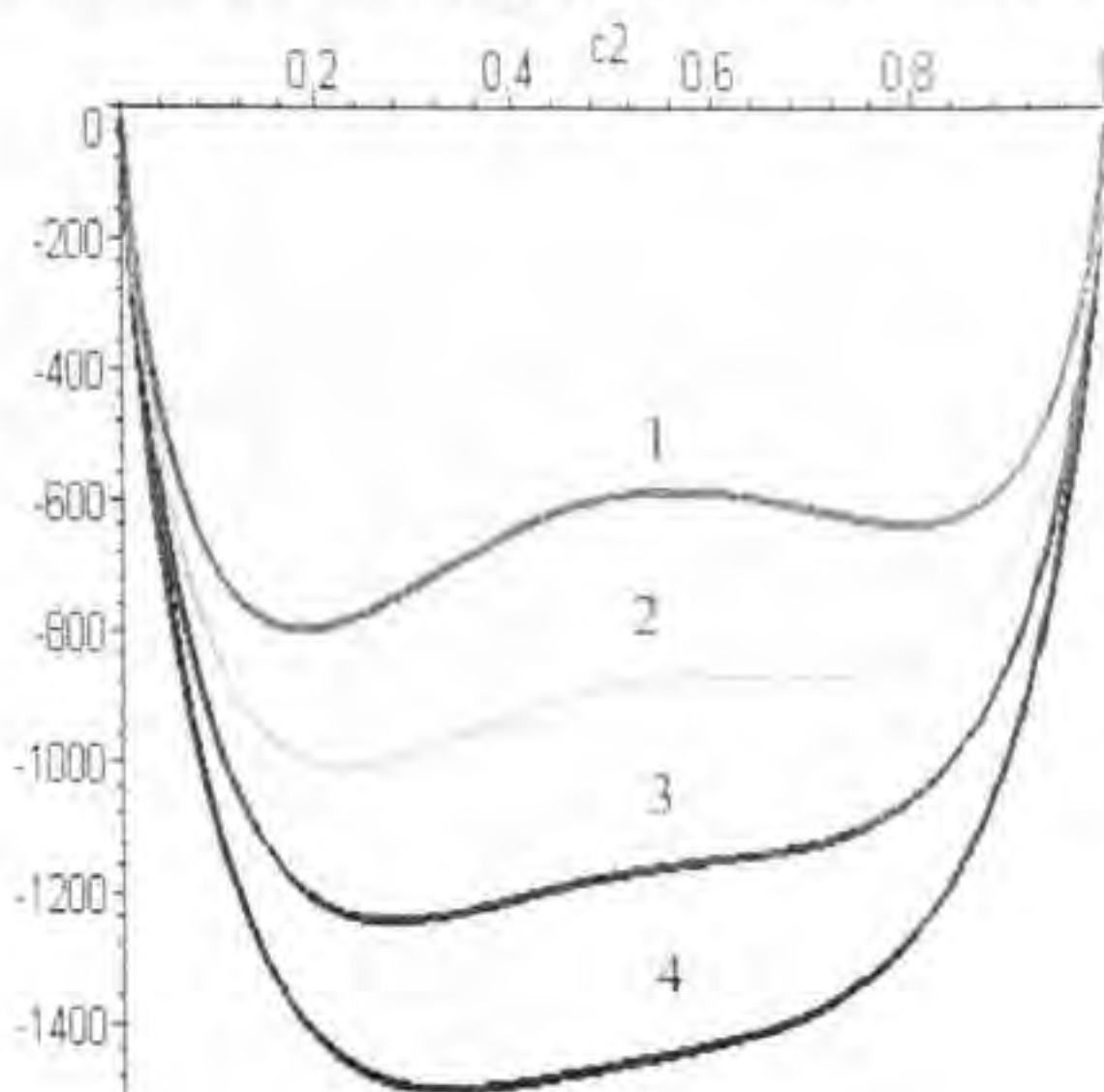


Рис.1. Концентраційна залежності $\Delta G(C_2)$ для системи Li-Na: 1 – $T=550\text{K}$, 2 – $T=600\text{K}$, 3 – $T=650\text{K}$, 4 – $T=700\text{K}$.

На рис.2 представлено результати теоретичного розрахунку діаграми стану для бінарної системи Li-Na у порівнянні з експериментальними даними роботи [3].

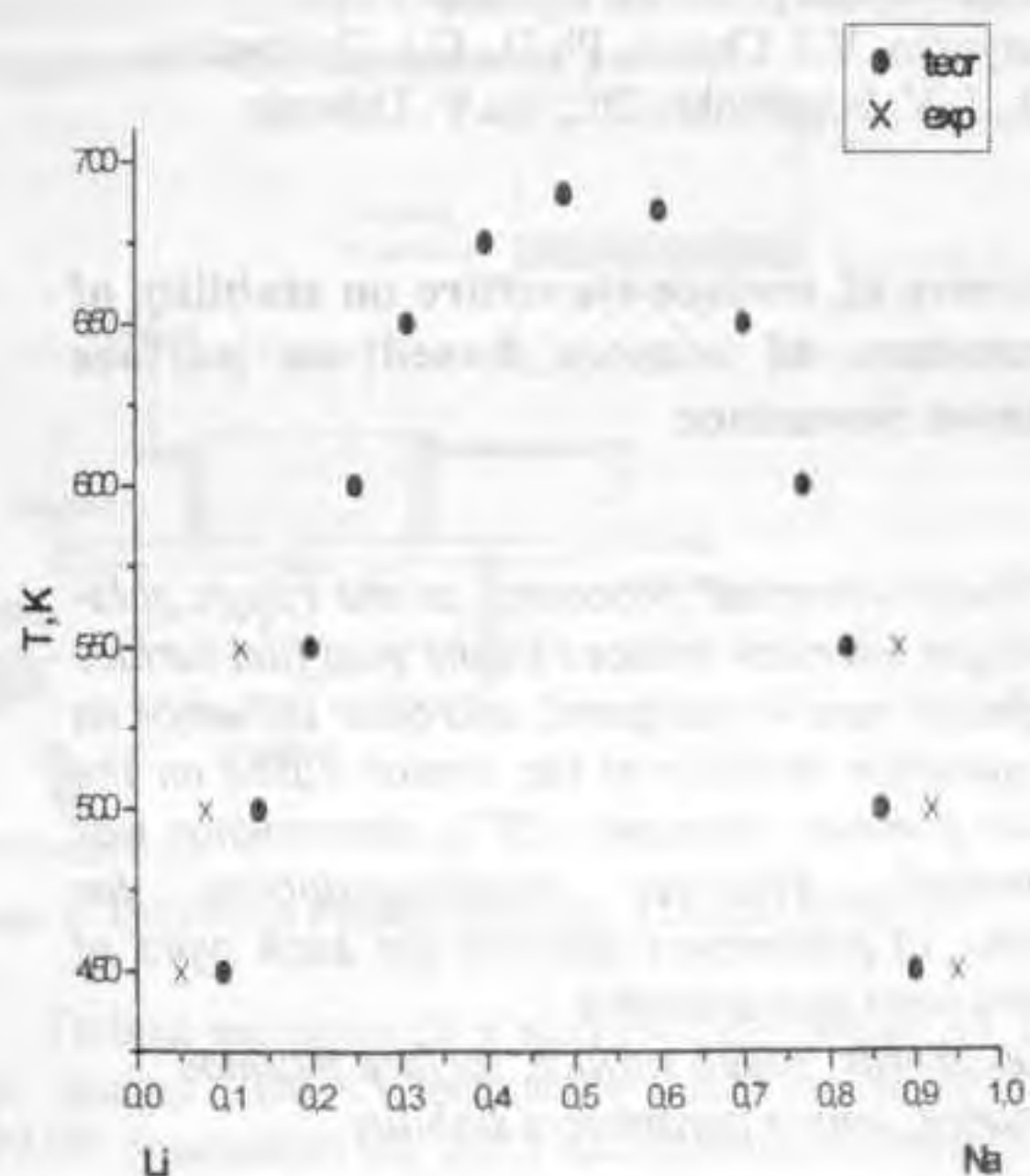


Рис.2. Діаграма стану сплаву Li-Na; x – експериментальні дані роботи [3].

З рисунка 1 видно, що концентраційна залежність відносної інтегральної вільної енергії Гіббса для бінарної системи Li-Na має специфічний S-подібний вигляд, що віддзеркалює тенденцію сплаву до розшарування до певної температури T_k , при збільшенні температури поведінка ΔG стає монотонною.

Висновки

- У рамках методу псевдопотенціалу отримано аналітичні вирази для ΔH і $\Delta V/V_0$ як функції різниці величин однорідної частини електронної густини компонентів, які утворюють сплав. Із аналізу розрахунків випливає, що при близькому значенні величин однорідних частин електронної густини, величини ΔH і $\Delta V/V_0$ малі, тобто сплави близькі за властивостями до ідеальних розчинів.
- Проведені розрахунки концентраційної залежності вільної енергії Гіббса та діаграми стану для системи Li-Na узгоджуються з експериментальними даними.

Список використаної літератури

1. Шпак А.П., Куницький Ю.А., Федоров В.Є. Електронна структура та фізичні властивості твердих тіл, ч.1. – Київ, 2004. – 92с.
2. Харьков Е.И., Лысов В.И., Федоров В.Е. Физика жидких металлов. – К.: Вища школа, 1979. – 248с.
3. Эллиот Р.П. Структуры бинарных сплавов. – Металлургия, т.2, , 1970. – 427с.

Надійшла до редколегії 12.06.07

УДК 535.34

Лопатинський* А.М., Фесенко О.М.,
Лопатинська О.Г., Чегель В.І., к.ф.-м.н., с.н.с.,
Довбешко Г.І., к.ф.-м.н., с.н.с., Поперенко Л.В.,
д.ф.-м.н., проф., Ушенін Ю.В.

Вплив поверхневої структури на стабільність параметрів сенсорів на основі поверхневого плазмонного резонансу

Досліджено фізико-хімічні процеси на шорсткій поверхневій структурі „золото-рідина-газ“, викликані шорсткістю поверхні плівки золота, і виявлено їх вплив на стабільність дії сенсора, що базується на явищі поверхневого плазмонного резонансу (ППР). Надано практичні рекомендації щодо підвищення стабільності параметрів такого типу сенсорів.

Ключові слова: шорстка поверхня, поверхневий плазмонний резонанс, стабільність параметрів сенсора

A.M. Lopatynskiy*, O.M. Fesenko, O.G. Lopatynska, V.I. Chegel, Ph.D., G.I. Dovbeshko, Ph.D., L.V. Poperenko, Dr., Yu.V. Ushenin

Influence of surface structure on stability of parameters of sensors based on surface plasmon resonance

Physico-chemical processes on the rough gold-liquid-gas interface induced by the gold film surface roughness were investigated, and their influence on the operation stability of the sensor based on the surface plasmon resonance (SPR) phenomenon was determined. Practical recommendations for increase of parameters stability for such types of sensors were also provided.

Key Words: rough surface, surface plasmon resonance, sensor parameters stability

*E-mail: lop2000@ukr.net

Вступ

Стабільність роботи сенсорів є одним з найважливіших їх параметрів. Це не в останню чергу стосується оптоелектронних сенсорів на основі поверхневого плазмонного резонансу (ППР), де в якості чутливої поверхні використовуються тонкі плівки високопровідних металів [1]. Поверхня ППР-сенсора є надзвичайно чутливою до процесів, які проходять на його поверхні та призводять до зміщення початкової позиції кута плазмонного резонансу. В силу того, що основним використанням ППР-сенсорів є дослідження біомолекулярних взаємодій в рідинному середовищі, фізико-хімічні процеси на межі поділу високопровідний метал-рідина викликають неабияку зацікавленість [2-4].

Серед найбільш дієвих процесів, що визначають стабільність ППР-сенсорів, можна назвати адсорбційні та електрохімічні. Використання в експериментах високоочищеної дистильованої води підвищує сенсорну стабільність. Та навіть за таких умов в воді присутні нерозчинні залишки неорганічних солей, які при певних обставинах можуть впливати на результат дослідження з використанням ППР. Це стосується в більшій мірі експериментів, в яких поверхня металу (в

нашому випадку плівки золота) є відкритою та може вступати в безпосередню взаємодію як з газовим, так і з рідинним середовищем. Зазвичай в ППР-експериментах з комірками відкритого типу виникає необхідність почергової заміни одного розчину на інший. При цьому незахищена поверхня золотої плівки може перебувати в 3-х умовних станах: 1 стан – суха поверхня в контакті з газовим середовищем (повітрям), 2 стан – контакт з рідиною, 3 стан – варіант, який є предметом нашого дослідження, коли, після контакту з рідиною та після видалення рідини з комірки, на поверхні золотої плівки залишаються на деякий час молекули рідини. Вивчення такого стану поверхні золотої плівки викликає зацікавленість з точки зору його здатності до активації фізико-хімічних процесів на межі поверхня плівки золота – наношар рідини, які безпосередньо впливають на стабільність параметрів ППР-сенсора. До таких процесів можна віднести різнопланову адсорбцію з рідини та з газового середовища, окислення безпосередньо поверхні плівки золота та електрохімічні реакції на ній, каталізатором яких є поверхня металу.

Експериментальна частина

Експерименти проводились з використанням ППР-приладу ПЛАЗМОН-4м в стаціонарному

режимі (за відсутності потоку рідини в вимірювальній комірці). Схема приладу та його сенсорного блоку з вимірювальною коміркою відкритого типу наведена на рис. 1.

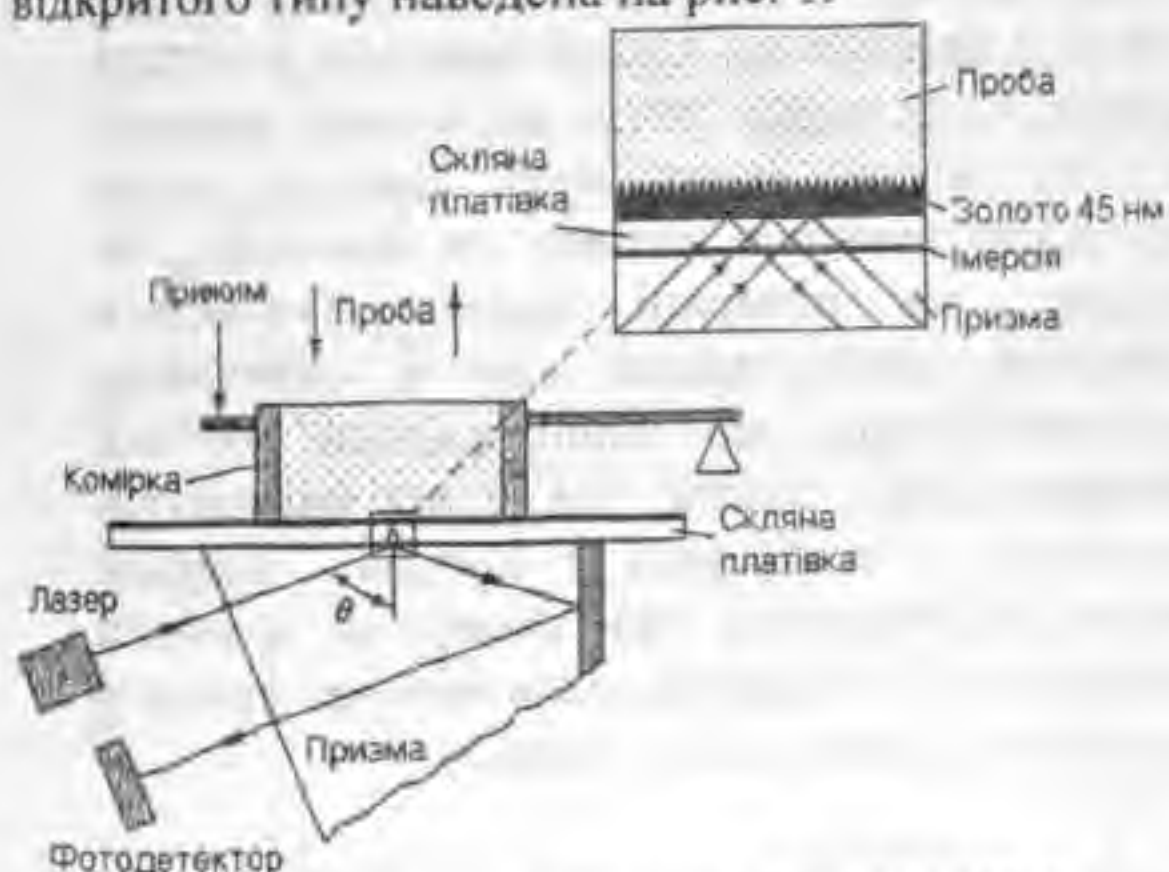


Рис. 1. Оптична схема приладу ПЛАЗМОН-4м.

Плівка напиленого в вакуумі (10^{-6} мм рт. ст.) на скляну (ВФ-1) підкладку золота чистоти 999,99 товщиною 45 нм з адгезійним підшаром хрому товщиною до 5 нм використовувалась в якості носія плазмонних коливань. ППР-експерименти проводились в повітряному середовищі та в атмосфері очищених газів – азоту та аргону. В якості рідинного середовища використовувались бідистильована вода, фосфатний буфер, високоочищені етиловий спирт та гексан. Почергова зміна рідинного середовища на газове виконувалась за допомогою сфлєпера. Інфрачервоні (ІЧ) спектри поглинання в області $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ в геометрії на відбивання були зарєстровані на фур'є-спектрометрі IFS-48 фірми Bruker, Німеччина. Обробка спектрів і розклад складних смуг на компоненти виконано за допомогою програми Opus-5.2. Осадження молекул гуаніну на Au/SiO₂-підкладки та підкладки з CaF₂ відбувалося з водного розчину.

Результати та обговорення

Вважається, що золото як метал не володіє чітко вираженими каталітичними властивостями, подібно Pt, Ni, Fe та іншим металам. Та з погляду на те, що поверхня напиленої в вакуумі золотої плівки товщиною 35-60 нм (яка використовується для збудження поверхневих плазмонів), має типовий мікрорельєф шорсткої поверхні (рис. 2), вона виявляє підвищені каталітичні властивості [5,6]. Влив поверхневого рельєфу плівок на каталітичні властивості деяких металів, таких як Pt, вже достатньо вивчено [7]. Каталітичний вплив наноструктур із золота останнім часом стає важливим предметом досліджень з погляду на

стрімке розширення кола застосувань плівкового та колоїдного золота в галузі нанобіохімії.

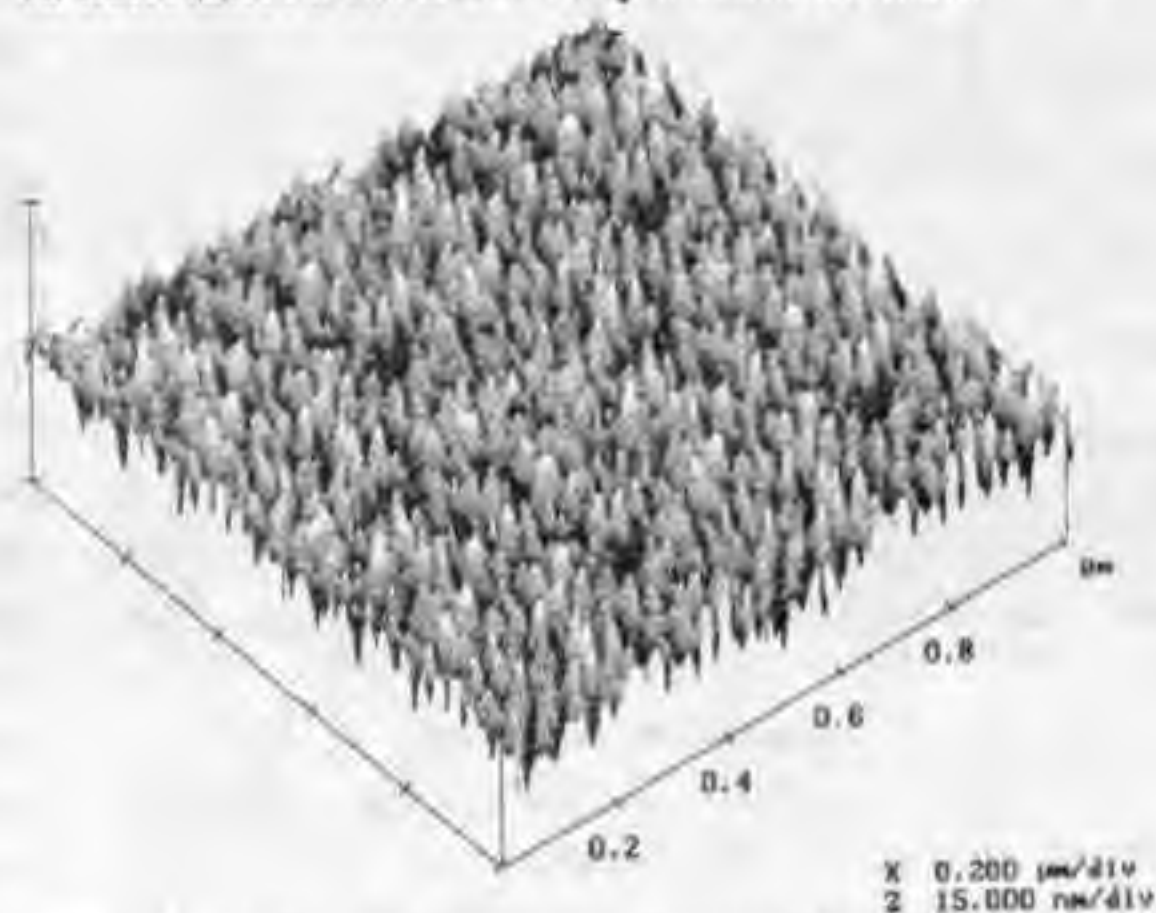


Рис. 2. АСМ-зображення поверхні 45 нм плівки золота з 5 нм адгезійним підшаром хрому.

Теоретично обґрунтованим є механізм підсилення оптичних переходів нанорозмірними об'єктами з високопровідних металів [8,9], на якому базується метод підсилення шорсткою металевою поверхнею інфрачервоного поглинання (SEIRA) [10,11]. Ефект відомий як для оптичних переходів в адсорбованих молекулах (комбінаційне розсіяння світла, люмінесценція, ІЧ поглинання), так і для процесів, що не залежать від наявності молекул на поверхні металу (наприклад, генерація другої гармоніки). Пояснення ефекту містить декілька механізмів, але виділяють основні: 1) збільшення електромагнітного поля біля шорсткої металевої поверхні або острівцевих металевих плівок, 2) зростання дипольного моменту переходу адсорбованих молекул тощо. Застосування методу SEIRA дає можливість збільшити ймовірність переходів у інфрачервоному діапазоні довжин хвиль та виявити ряд спектральних структурних особливостей біологічних молекул. Проведені нами SEIRA-вимірювання молекул гуаніну продемонстрували, що фактор підсилення поглинання на шорсткостях плівки золота для коливань різних молекулярних груп є не нижчим показника, що потрапляє в інтервал значень від 3 до 10 (рис. 3).

Один з механізмів SEIRA базується на зростанні напруженості електричного поля на вістрях рельєфу, або на наноструктурах, розмір яких не перевищує 3 нм [8]. Цій розмірності цілком відповідає структура рельєфу для напиленої в вакуумі плівки золота з товщиною, оптимальною для ППР-вимірювань. Необхідно зазначити, що розглянутий ефект підсилення стає

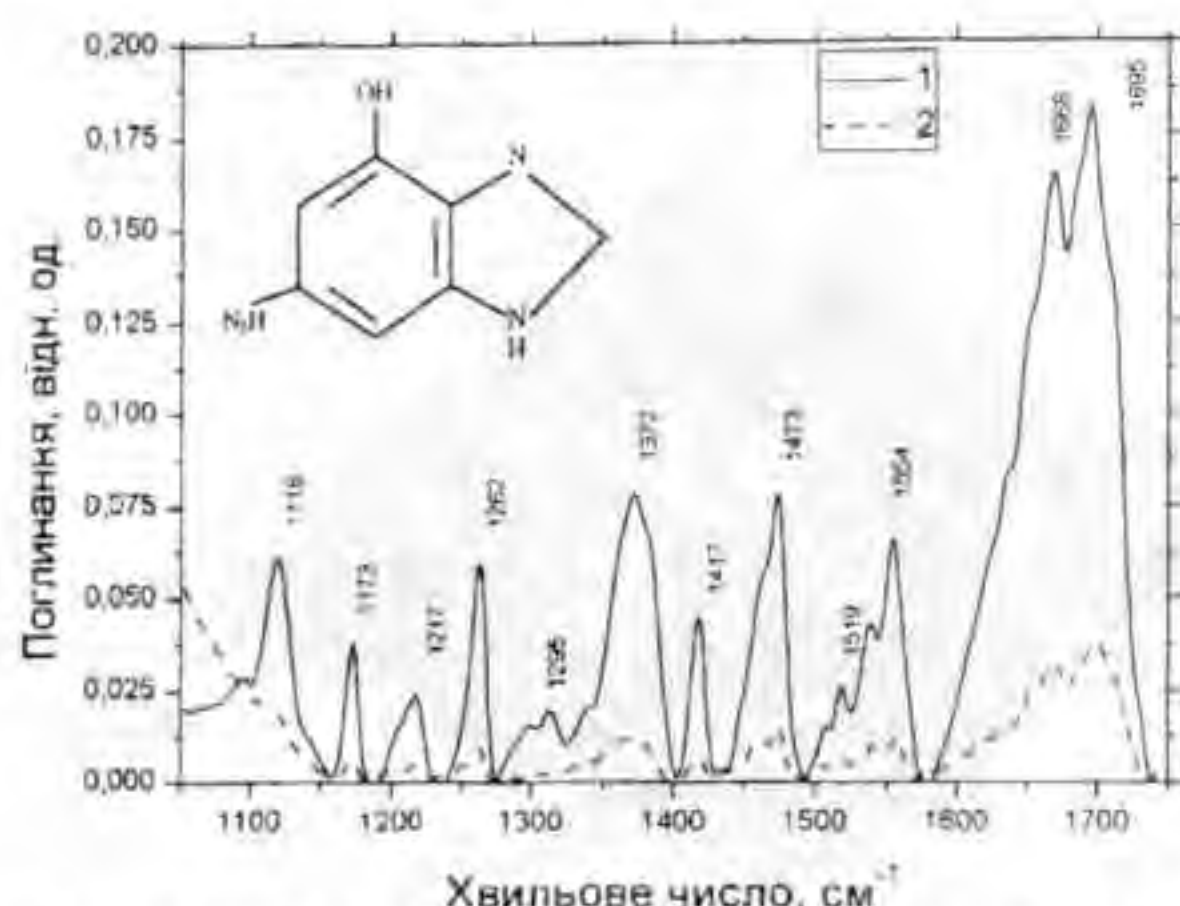


Рис. 3. SEIRA (1) та FTIR (2) спектри гуаніну, отримані шляхом його осадження на скляній підкладці з напиленою плівкою золота (350 Å) і адгезійним шаром Cr (50 Å) та на CaF_2 підкладці відповідно [12].

ще більшим в умовах плазмонного резонансу. Такі локальні підсилення напруженості електричного поля, викликані електронами провідності, можуть розглядатися до деякої міри як центри адсорбції речовини на поверхні металу. За відсутності рідини на поверхні плівки золота можуть адсорбуватися молекули зі складу газового середовища, а також присутні у ньому нанорозмірні частинки органічних сполук тощо. Подібна адсорбція органічних наночастинок на щойно напилену в вакуумі плівку золота призводить до швидкої гідрофобізації її поверхні на повітрі, хоча відразу після напилення така поверхня є гідрофільною.

В умовах присутності значної кількості рідини чи біологічних шарів, які щільно покривають чутливу поверхню сенсора, електрохімічні процеси на межі поділу золото-рідина призводять до створення подвійного шару Гуї-Гельмгольца-Штерна, чим забезпечується стабілізація параметрів сенсора в часі. Подальші процеси на поверхні металу в такому випадку головним чином залежать від характеристик розчину – рН-показника, ступеня іонності, концентрації розчинених реагентів тощо. При цьому кутове зміщення позиції плазмонного резонансу (ППР-відгук) залежить від сумарної дії зазначених факторів.

На відміну від попереднього випадку, при почерговій дії на плівку золота рідини та газового середовища спостерігається інтенсивна взаємодія атомів поверхневого шару металу з залишковою нанорозмірною плівкою рідини на ньому. Така взаємодія на вістрях поверхневого мікрорельєфу відбувається в умовах високої

напруженості електричного поля. Градієнт напруженості поля по поверхні мікрорельєфу плівки золота створює умови для протікання електрохімічних окислювально-відновлювальних процесів в середовищі адсорбованої на поверхні речовини. Слід підкреслити, що згадані процеси в нашому випадку мають місце лише за умови присутності залишків рідини на поверхні. Як результат, на поверхні золота з'являється додатковий молекулярний шар з оптичними характеристиками, що відрізняються як від параметрів шару золота, так і від параметрів оточуючого середовища. Кутова позиція мінімуму ППР-сигналу при цьому, як правило, зміщується в бік більших кутів падіння світла з варіацією величини самого сигналу.

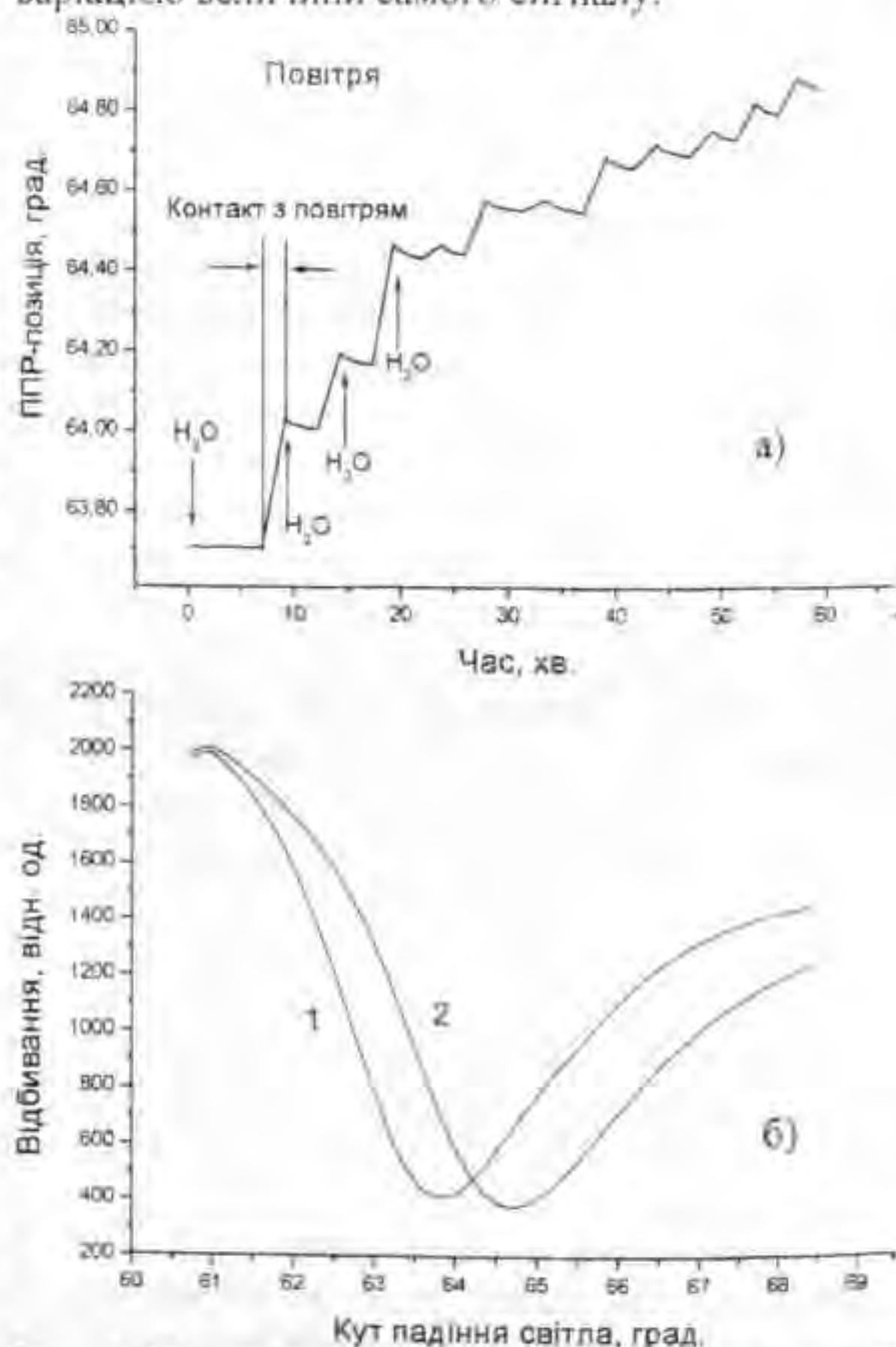


Рис. 4. Кінетична характеристика кутової позиції мінімуму ППР-сигналу при почерговій зміні середовища за типом вода-повітря-вода на плівці золота (а) та ППР-криві до (1) та після закінчення (2) експерименту (б).

На рис. 4а наведена кінетична характеристика ППР-позиції при почерговій зміні середовища за типом вода-повітря-вода. На рис. 4б наведені ППР-криві до та після закінчення експерименту, які демонструють відповідні зміни оптичних параметрів

приповерхневого шару. Зміна оточуючого газового середовища з повітря на азот не тільки не призупиняє виникнення спостережуваного явища, а, навпаки, призводить до ще більшого правостороннього зміщення позиції мінімуму ППР-сигналу (рис. 5a) та фактичної деградації ППР-кривої (рис. 5б).

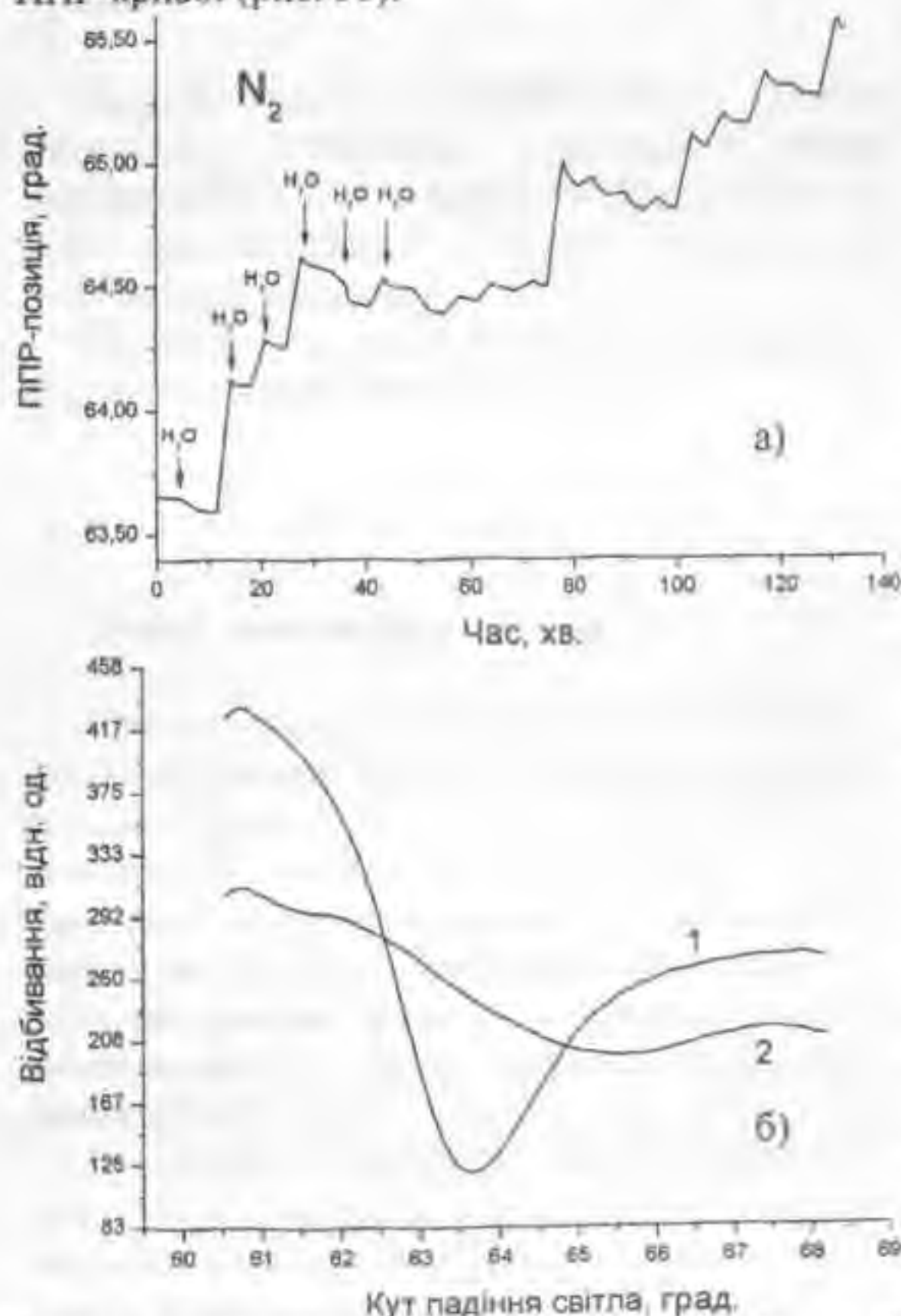


Рис. 5. Кінетична характеристика кутової позиції мінімуму ППР-сигналу при почерговій зміні середовища за типом вода-азот (у газоподібному стані)-вода на плівці золота (а) та ППР-криві до (1) та після закінчення (2) експерименту (б).

Подібні тенденції стосовно цього ефекту спостерігаються також і в атмосфері аргону, що спонукає зробити висновок про слабку залежність зазначеного ефекту від наявності кисню в оточуючому середовищі. Не вносить значних змін в реєстрацію ефекту і заміна рідини (води) на фосфатний буфер, етиловий спирт чи гексан. При цьому для всіх випадків після закінчення експерименту візуально спостерігається осадовий шар з неоднорідними відтінками в зоні контакту поверхні плівки золота з рідиною.

Найбільш вірогідним поясненням досліджуваного явища, як вже зазначалося, є перебіг електрохімічних процесів на поверхні

золота в присутності залишків рідини. Каталітичних властивостей шорсткого шару напленої плівки золота виявляється достатньо для протікання окислювально-відновлювальних процесів на її поверхні. При цьому ще раз слід зазначити про присутність в експерименті адгезійного підшару хрому в структурі чутливого шару ППР-сенсора. Відомо, що каталітичні властивості хрому переважають над відповідними властивостями майже всіх інших металів. Більше того, при вакуумному термічному напленні саме структури Cr-Au (коли адгезійним підшаром є хром) спостерігається поява вкраплень хрому на поверхні плівки золота. Як результат, сумарний каталітичний ефект двох металів на тлі значної шорсткості поверхні плівки і призводить до спостережуваного явища.

Висновки

Проаналізовано ефект зміщення кута плазмонного резонансу в сторону більших кутів падіння світла (низьких частот плазмонного резонансу) при багатократній почерговій циклічній заміні рідини (вода, фосфатний буфер, етиловий спирт, гексан)-газове середовище (повітря, азот, аргон) і встановлено його незалежність від типу використаних рідини чи газового середовища. Пояснення такого ефекту базується на розгляді електрохімічних процесів на шорсткій високопровідній металевій поверхні сенсора в умовах виникнення ППР.

В якості практичної рекомендації запропоновано уникнення в процесі ППР-вимірювань почергової заміни рідини-повітря-рідини. Для підвищення стабільності параметрів ППР-сенсора необхідно зменшувати шорсткість поверхні напленої плівки золота шляхом її термічного відпалення. Також не слід виключати можливість заміни адгезійного підшару хрому на підшар з іншого матеріалу, що володіє менш вираженими по відношенню до хрому каталітичними властивостями, при створенні нових типів ППР-сенсорів.

Список використаних джерел

1. Malmqvist M. Biospecific interaction analysis using biosensor technology // *Nature*. – 1993. – Vol. 261. – P. 186-187.
2. Garland J.E., Assionghon K.A., Pettit C.M. and Roy D. Surface plasmon resonance transients at an electrochemical interface: time resolved measurements using a bicell photodiode // *Analytica Chimica Acta*. – 2003. – V. 475, Issues 1-2. – P. 47-58.

3. *Loster M. and Friedrich K.A.* Angle-dependent infrared absorption spectroscopy at electrode/electrolyte interfaces // *Surface Science*. – 2003. – V. **523**, Issue 3. – P. 287-297.
4. *Jory M.J., Bradberry G.W., Cann P.S. and Sambles J.R.* Surface-plasmon opto-electrochemistry // *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 1996. – V. **35**, Issues 1-3. – P. 197-201.
5. *Mattos-Costa F.L., de Lima-Neto P., Machado S.A.S. and Avaca L.A.* Characterisation of surfaces modified by sol-gel derived RuIrI-xO_2 coatings for oxygen evolution in acid medium // *Electrochimica Acta*. – 1998. – V. **44**, Issues 8-9. – P. 1515-1523.
6. *Поперенко Л.В., Філатов Ю.Д.* Технологія обробки оптичних поверхонь: навчальний посібник для студентів фізичного факультету. – К.: Видавничо-поліграфічний центр „Київський університет”, 2004. – 166 с.
7. *Solina D.M., Cheary R.W., Swift P.D., Dligatch S., McCredie G.M., Gong B. and Lynch P.* Investigation of the interfacial structure of ultra-thin platinum films using X-ray reflectivity and X-ray photoelectron spectroscopy // *Thin Solid Films*. – 2000. – V. **372**, Issues 1-2. – P. 94-103.
8. *Kosobukin V.A.* Effect of enhancement of external electric field near metal surface and its manifestation in spectroscopy // *Surface Phys., Chem., Mech.* – 1983. – 12:5-20 (Russ.).
9. *Bondar V.V., Kuryk M.V.* // *Journal of Experimental and Theoretical physics*. – 1980. – 78(1). – P. 94-99.
10. *Tomaselli V.P., Rivera R., Edewaard D.C., Molier K.D.* // *Applied Optics*. – 1981. – 20(22). – P. 3961-3967.
11. *Dovbeshko G.I., Chegel V.I., Gridina N.Y., Repnytska O.P., Shirshov Y.M., Tryndiak V.P., Todor I.M., Solyanik G.I.* Surface enhanced infrared absorption of nucleic acids from tumour cells: a FTIR reflectance study // *Biospectroscopy*. – 67(6). – P. 470-486.
12. *Dovbeshko G.I., Fesenko O.M., Shirshov Yu.M., Chegel V.I.* The enhancement of optical processes near rough surface of metals // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. – 2004. – V. **7**, № 4. – P. 411-424.

Надійшла до редколегії 27.04.07

УДК 532.36.01

Макаренко О.В., канд. фіз.-мат. наук, доцент,
Євтушенко А.Ю. студент

Індикатриса розсіювання світла еталонним зразком

Запропонована теоретична модель розрахунку індикатрис розсіювання зразка виготовленого зі скла марки MC20, з наступним його використанням в якості еталону при калібруванні приладів.

Ключові слова: розсіяне світло, індикатриса розсіювання, теорія переносу

O.V. Makarenko, PhD,
A.J. Evtushenko student,

Scattering indicatrix of light by standard sample

The theoretical model of calculation of indicatrices of a dispelling of an exemplar made of a glass of brand MC-20 is offered, with its subsequent use in as etalon at gauging devices

Key Words: sparse light, scattering indicatrix, transport theory.

*E-mail: almaker@univ.kiev.ua

При визначенні характеристик поверхонь по розсіювальній здатності, було встановлено, що в природі не існує речовин які б розсіювали згідно закону Ламберта [1-2]. Ідеальний розсіювач – зразок, що розсіює все світло, що на нього потрапляє рівномірно по всім напрямкам. В якості еталонних зразків використовують скло, тефлони, керамічні плитки [3-4].

Враховуючи відмінності способів розсіювання для різних поверхонь, міжнародною комісією по освітленню було стандартизовано чотири схеми їх вимірювання, за якими були виміряні і зафіксовані характеристики розсіювання для спеціально створених еталонів. Проте дані отримані з використанням цих схем не характеризують в повній мірі розсіювальні властивості, і тому створені еталони не можуть бути використані для визначення коефіцієнтів розсіювання при довільній схемі вимірювання. При відомій індикатрисі розсіювання можливо визначити коефіцієнти розсіювання при нестандартних схемах проведення вимірів використавши інтегрування по відповідних просторових кутах.

В ході роботи були виміряні індикатриси розсіювання скла марки MC20 з шорсткою поверхнею. Цим досягалась можливість використання виміряних еталонів для гоніофотометричної калібровки та можливість знайти аналітичне співвідношення для визначення коефіцієнтів розсіювання

Установка на якій проводились виміри була зібрана на основі гоніометра Г-5. При

реєстрації застосовувався метод синхронного детектування.

Світловий потік від гелій-неонового лазера (632,8нм) розширювався за допомогою оптичної системи, колімувався і направлявся на предмет під певним кутом. Розсіяне світло збиралось об'єктивом настроєним на нескінченність, щоб реалізувати схему спостереження у паралельних пучках, і проектувалось на фотоприймач. Сигнал на виході синхронного детектора контролювався вольтметром. Внаслідок того, що світлова характеристика синхронного детектора лінійна сигнал на виході синхронного детекторів пропорційний світловому потоку, який попадає на фотоприймач, тому його виражають в умовних одиницях

Для отримання абсолютних значень лазерний пучок діафрагмувався (щоб не вивести з ладу прилад) і направлявся прямо на фотоприймач, фіксувалося значення напруги на виході синхродетектора. Після цього не змінюючи діаметра діафрагми пучок направлявся на зразок. При цих умовах були виміряні значення напруги на виході синхронного детектора для певних кутів спостереження та опромінення, які використовувались при попередньому вимірюванні індикатриси. Враховуючи ці дані, можна отримати індикатриси розсіювання в абсолютних величинах.

Для теоретичної оцінки форми індикатриси використовувалась модель нескінченно

товстого шару речовини, розсіювання світла в якому описується рівнянням переносу:

$$\frac{dB(\bar{\ell})}{d\tau} = -B(\bar{\ell}) + \frac{\Lambda}{4\pi} \int_{4\pi} x(\gamma') B(\bar{\ell}') d\omega' \quad (1)$$

де $\tau = (k + \sigma)d\ell$ – оптична довжина, k – показник поглинання елементарного об'єму, σ – показник розсіювання елементарного об'єму, а $\Lambda = \sigma / (k + \sigma)$ – ймовірність виживання фотона.

Шар речовини зразка можна вважати нескінченно товстим, так як ефективний об'єм, в якому відбувається розсіювання набагато менший, ніж товщина зразка.

У використаній моделі вважається, що індикатриса розсіювання елементарного об'єму має вигляд $x(\gamma) = 1 + x_1 \cos \gamma$, а ефектами розсіювання на поверхні нехтують. Вперше задача про дифузне розсіювання нескінченно товстого шару для індикатрис такого типу була розв'язана Амбарцумяном [5-6]. Розв'язок цієї задачі має вигляд:

$$\rho(\eta, \xi, \psi) = \frac{\Lambda}{4(\eta + \xi)} [\varphi_0^0(\eta) \varphi_0^0(\xi) - x_1 \varphi_1^0(\eta) \varphi_1^0(\xi) + x_1 \varphi_1^1(\eta) \varphi_1^1(\xi) \cos \psi] \quad (2)$$

де φ_0^0 , φ_1^0 , φ_1^1 – деякі допоміжні функції,

для яких Яновицьким [7] були запропоновані наближені формули:

$$\begin{aligned} \varphi_0^0(\eta) &= \frac{[(1-\Lambda)(2-\Lambda x_1 \eta) + a](1+2\eta)}{[2(1-\Lambda) + a](1+a\eta)} \\ \varphi_1^0(\eta) &= \frac{(1-\Lambda)(2+a)(1+2\eta)\eta}{[2(1-\Lambda) + a](1+a\eta)} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\varphi_1^1(\eta) = \frac{(1+2\eta)\sqrt{1-\eta^2}}{1+a_1\eta}$$

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{(1-\Lambda)(4-\Lambda x_1)} \\ \text{де } a_1 &= \sqrt{4 - \frac{3}{2}\Lambda x_1} \end{aligned} \quad (4)$$

Отримані експериментальні результати при різних кутах освітлення та результат розрахунку згідно запропонованої моделі приведено на рис. 1, 2, 3. Ці залежності розраховані для значень коефіцієнтів:

$$\Lambda = 0,99955;$$

$$x_1 = 1.$$

Падаючий та розсіяний промені лежать в площині падіння

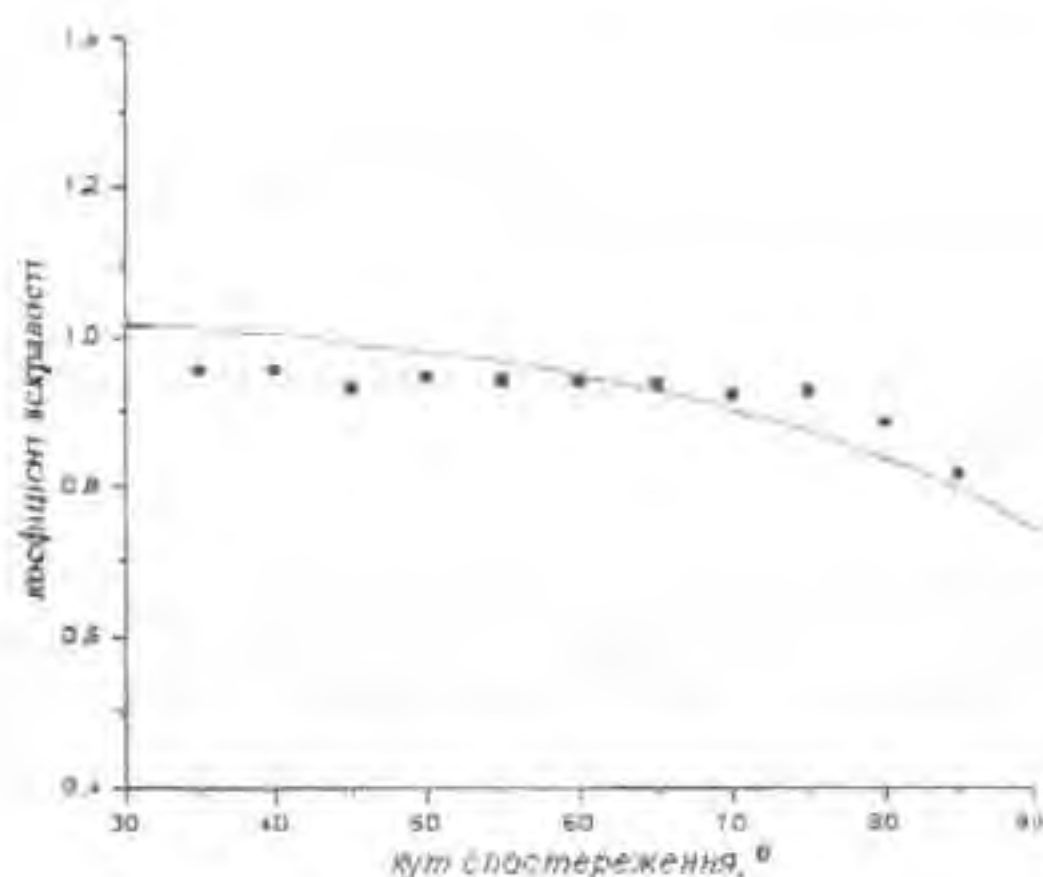


рис.1 Індикатриса розсіювання скла MC-20 при куті падіння 0° ;

• - експериментальні результати;
— - дані розрахунків

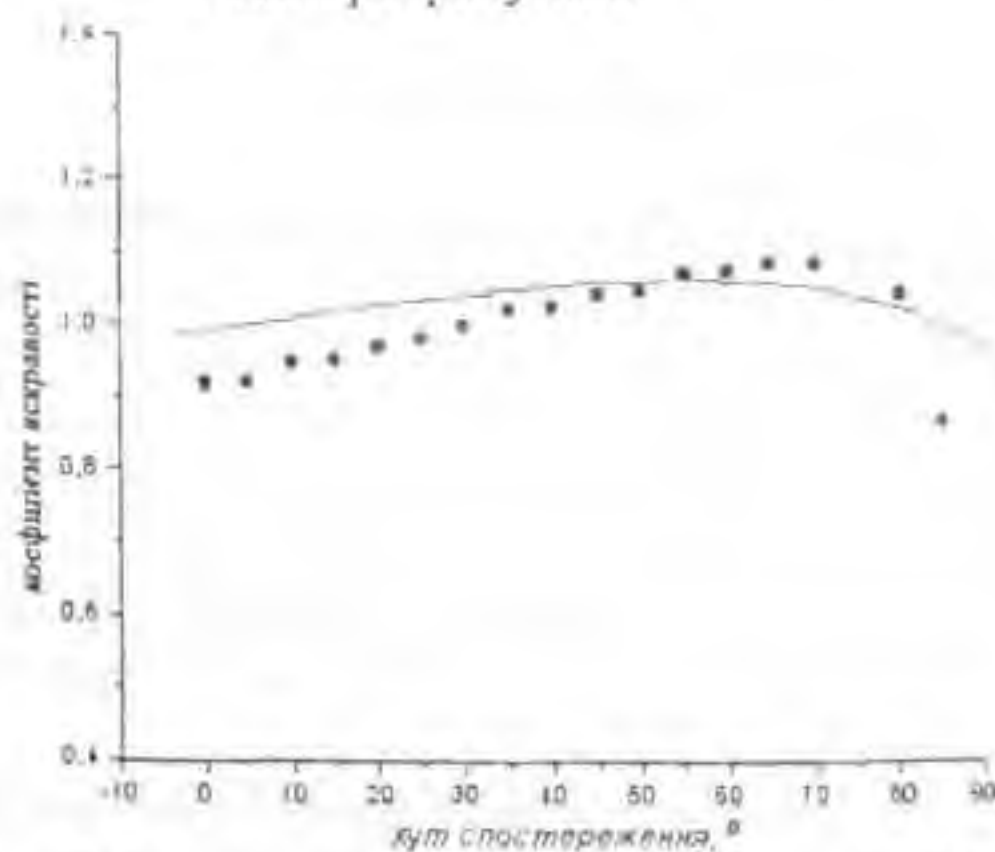


Рис.2 Індикатриса розсіювання скла MC-20 при куті падіння 35° ;

• - експериментальні результати;
— - дані розрахунків

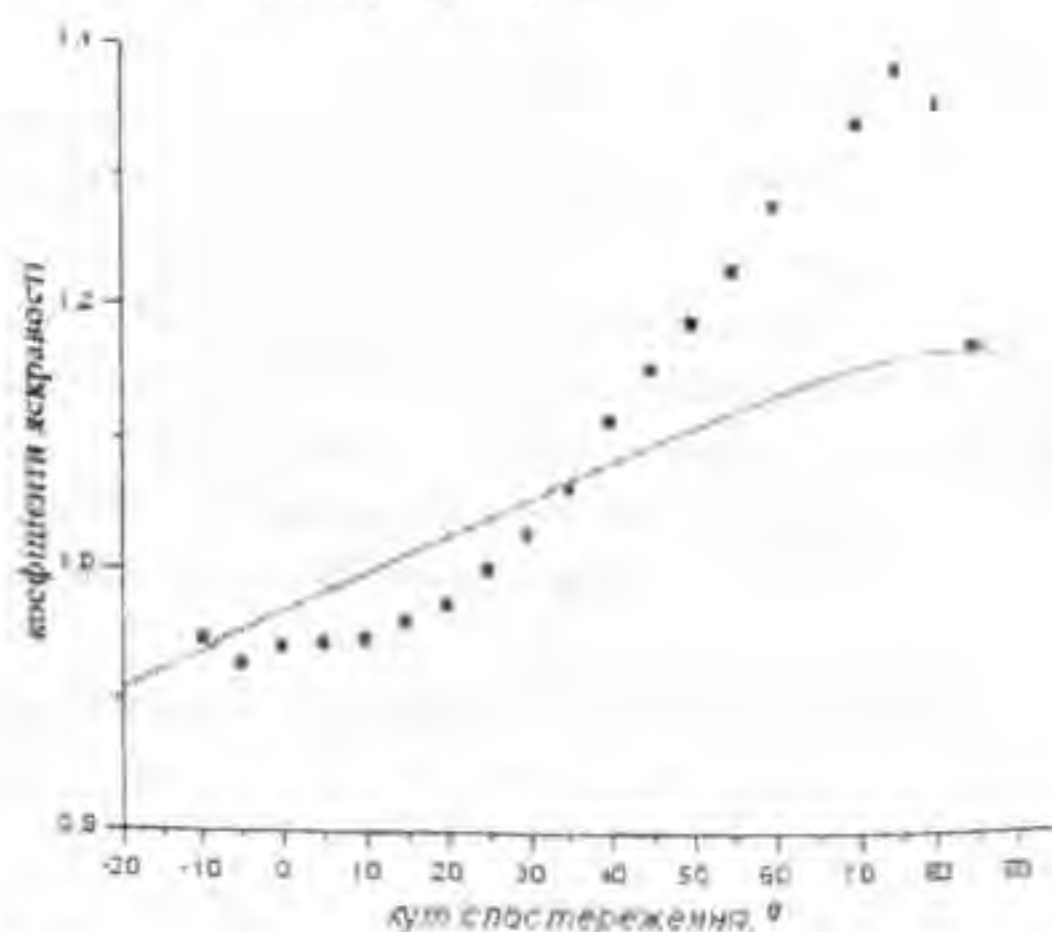


Рис.3 Індикатриса розсіювання скла MC-20 при куті падіння 45° ;

• - експериментальні результати;
— - дані розрахунків

Як видно з графіків отримані теоретичні залежності якісно повторюють хід експериментальних залежностей. Добрий збіг спостерігається між теоретичними і експериментальними даними для малих кутів падіння. При збільшенні кута падіння розходження між теорією і експериментом збільшується. Останнє може бути пов'язане з тим, що індикатриса розсіювання елементарного об'єму $x(\gamma) = 1 + x_1 \cos(\gamma)$ являється відносно слабковитягнутою індикатрисою. Використання більш сильно витягнутими індикатрисами може усунути відповідні розходження.

Розрахунки при більш витягнутих індикатрисах передбачають врахування більшої кількості членів розкладу в ряд (в даних розрахунках використовувались лише перші два). Використання такої моделі пов'язане з певними труднощами. Через відсутність аналітичного розв'язку, для таких індикатрис, для вирішення задачі слід використовувати чисельні методи.

Проте, використання навіть такої недосконалої моделі дозволяє при малих кутах освітлення розраховувати індикатрису розсіювання зразка за результатами окремих гоніофотометричних вимірів. В свою чергу, це дає можливість врахувати неламбертівський характер розсіювання еталонних зразків та провести їх гоніофотометричне калібрування.

Перспективним являється використання замість індикатрис $x(\gamma) = 1 + x_1 \cos(\gamma)$ індикатрис Хен'ї-Грінштейна:

$$x(\gamma) = \frac{1 - g^2}{4\pi(1 + g^2 - 2g \cos \gamma)^{1/2}} \quad (5)$$

$$g = -1..1$$

Або індикатрис Гегенбауера:

$$x(\gamma) = \frac{K}{(1 + g^2 - 2g \cos \gamma)^{a+1}} \quad (6)$$

$$K = ag \frac{(1 - g^2)^{2a}}{\pi[(1 + g^{2a}) - (1 - g^{1a})]}$$

частинним випадком якої являється, при

$$\alpha = \frac{1}{2}, \text{ індикатриса Хен'ї-Грінштейна.}$$

Список використаних джерел

1. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. - М.: Мир, 1986. - 664с. Фішюненко-Бородич М.М. Теория упругости. 4-ое изд. - М.: Физматгиз, 1959. - 364 с.
2. Гуминецкий С. Г., Житарюк В. Г. Структура диффузной составляющей оптического излучения, отраженного шероховатыми поверхностями // ЖПС. -1996. -Т. 63, № 6. -С. 1040-1044
3. Войшвилло Н.А. Оптические характеристики отражающих светорассеивающих стекол, применяемых для изготовления стандартных образцов цвета // Изм. техн. -1985. -№7. -С. 24-26.
4. Nimeroff I. Analysis of Goniophotometric Reflection Curves // J. Res. Natl. Bur. Stand. - 1952. - Vol. 48, No. 6. - P. 441-448.
5. Амбарцумян В. А. К вопросу о рассеянии света атмосферами планет // Астроном. журн. -1942. -Т. 19, № 5. -С. 30-41.
6. Амбарцумян В.А. К вопросу о диффузном отражении света мутной средой // ДАН СССР. -1943. -Т. 38, № 8. -С. 257-261.
7. Яновицкий Э. Г. Диффузное отражение излучения плоским слоем мутной среды бесконечно большой оптической толщины // Изв. вузов, Физика -1962. - № 1. -С. 98-102.

Надійшла до редколегії 15.06.07

УДК 539.194

Охріменко Б.А., доктор фіз.-мат. наук,
професор, Яблочкова К.С., аспірант

Оцінка параметрів двохямного потенціалу для молекули води в рідкому стані.

Розроблено методику опису повносиметричного деформаційного коливання ω_2 молекули води у рідкому стані. Цей метод дозволяє вибрати потенціал для моделювання коливання ω_2 та оцінити його параметри, включно з величиною бар'єру лінеаризації молекули води.

Ключові слова: двохямний потенціал, нормальні коливання, ангармонізм коливань.

Okhrimenko B.A., Doctor of phys-math. sciences,
professor, Yablochkova K.S. PhD student

Estimation of the 2-well potential parameters for the water molecule in liquid state.

A new method for describing the totally symmetric deformation vibration ω_2 of water molecule in liquid state is proposed. The method allows to choose the potential that simulates this vibration and to find its parameters, including the barrier of linearity for the water molecule.

Key Words: 2-well potential, normal vibrations, anharmonicity of vibrations

*E-mail: hao@univ.kiev.ua, yablochkova@yahoo.com

Вступ

В останні роки в літературі приділено велику увагу вивченню явища монодромії [1 – 7]. Зокрема, широко обговорюється питання оцінки висоти бар'єру лінеаризації молекули води. Такий розрахунок в літературі проводиться *ab initio* для вільної молекули води [1 – 4]. При сучасному стані обчислювальної техніки подібний розрахунок є практично неможливим для молекули у рідкому стані.

В зв'язку з цим актуальною проблемою є пошук методів оцінки висоти бар'єру лінеаризації молекули води у рідкому стані, що ґрунтуються на результатах розв'язання оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії.

Однак, за нашими даними, в літературі відсутні оцінки частоти інверсії молекули води через бар'єр лінеаризації – феномен, що є характерним, наприклад, для молекули NH_3 [8]. Видається дивним відсутність обговорення цього питання, оскільки врахування інверсійного подвоєння частот є важливим для інтерпретації обертально-коливальних спектрів молекули води.

Проведені в роботах [9, 10] розрахунки показали, що в газоподібному стані частота інверсії молекули води навіть в незбудженому коливному стані є помітною і становить 1.38 Гц. Аналогічні розрахунки були виконані і для інших гідридів 6-ї групи [11].

Точна оцінка частоти інверсії молекули через потенціальний бар'єр значною мірою залежить від правильності вибору потенціалу, що описує коливання, яке призводить до інверсії.

Так, наприклад, в роботах [9, 10], які розглядають обернену спектральну задачу для молекули води в рідкому та газоподібному станах, для опису коливання ω_2 було використано двохямний потенціал – модифікований потенціал Меннінга. Отримані за допомогою цього потенціалу значення висоти потенціального бар'єру задовільно узгоджуються з літературними даними [1, 2, 4], хоча і не збігаються з ними. Розходження між середньоарифметичним значенням бар'єру лінеаризації та отриманим нами значенням становить близько 10% [9, 10].

Зазначимо, по-перше, що пошук параметрів двохямного потенціалу в роботах [9 – 11] ґрунтується на результатах розв'язання оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії з урахуванням ангармонічності коливань. По-друге, частота інверсії залежить не лише від висоти бар'єру, а й від його форми.

Автори, які використовують методи *ab initio* для оцінки висоти бар'єру лінеаризації молекули води, зазначають, що ці методи є дуже чутливими до вибору відстані між атомами для лінійної конфігурації молекули води, а також недостатньо добре описують деформаційні коливання деяких молекул, включно з молекулою води [4].

З огляду на це представляється доцільним проведення роботи, що направлена на розробку методики відшукування дволямного потенціалу та аналіз результатів його застосування.

Оскільки в цій галузі найбільш ретельно вивчена молекула NH_3 , саме вона була нами використана в якості «еталонної» молекули з метою перевірки успішності різних методів пошуку дволямного потенціалу на основі розв'язання оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії.

Метод

Розв'язання оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії [9-15] N -атомної молекули спирається на формулу:

$$\hat{V} = \hat{M} \hat{L} \hat{\omega} \hat{L}^T \hat{M}, \quad (1)$$

де $\hat{V}$ - силова матриця, $\hat{M}$ - діагональна матриця мас атомів, що входять до складу молекули, матриця $\hat{L}$ визначає форму власних і невластних нормальних коливань молекули, $\hat{\omega}$ - діагональна матриця квадратів частот, як власних, так і невластних нормальних коливань молекули. Знаком тильда позначена операція транспонування. Усі матриці мають порядок $3N$.

Співвідношення (1) дозволяє знайти аналітичні вирази для всіх елементів силової матриці і встановити форми усіх коливань досліджуваної молекули.

Зазначимо, що внаслідок того, що матриця $\hat{\omega}$ містить як власні, так і невластні частоти коливання молекули, даний метод можна використовувати і для дослідження молекул у рідкому стані.

Форми повносиметричних коливань визначаються із міркувань симетрії не однозначно, з точністю до «параметрів форми», що введені у матрицю $\hat{L}$. В залежності від симетрії молекули кількість параметрів форми, що входять у матрицю $\hat{L}$ може бути різною [14]. В загальному випадку число параметрів форми дорівнює:

$$\Psi = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} n_{\alpha} (n_{\alpha} - 1), \quad (2)$$

де n_{α} - число нормальних коливань, що припадають на незвідне представлення Γ_{α} групи симетрії G .

Значення параметрів форми можна встановити, за допомогою прямої задачі коливальної спектроскопії, визначаючи власні значення матриці

$$\hat{D} = \hat{M}^{-1} \hat{V}, \quad (3)$$

де матриця $\hat{M}$ відповідає ізотопній модифікації досліджуваної молекули. Власні значення матриці $\hat{D}$ дорівнюють квадратам нульових частот ω_0' нормальних коливань досліджуваної молекули, які можна порівняти з літературними значеннями нульових частот для цієї молекули.

Вектор зсуву атомів з положення рівноваги $\vec{X}$ зв'язаний з вектором нормальних координат $\vec{Q}$ наступним співвідношенням:

$$\vec{X} = \hat{L} \vec{Q}. \quad (4)$$

Для моделювання кожного з коливань молекули використовується свій потенціал $V(Q_i)$, який найкращим чином відповідає формі цього коливання.

Потенціальна енергія молекули знаходиться як сума

$$V = \sum_i V(Q_i). \quad (5)$$

Розглянемо потенціали, якими описується кожне з чотирьох коливань молекули NH_3 .

Залежність потенціальної енергії від нормальної координати Q_1 , що відповідає повносиметричному валентному коливанню ω_1 , моделюється функцією Морзе:

$$V(Q_1) = D_1 (1 - e^{-\sigma_1 Q_1})^2. \quad (6)$$

Використовуючи відомий вираз для енергії коливальних станів

$$E_{1v} = \hbar \omega_{01} \left(v + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_{01} \chi_1 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (7)$$

і функцію Морзе знаходимо параметри потенціалу (6)

$$\omega_1 = \frac{E_{11} - E_{10}}{\hbar}, \chi_1 = \frac{\omega_{01} - \omega_1}{2\omega_{01}}, \quad D_1 = \frac{\hbar \omega_{01}}{4\chi_1}, \sigma_1 = \sqrt{2\chi_1 \omega_{01}} \quad (8)$$

Цей же потенціал використовується для нормальних координат Q_3 та Q_4 , що відповідають двічі виродженим коливанням ω_3 та ω_4 .

Параметри цих потенціалів також знаходяться за формулами (8).

З аналізу форми повносиметричного деформаційного коливання ω_2 випливає, що за умови великих амплітуд коливань можливою є інверсія молекули NH_3 через нестабільну конфігурацію симетрії D_{3h} . Тому для опису цього коливання доцільно використовувати певний двохямний потенціал.

У класичній роботі [8] в якості потенціалу для опису коливання ω_2 для молекули NH_3 застосовується наступний потенціал:

$$V_T(x) = a_1 \frac{1}{\cosh^4\left(\frac{x}{2\rho}\right)} + a_2 \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{x}{2\rho}\right)} \quad (9)$$

де a_1 і a_2 – константи, що вибираються з огляду на найкраще узгодження висоти бар'єру з експериментом, ρ – константа, що визначається приведеною масою молекули, x – координата, що визначає відстань між атомом азоту і площиною атомів водню.

Значення параметрів потенціалу визначалося за експериментальними значеннями розщеплення спектральних ліній, що виникають внаслідок інверсійного подвоєння частот.

У даній роботі запропоновано 3 інші модельні потенціали, що відповідають коливанню ω_2 . Особливість цих потенціалів полягає у поведінці у випадку великих z . На відміну від функцій (9) і (10), які при $z \rightarrow \infty$ виходять на плато, ці функції прямують до нескінченності. Перший з них – спрощений потенціал вигляду:

$$V_a(z) = V_a^0 \left[1 - \left(\frac{z}{z_0} \right)^2 \right]^2 \quad (10)$$

Тут V_a^0 – висота потенціального бар'єру, z_0 – положення центру мас молекули, z – відстань атому азоту від центру мас молекули.

Другий потенціал має вигляд:

$$V_1(z) = V_1^0 \left[\cosh\left(\varepsilon_1 \frac{z}{z_0}\right) - \cosh(\varepsilon_1) \right]^2 \quad (11)$$

Третій обраний потенціал має вигляд:

$$V_M(z) = V_M^0 \left(\frac{1}{\cosh^2(\varepsilon_2)} + \frac{1}{\cosh^2\left(\varepsilon_2 \frac{z}{z_0}\right)} \right) \quad (12)$$

Він представляє собою модифікований потенціал (9).

Для оцінки висоти бар'єру молекул було також використано модифікований потенціал Ньютона-Томаса [8]:

$$V_{NT}(z) = V_{NT}^0 \left(\frac{\varepsilon_3 - z^2}{\varepsilon_4 + z^2} \right)^2 \quad (13)$$

У (11) – (13) V_1^0 , V_M^0 , V_{NT}^0 , ε_1 – константи, а z_0 і z мають той же сенс, що і в (10).

Важливим питанням розгляду задачі є спосіб пошуку параметрів застосованих потенціалів. В даній роботі запропоновано декілька методів пошуку параметрів кожного з потенціалів. У кожному з них запропонований потенціал зіставляється з потенціалом Морзе, що розрахований за формулами (8) для коливання ω_2 .

У першому методі пошуку параметрів потенціалів, що пропонується в даній роботі (надалі "метод похідних") покладається, що другі та треті похідні потенціалів мають бути рівними другим і третім похідним потенціалу Морзе в точці мінімуму кривої.

В другому методі пошуку параметрів потенціалів (надалі "метод рівновіддалених точок") прирівнюються значення функцій модельних потенціалів і потенціалу Морзе у двох точках, що рівновіддалено розташовані на відстані $\pm \alpha z_0$ по обидві сторони від точки z_0 . Підбирається таке значення α , щоб висота бар'єра співпадала б з відомою.

В третьому методі (надалі "метод заданого рівня") параметри потенціалів знаходяться внаслідок наступних операцій: розраховується такий набір параметрів потенціалу Меннінга, щоб значення цієї функції співпадало б функцією потенціалу Морзе в двох точках, що лежать на кривій потенціалу Морзе на рівні β , який становить певний відсоток від значення потенціалу Морзе в точці $z = 0$. Далі, для різних значень β оцінюється висота потенціального бар'єра за отриманими наборами параметрів потенціалу. Обирається той набір потенціалів і, відповідно, той рівень, де б розрахована висота потенціального бар'єра дорівнювала б літературним даним значення висоти бар'єру для молекули NH_3 .

За обчисленими значеннями кожного з параметрів знаходиться висота потенціального бар'єру молекули NH_3 , яка порівнюється з літературними даними. Надалі з масиву запропонованих потенціалів і методів

знаходження параметрів потенціалів обираються ті, що дають в результаті найкраще узгодження з літературними даними щодо висоти бар'єру.

Додатковим методом контролю правильності обраного потенціалу може бути оцінка частоти інверсії Ω_i через потенціальний бар'єр, що для i -го коливального рівня молекули розраховується за відомою формулою:

$$\Omega_i = \frac{\omega_2}{\pi} e^{-I} \quad (14)$$

де $I = \frac{2\pi}{h} \int_{-z_i}^{z_i} \sqrt{2\mu(V(z_2) - E_{vi})} dz_2$, μ – приведена

маса молекули, $V(z_2)$ – модельний потенціал, E_{vi} – енергія i -го колювання, z_i – точка, де значення модельного потенціалу дорівнює енергії i -го коливального рівня.

Значення частоти інверсії для молекули NH_3 є відомим і може бути використане для оцінки правильності обраного бар'єру.

параметрів, що задовольняє вищезгаданим умовам, застосовується до молекули води у газоподібному і рідкому стані.

Метод похідних може бути безпосередньо застосований для молекули води як у газоподібному, так і рідкому станах. У випадку застосування методів рівновіддалених точок та заданого рівня до молекули води у газоподібному та рідкому станах застосовуються такий набір точок (i , відповідно, множник α) і такий рівень β , що відповідає найкращому узгодженню висоти бар'єра молекули NH_3 з літературними даними.

Відомі літературні дані щодо висоти бар'єру лінеаризації для молекули води у газоподібному стані дозволяють зробити додаткову оцінку вірності вибору потенціалу.

Таким чином запропонований алгоритм дозволяє знайти параметри потенціалів для молекули H_2O у вільному та рідкому станах і обрати найкращий з потенціалів для опису колювання ω_2 молекули води у рідкому стані.

Таблиця 1.

Параметри молекул H_2O і N_3H .

Молекула	ω_2 експериментальні частоти, cm^{-1}	ω_{02} частоти, виправлені на ангармонізм, cm^{-1}	Потенціальний бар'єр, cm^{-1}
H_2O (газ)	1594.75 [16]	1632.14 [9, 11]	11493[1] – 11192 [4]
H_2O (рідина)	1640 [17]	1755 [9, 11]	–
N_3H	1094 [8]	1104.52	2072 [8]

Аналогічним чином обернена задача спектроскопії може бути розв'язана і для молекули води. Видається можливим застосування потенціалів однакового вигляду для молекул аміаку та води, як у газоподібному, так і рідкому стані.

Набір потенціалів і методів заходження їх

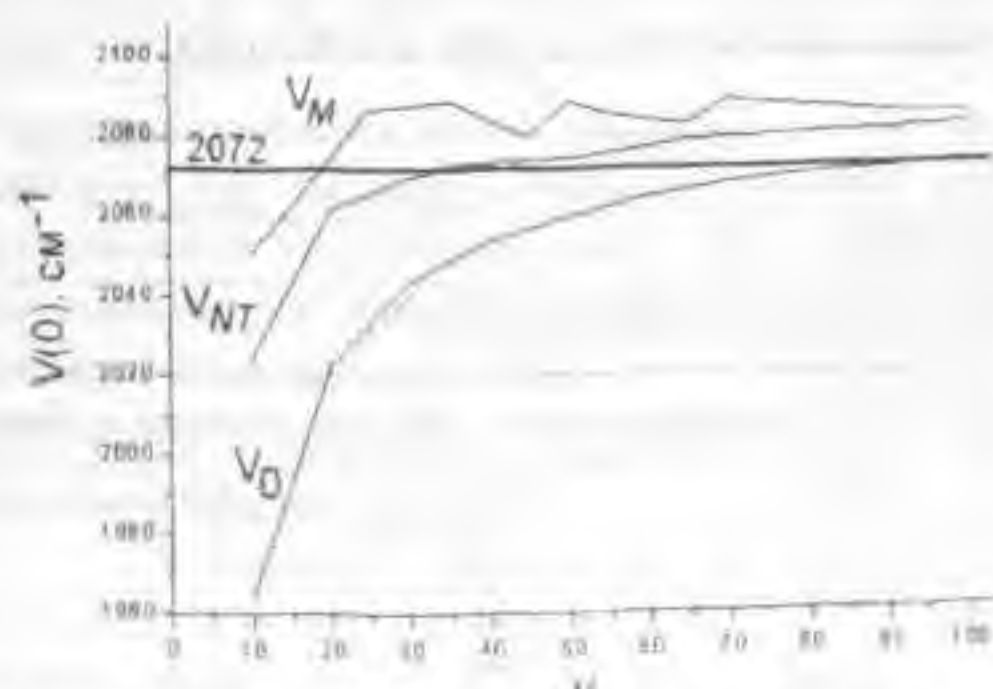


Рис. 1 Вибір оптимального набору точок для кожного з потенціалів.

Результати і їх обговорення

У таблиці 1 наведено параметри досліджуваних молекул – H_2O і NH_3 .

На рисунку 1 наведено графік, за допомогою якого були обрані оптимальні набір точок для кожного з потенціалів. По вісі абсцис відкладені значення множника α , а по вісі ординат – висоти потенціальних бар'єрів для цих значень α . Перетин графіка з рівнем 2072 cm^{-1} (відома висота потенціального бар'єра для молекули аміаку) визначав оптимальні множники, і, відповідно, оптимальний набір точок для кожного з потенціалів.

Як можна побачити з рисунка, на ньому відсутня крива, що відповідає потенціалу $V_M(z)$. Видається, що не можна відшукати таке значення α , де б значення функції, що відповідає цій кривій дорівнювало б 2072 cm^{-1} . Через це для потенціалу $V_M(z)$ обраний такий набір точок, де різниця між розрахованим і літературним

значеннями бар'єру було б мінімальним.

На рисунку 2 представлено аналогічний графік, що дозволяє знайти оптимальні значення рівня для методу заданого рівня. Як видно, для кожного з модельних потенціалів можна підібрати такий рівень, щоб знайдений потенціальний бар'єр дорівнював би відомому значенню. Результати, отримані з рисунків 1 і 2 наведені у таблиці 2

У таблиці 3 наведені величини потенціального бар'єру молекули аміаку отримані різними способами.

Як видно з таблиці, результати, що отримані для різних потенціалів різними методами суттєво відрізняються. Однак, з аналізу таблиці 3 можна зробити наступні висновки.

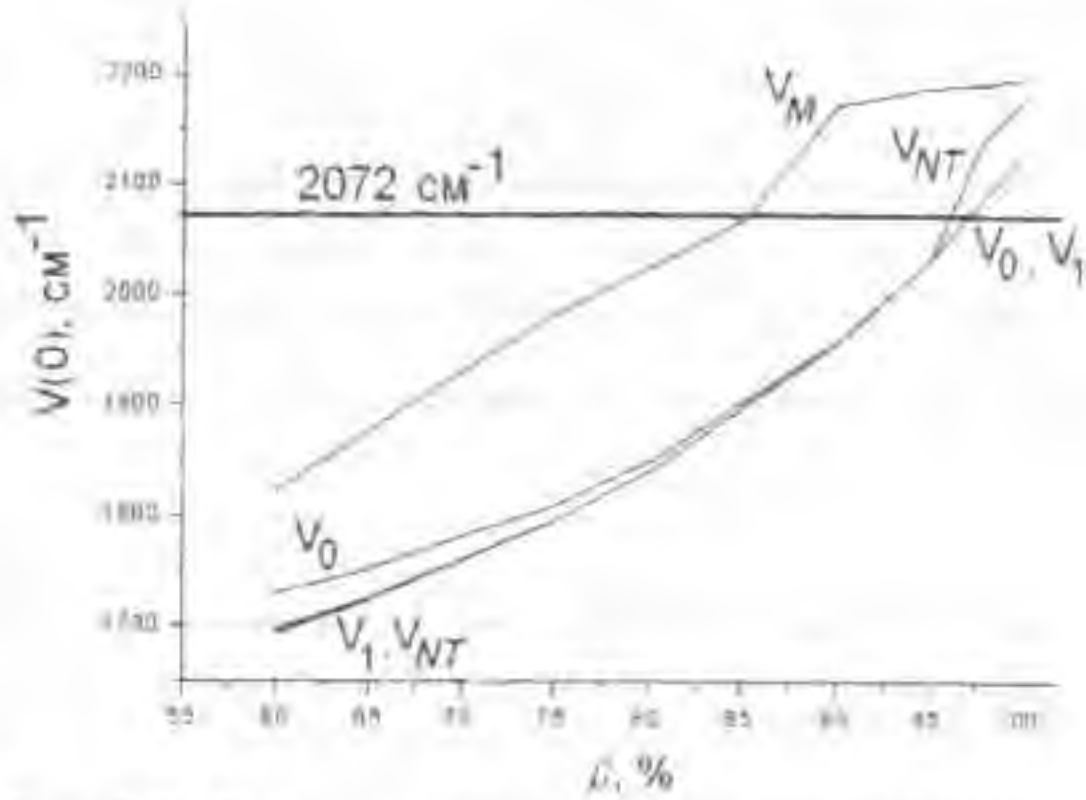


Рис. 2 Вибір оптимального рівня для кожного з потенціалів.

Таблиця 2.

Оптимальні значення множника α та рівня β для кожного з застосованих потенціалів у випадку молекули NH_3 .

Потенціал	Оптимальне значення α	Оптимальне значення β , %
$V_0(z)$	0.011	97.3
$V_1(z)$	0.048	97.3
$V_M(z)$	0.029	85.3
$V_{NT}(z)$	0.030	96.2

Видається недоцільним використання потенціалу Ньютона-Томаса для оцінки висоти потенціального бар'єру шляхом розв'язання оберненої спектральної задачі, оскільки для молекули аміаку отриманий бар'єр значно відрізняється від експериментальних даних.

З отриманих для молекули аміаку даних випливає, що методи похідних і рівновіддалених точок демонструють однакову точність у знаходженні бар'єру для молекули аміаку.

Метод заданого рівня продемонстрував результати, кращі за результати інших методів і

дозволив вибрати найбільш вдалий потенціал для опису коливання ω_2 молекули води. В результаті розрахунків вдалося підібрати такі рівні, щоб значення висоти бар'єру для молекули NH_3 відрізнялось б від літературних на доли відсотку.

Видається доцільним проаналізувати результати застосування кожного з методів до молекули води у газоподібному стані. Ці результати представлені в таблиці 3.

З таблиці 4 випливає, що методи похідних та рівновіддалених точок вочевидь, є недосконалими методами оцінки висоти бар'єру.

Таблиця 3.

Потенціальний бар'єр молекули NH_3 .

Потенціал	Висота потенціального бар'єру, cm^{-1}		
	Метод похідних	Метод рівновіддалених точок	Метод заданого рівня
$V_0(z)$	2086	2072	2073
$V_1(z)$	2088	2071	2073
$V_M(z)$	3474	2897	2073
$V_{NT}(z)$	1493	2072	2053

Таблиця 4.

Бар'єр лінеаризації молекули H_2O у газоподібному стані.

Потенціал	Висота потенціального бар'єру, см^{-1}		
	Метод похідних	Метод рівновіддалених точок	Метод заданого рівня
$V_0(z)$	8 385	8382	8 872
$V_1(z)$	8135	8390	8905
$V_M(z)$	13180	8513	12100

На ненадійність цих методів вказує мале у порівнянні з відомими літературними даними значення бар'єру лінеаризації. Метод заданого рівня є дещо кращим у цьому відношенні.

Особливу увагу варто звернути на результати, що були отримані для потенціалу $V_M(z)$ у випадку розрахунку методом заданого рівня. Так, різниця між літературними даними і знайденими для бар'єра $V_M(z)$ не перевищує 6 %.

Додатковим аргументом на користь потенціалу $V_M(z)$ є значення, отримане для частоти інверсії молекули NH_3 в основному стані. Для потенціалу $V_M(z)$, розрахованому за методом заданого рівня, вона складає 0.638 см^{-1} , що близько до відомих літературних даних [8].

Отже на цей потенціал у комбінації з методом заданого рівня можна спиратися для знаходження величини бар'єру лінеаризації молекули води у рідкому стані. Згідно розрахунків він становить 9717 см^{-1} . Таким чином, знайдені величини бар'єра для молекули води у рідкому стані виявляється меншими за величину бар'єру молекули у газоподібному стані.

Відмітимо також цікавий факт, що свідчить на користь інших використаних потенціалів, а також інших методів пошуку параметрів цих потенціалів. Середньоарифметичне значення величини бар'єру для молекули води в рідкому стані, розраховане за допомогою усіх комбінацій потенціалів та методів пошуку їх параметрів, складає 9793 см^{-1} , що несуттєво відрізняється від знайденого значення для потенціалу $V_M(z)$ методом заданого рівня.

Видається доцільним використовувати різні підходи для оцінки потенціальних бар'єрів інших молекул у рідкому стані для підтвердження достовірності отриманих результатів.

Отримане значення для бар'єру лінеаризації для молекули води у рідкому стані може бути важливим при розгляді питання про так звані «інвертори» [11].

Коли молекула в рідкому стані здійснює інверсію через лінійну конфігурацію, має виникати нове розташування молекул, що є менш рівноважним. З часом така нерівноважність має релаксувати. За своєю поведінкою такі нерівноважності нагадують квазічастинки, що умовно можна назвати «інвертонами». Газ таких частинок може впливати на термодинамічні параметри води.

Розглянемо таку ситуацію на прикладі молекули води. Для цієї молекули час релаксації має бути порядку часу осілого життя молекули, тобто порядку 10^{-12} секунди [18]. Частота інверсії для молекули води в рідкому стані, розрахована за потенціалом $V_M(z)$ та методом заданого рівня складає 30.2 Гц .

Відповідно, для молекули води значення концентрації нерівноважностей складає порядку 10^{12} см^{-3} . Врахування цієї обставини може сприяти поясненню деяких з багатьох відомих особливостей рідкої води.

Таким чином, запропонована в роботі методика, що ґрунтується на результатах розв'язання оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії дозволяє не тільки встановити значення величини бар'єру лінеаризації для молекули води у рідкому стані, але й може слугувати ще одним способом пояснення відомих аномалій молекули води.

Список використаних джерел

1. S. Carter, N.C. Handy A theoretical determination of the rovibrational energy levels of the water molecule // J. Chem Phys – 1987 – 87 – p. 4294–4301
2. H. Partridge, D.W. Schwenke The determination of an accurate isotope

- dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data// J. Chem. Phys. – 1997 – 106 – p. 4618-4639
3. G. Tarczay, A. G. Csasz, W. Klopper, V. Szalay, W. D. Allen, H. F. Schaefer III The barrier to linearity of water// J. Chem. Phys. – 1999 – 110, v 24 – p. 11971-11981
 4. J. Sophie Kain, Oleg L. Polyansky I, Jonathan Tennyson The ground-state potential energy surface of water: barrier to linearity and its effect on the vibration-rotation levels// Chem Phys Let.– 2000 – 317 – p. 365-371
 5. M.S. Child, T. Weston and J. Tennyson, Quantum monodromy in the spectrum of H_2O and other species: new insight into the quantum level structure of quasi-linear molecules // Mol. Phys. – 1999 – 96 – p. 371-379.
 6. Jacobson, M.P. and Child, M.S. Spectroscopic signatures of bond-breaking internal rotation I Saddle point induced polyad breakdown // J.Chem.Phys. – 2001 – 114 – p.250-261
 7. M. Joyeux, D. A. Sadovskii and J. Tennyson Monodromy of the LiNC/NCLi molecule // Chemical Physics Letters – 2003 – 382 – p. 439-442
 8. Таунс Ч., Шавлов А., Радиоспектроскопия, пер. с англ. – М., 1959.
 9. B.A. Okhrimenko, K.S. Yablochkova "Barrier of linearity and frequency of inversion through the linear configuration of H_2O molecule ", Conference proceedings, "SPO 2006 – Optics and High Technology Material Science", K. – 2006 – p. 86
 10. Охріменко Б.А., Яблочкова К.С. Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію О-Н зв'язку молекули H_2O // УФЖ – 2007 – т.52, №6 – с. 558-563.
 11. Охріменко Б.А., Яблочкова К.С. Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію зв'язків Н-Х молекул типу H_2X // КНУ, Вісник, Фізика – 2006 – №4 – с. 449-458.
 12. Білий М. У., Охріменко Б. А. Девіація N-H зв'язку в молекулі NH_3 // УФЖ – 2001 – т.46, №4 – с. 466-470.
 13. Охріменко Б.А. Самойленко Д.М. Дослідження девіації N-H зв'язку молекули NH_3 . // КНУ, Вісник, Фізика – 2002 – №4, с.45-49.
 14. B.A. Okhrimenko, G.I. Gaididei, D.M. Samoilenko Chemical bonds deviation in NH_3 , PH_3 , AsH_3 , and SbH_3 molecules // Functional Materials – 2004 – 11, №1. – с.136-141.
 15. Белый М.У., Охрименко Б.А., Яблочков С.М. Метод решения обратной спектральной задачи // Известия вузов МВ ССО СССР, физика – 1987 – №4 – с. 52-57.
 16. L. Halonen and T. Carrington, Jr. Fermi resonances and local modes in water, hydrogen sulfide, and hydrogen selenide // J. Chem. Phys. – 1988. – 88 – p. 4171
 17. Юхневич Г.В. Инфракрасная спектроскопия воды – М.: "Наука".-1973.- 208с.
 18. Л.А. Булавін, Т.В. Кармазіна, В.В. Кленко та ін. Нейтронна спектроскопія конденсованих середовищ – К.: «Академперіодика». – 2005. – 640с.

Надійшла до редколегії 12.06.2007

УДК 539.15.04

Розуван К.П., Розуван* С.Г., Шайкевич І.А

Нелінійна спектроскопія фулеренів

У роботі приведені результати спектральних досліджень фулеренів C_{60} за допомогою еліпсометричних вимірювань та фемтосекундної чотирьохпучкової взаємодії з реалізацією геометрії хвиль уперед. Еліпсометричні вимірювання проводились із застосуванням методу Бітті. Апарат квантовомеханічної матриці густини у наближенні електричних дипольних переходів був використаний для теоретичного аналізу результатів. При аналізі було задіяно модель трьохрівневої схеми у системі невзаємодіючих молекул. Базуючись на припущенні неоднорідного уширення оптичних переходів було запропоноване співвідношення для величин оптичної нелінійності у сполуках вуглецю з sp^2 гібридизацією.

Ключові слова: фулерени C_{60} , спектральна еліпсометрія, чотирьохпучкова взаємодія, фемтосекунди, тензор $\chi^{(3)}$.

*E-mail: sgr@univ.kiev.ua

За останні роки кількість робіт по дослідженню фулеренів та хімічних сполук фулеренів зросла до надзвичайно високого рівня. Актуальність вивчення цих матеріалів обумовлена не тільки їх унікальними фізичними та хімічними властивостями а також перспективами застосування у наноелектроніці [1-3]. Водночас, з нашої точки зору, існує можливість отримання додаткової інформації про фізичні властивості фулеренів, яка зв'язана з використанням передових оптичних методик. В даній роботі йдеться в першу чергу про нелінійні оптичні методики, які добре себе апробували на цілих класах сполук [4-7]. Прорив у створенні серійно продукованих лазерів та підсилювачів на основі кристалів Ti:Sapphire, здатних стабільно генерувати потужні імпульси довжиною 30-120 фемтосекунд у видимому та близькому інфрачервоному областях спектра, визвав у свою чергу бурхливий розвиток нелінійних методик, які застосовуються для експериментального дослідження широкого класу органічних речовин. Задача даної роботи

K.P.Rozouvan, S.G. Rozouvan*, I.A. Shaykevich

Nonlinear spectroscopy of fullerenes.

In this work are presented results of spectral ellipsometrical measurements and femtosecond degenerate four-wave mixing (DFWM) measurements in folded box-CARS geometry of C_{60} fullerenes are presented. Method Beattie was applied for the ellipsometric measurements. Quantum mechanical density matrix formalism in electrical dipole transitions approximation was used for the experimental data analysis. The model of non-interacting molecules with three quantum mechanics levels was applied. In frames of inhomogeneous transitions model a ratio for third-order nonlinearity in carbon compounds with sp^2 bonds was proposed.

Key words: fullerenes C_{60} , spectral ellipsometry, DFWM, femtoseconds, tensor $\chi^{(3)}$.

полягає у дослідженні оптичних властивостей плівок фулеренів C_{60} з використанням виродженої чотирьохпучкової взаємодії та еліпсометрії.

Плівки фулерену C_{60} наносились на кварцеву підложку з суміші з толуолом механічним способом (doctor blading). Товщина плівки фулеренів, а також якість поверхні зразка вимірювались за допомогою альфа степпера (Alfa-Step 200, Tencor Instruments, Mountain View, California).

Експерименти по чотирьохпучковій взаємодії проводились у геометрії направленості чотирьох взаємодіючих хвиль уперед (рис.1). Фемтосекундні лазерні імпульси змінної довжини хвилі генерувались у 720-900нм спектральній області Ti:Sapphire лазером з самосинхронізацією мод (Mira 900F, Coherent, Santa Clara, California), а потім поступали на акустооптичний модулятор (a pulse picker), який знижував частоту слідування імпульсів до 100 кГц. При необхідності в експерименті могла бути використана друга гармоніка випромінювання, яка отримувалась подвоєнням

в кристалі КТР. Довжина генерованих імпульсів вимірювалась стандартною безп'ядестальною кореляційною методикою на основі векторного синхронізму і складала у середньому 110 фемтосекунд. Фемтосекундні імпульси в спектральному інтервалі 500-700нм генерувались оптичним параметричним

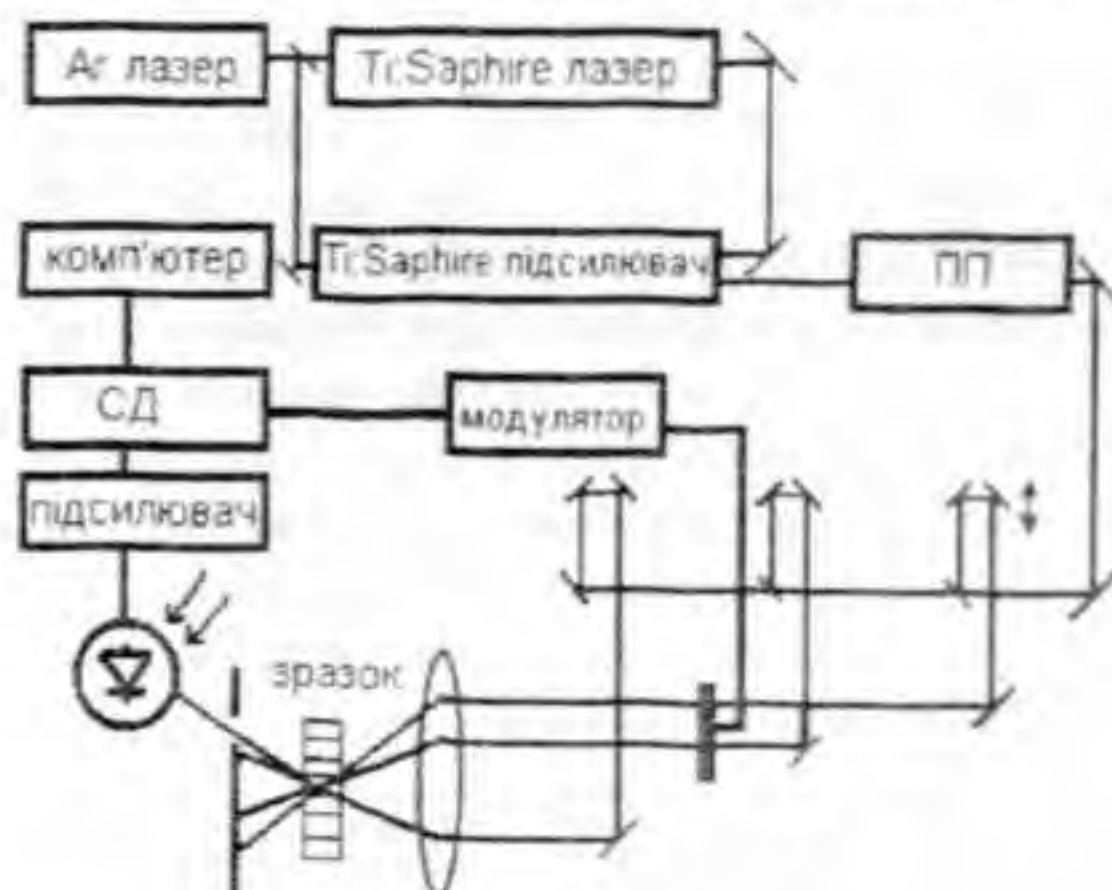


Рис.1 Схема установки чотирьохпучкової взаємодії у схемі генерації пучків уперед для вимірів оптичної нелінійності третього роду. СД-синхронний детектор, ПП- параметричний підсилювач.

підсилювачем (OPA 9400, Coherent), який накачувався регенеративним Ti:Sapphire підсилювачем (Rega 9000, Coherent). Три параксіальні пучки за допомогою 100 міліметрової дінзи фокусувались на одну й ту саму площадку на зразку з розміром порядку 20 мікрон. Результат нелінійної взаємодії (четвертий пучок) реєструвався кремнієвим фотодіодом (Hamamatsu, Hamamatsu City, Japan), який підключався до попереднього підсилювача (SR 560, Stanford Research, Sunnyvale, California). Синхронний детектор (SR530, Stanford Research), який підсилював сигнал на різниці частот двох промодульованих пучків, в залежності від фази модулятора, використовувався з метою покращення відношення сигнал-шум.

Величина компоненти (1,1,1,1) тензора $\chi^{(3)}$ зразка (s), який вимірювався, знаходилась шляхом порівняльних вимірів з стандартним зразком CS_2 (ref), величина нелінійності якого ($\chi^{(3)} = 6 \times 10^{-13} \text{ esu}$) вважається встановленою, з використанням виразу:

$$\chi_s^{(3)} = \chi_{ref}^{(3)} \frac{n_s^2}{n_{ref}^2} \sqrt{\frac{I_{4s}}{I_{4ref}}} \sqrt{\frac{P_{ref}}{P_s}} \times \frac{\alpha \exp(\alpha L_s / 2)}{[1 - \exp(-\alpha L_s)]} I_{ref} \quad (1)$$

де L - це товщина зразка, n - коефіцієнт заломлення зразка, α - коефіцієнт поглинання, I_4 - вихідна інтенсивність чотирьохпучкової взаємодії, P - інтенсивність лазерного світла.

Для реєстрації густини електронних станів C_{60} проводились спектральні еліпсометричні вимірювання по схемі Бітті[5]. Розрахунки величин дійсної та уявної частин коефіцієнта заломлення проводились за стандартними співвідношеннями[8]:

$$n = \sin \varphi * \operatorname{tg} \varphi \frac{\cos 2\psi}{1 + \sin 2\psi * \cos \Delta} \quad (2)$$

$$k = \sin \varphi * \operatorname{tg} \varphi \frac{\sin 2\psi \sin \Delta}{1 + \sin 2\psi * \cos \Delta}$$

Кути Δ та ψ знаходились із даних експерименту, використовуючи співвідношення:

$$\operatorname{tg} \psi = \sqrt{\frac{I_{90}}{I_0}} \quad (3)$$

$$\cos \Delta = \frac{2I_{45} - I_0 - I_{90}}{2\sqrt{I_{90}I_{45}}}$$

Величини I_0 , I_{45} , I_{90} позначають інтенсивність відбитого світла, яке відповідає кутам між вектором аналізатора та головною площиною падіння відповідно 0° , 45° та 90° . Слід зазначити, що знак „+” у знаменниках співвідношень (2) означає, що ми розглядаємо процес відбиття світла у системі координат, пов'язаною з падаючим на поверхню зразка променем. Як наслідок, при еліпсометричних вимірах по методиці Бітті, вектори поляризатора та аналізатора у системі координат, зв'язаної з променем, повинні знаходитись у одному й тому ж квадранті. В [9] в знаменниках співвідношень (2) після одиниці стоїть знак „-”, це пов'язано з тією обставиною, що в [9] в знаках в формулах Френеля використовується система координат, жорстко зв'язана з межею поділу метал-повітря.

Оптична схема еліпсометра потенційно дозволяла використовувати також вихідне випромінювання з фемтосекундної системи як джерело світла. Еліпсометричні вимірювання з

використанням лазерного світла та світла з виходу спектрального приладу (Spectro 320, Instruments Systems, Munich) не показали суттєвих відмінностей у спектральних кривих оптичної провідності для плівок C_{60} , що на нашу думку пояснюється порівняно низькими значеннями компоненти (1,1,1,1) тензора $\chi^{(3)}$. На рис.2 зображена спектральна залежність оптичної провідності плівки C_{60} . Її вид подібний до спектральних кривих оптичної провідності, отриманих іншими дослідницькими групами [10-17]. Для плівок C_{60} є характерним гострий максимум в області 335 нанометрів, наявність якого на кривих провідності, є чітким підтвердженням правильності застосування еліпсометричних методик у даному конкретному випадку.

Результати вимірів компоненти (1,1,1,1) нелінійного тензора третього роду приведені на рис.2 у вигляді точок.

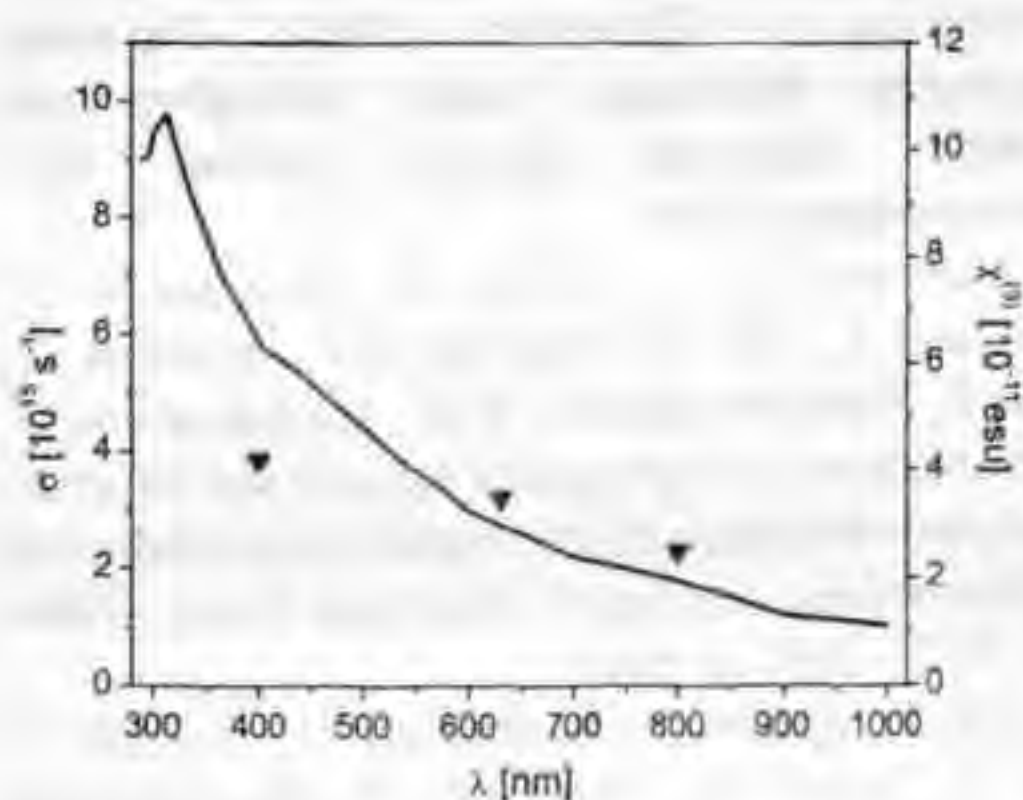


Рис.2 Спектральна залежність оптичної провідності (—) та величин $\chi_{1111}^{(3)}$ (▼) для плівок фулеренів C_{60} .

При проведенні самого експерименту чотирьохпучкової взаємодії ми зіткнулись з технічними труднощами, які були обумовлені порівняно невеликими значеннями величин нелінійного тензора для фулеренів. Сам нелінійний оптичний сигнал вдалось виділити лише для тих довжин хвиль, які відповідали високим вихідним інтенсивностям фемтосекундної системи (630нм- максимум генерації ОПП, 800нм, 400нм- максимум генерації Ti:Sapphire підсилювача REGA).

У наближенні електричного диполя (енергія взаємодії електричного поля з квантовою системою може бути записана: $V = \vec{E} * \vec{d}$) можна отримати вираз для індукованого дипольного моменту 3-го порядку:

$$\langle d_{\alpha}(t) \rangle^{(3)} = (i/\hbar)^3 \int dt_1 \int dt_2 \int dt_3 \theta(t-t_1) \theta(t_1-t_2) \theta(t_2-t_3) * \\ Sp\{\rho[d'_{\alpha}(t), d'_{\alpha 1}(t), d'_{\alpha 2}(t), d'_{\alpha 3}(t), d'_{\alpha 4}(t)]\} \\ E_{\alpha 1}(t_1) E_{\alpha 2}(t_2) E_{\alpha 3}(t_3) E_{\alpha 4}(t_4) \quad (4)$$

де θ - це ступінчаті функції Хевісайда, які вводяться для врахування принципу причинності, домножені на експоненційний множник $\exp(-\gamma_{mn}t)$, який описує згасання системи.

Вводячи позначення $D_{mn} = \omega_{mn} - \omega - i\gamma_{mn}$ і проводячи інтегрування в (4), можна отримати загальний вираз для елементів кубічного тензора нелінійної сприйнятливості у наближенні трьохрівневої схеми:

$$\chi_{1111}^{(3)} = \chi_{aaaa}^{(3)} = 1/(2\hbar^3) \sum_n N_n \left(\frac{d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha}}{D_{mn} D_{mn} D_{mn} D_{mn}} + \frac{d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha}}{D_{mn} D_{nl} D_{nl} D_{nl}} + \right. \\ \left. \frac{d_{mn}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha}}{D_{mn} D_{nl} D_{nl} D_{nl}} + \frac{d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha}}{D_{mn} D_{mn} D_{mn} D_{nl}} \right) \quad (5)$$

Величини N_n зв'язані через діагональні елементи матриці густини та загальну кількість невзаємодіючих молекул співвідношенням $N_n = \rho_{nn} N$. Звичайно, ми не маємо точної інформації стосовно величин матричних елементів, які входять в співвідношення (5), однак аналізуючи експериментальні дані на рис.2, ми можемо зробити два висновки. По-перше, як і у випадку [7], величина елементів тензора нелінійної проникності для довгохвильової ділянки спектральної кривої поглинання пропорційна приблизно першій степені коефіцієнта поглинання; по-друге, спостерігається відносний спад нелінійного тензора для короткохвильової ділянки спектральної кривої. З урахуванням цього аналізу експериментальних даних, ми можемо переписати співвідношення (5) у спрощеному вигляді:

$$\chi_{1111}^{(3)} \approx 1/(2\hbar^3) \sum_n N_n \left(\frac{d_{mn}^{\alpha} d_{mn}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha} d_{nl}^{\alpha}}{D_{mn} D_{nl} D_{nl} D_{nl}} \right) \quad (6)$$

Розглядаючи політіофенові похідні з [4-7], та фулеренові зразки, які досліджувались в даній роботі як представники вуглецевих сполук з гібридизованими молекулярними орбіталями, ми можемо відмітити якісну схожість поведінки їх нелінійних спектральних кривих. Незважаючи на повністю відмінну

хімічну структуру для цих двох типів субстанцій, вони мають деякі спільні властивості. По-перше, це наявність в них π атомних зв'язків, які власне кажучи і відповідають за нелінійні властивості третього роду. По-друге, плівки фулеренів, як і політіюфени демонструють явно виражене неоднорідне уширення оптичних полос поглинання. На нашу думку, останній фактор являється найбільш суттєвим з точки зору оптики та нелінійної оптики фулеренів і потребує подальших більш детальних досліджень.

В даній роботі проведені спектральні еліпсометричні та чотирьохпучкові вимірювання зразків C_{60} . На основі експериментальних даних було зроблено припущення про реальний вид спектральних залежностей нелінійного тензора третього роду, що потенційно дозволяє провести подальший аналіз фізики оптичних переходів в фулеренах. Базуючись на припущенні неоднорідного уширення оптичних переходів в C_{60} в видимій області, зроблено якісний аналіз спектральної поведінки sp^2 гібридизованих вуглецевих сполук в ряду інших субстанцій раніш досліджених авторами.

Подяки

Значну частину цієї роботи виконано на експериментальному обладнанні БАСФ (BASF AG), Людвігсхафен, Німеччина. Автор (*) висловлює подяку працівникам цієї організації за їх неопінену допомогу в проведенні експериментальних вимірів.

Література.

1. Burghard M. Electronic and vibrational properties of chemically modified single-wall carbon nanotubes // Surface Science Reports. - 2005. -58. -P.1-109.
2. Chikamatsu M., Itakura A., Yoshida Y., Azumia R., Kikuchi K., Yase K. Correlation of molecular structure, packing motif and thin-film transistor characteristics of solution-processed n-type organic semiconductors based on dodecyl-substituted C_{60} derivatives // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. -2006. (article in press).
3. Sajeed J., Rongzhou W. Sculpting the vacuum in a photonic band gap micro-chip // Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications. - 2004, -2. -P.137-147.

4. Rozouvan S. Broad band degenerate four wave mixing measurements // Journal of the Optical Society of America B. -2000. -17(8). -P.1354-1359.
5. Rozouvan S., Schrepp W. Degenerate four wave mixing measurements on thin polymer films // Applied Spectroscopy. -2000. -v.54. -No9. -P. 1399-1404.
6. Rozouvan S. Commutative spatial and time symmetry of degenerate four-wave mixing measurements // Journal of the Optical Society of America B. -1999. -16(5). -P.768-773.
7. Schrof W., Rozouvan S., Hartmann T., Belov V., Mohwald H. and van Keuren E. Nonlinear optical properties of novel low-bandgap polythiophenes // Journal of the Optical Society of America B. -1998. -15. -No 2. -P. 889-894.
8. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. –Москва: Издательство “Наука”, 1973. -719 с.
9. Соколов А.В. Оптические свойства металлов. -Москва: Издательство физико-математической литературы, 1961. -464 с.
10. Седов В.П., Грушко Ю.С. Спектрофотометрический анализ растворов фуллеренов // Препринт 2417. –Гатчина: Российская академия наук, Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова, 2001.
11. Adamopoulos G., Heiser T., Giovanella U., Ould-Saad S., van de Wetering K.J., Brochon C., Zorba T., Paraskevopoulos K.M., Hadziioannou G. Electronic transport properties aspects and structure of polymer-fullerene based organic semiconductors for photovoltaic devices // Thin Solid Films. -2006. -511–512. -P.511–512.
12. Erb T., Raleva S., Zhokhavets U., Gobsch G., Stuhn B., Spode M., Ambacher O. Structural and optical properties of both pure poly(3-octylthiophene) (P3OT) and P3OTyfullerene films // Thin Solid Films. -2004. -450. -P.97–100.
13. Persson N. K, Mathias S., Olle I. Optical modelling of a layered photovoltaic device with a polyuorene derivative/fullerene as the active layer // Solar Energy Materials & Solar Cells. -2004. -83. -P.169–186.
14. Zhokhavets U., Erb T., Hoppe H., Gobsch G., Saricifci N. S. Effect of annealing of poly(3-hexylthiophene)/fullerene bulk heterojunction composites on structural and optical properties // Thin Solid Films. -2006. -496. -P.679–682.
15. Erb T., Zhokhavets U., Hoppe H., Gobsch G., Al-Ibrahim M., Ambacher O. Absorption and crystallinity of poly(3-hexylthiophene)/fullerene blends in dependence on annealing temperature // Thin Solid Films. -2006. -511–512. -P.483–485.
16. Baena J. R., Perez M., Gallego M., Martyn-Romer M. T., Valcarcel M., Camacho L. Study of a new C_{60} derivative at the air-water interface // Thin Solid Films. -2004. -449. -P.215–221.

17. Zhokhavets U., Goldhahn R., Gobsch G., Al-Ibrahim M., Roth H.-K., Sensfuss S., Klemm E., Egbe D.. Anisotropic optical properties of conjugated polymer and polymery fullerene films // Thin Solid Films -2003. -444. P.215–220.

Надійшла до редколегії 14.05.2007

УДК 532.536.537

Соколовський Б.І., канд. фіз-мат. наук,
Склярчук В.М., канд. фіз-мат. наук,
Плевачук Ю.О., канд. фіз-мат. наук

Електропровідність і термо-е.р.с. розплавів на основі телуру

У інтервалі температур 600-1800 К проведені вимірювання електропровідності $\sigma(T)$ та термо-е.р.с. $S(T)$ потрійних розплавів CuTlTe_2 , CuAsTe_2 і TlAsTe_2 . Особливості поведінки $\sigma(T)$ свідчать про перехід напівпровідник-метал. Температури металізації $T^S < T^{\sigma}$, енергія активації $E^{\sigma}(0)$ не співпадає з $E^S(0)$, а в околі переходу напівпровідник-метал $E^{\sigma}(0) > E^S(0)$. Високотемпературний перехід напівпровідник-метал інтерпретується в рамках розвинутого механізму трансформації електронного спектра напівпровідників.

Ключові слова: Перехід напівпровідник-метал, електропровідність, термо-е.р.с.

*E-mail: sklyarchuk@ukr.net

Енергетичний спектр електронів у термодинамічно однорідних некристалічних напівпровідниках характеризується наявністю різких країв рухливості [1]. Постулюється, що псевдощілина зменшується з ростом температури за лінійною залежністю, а зменшення до значень $-kT$ веде до переходу напівпровідник-метал. Цю концепцію в загальних рисах було підтверджено експериментально. Однак дослідження [2,3] виявили ряд невідповідностей між експериментом і відомими модельними уявленнями. Зокрема неможливо пояснити такі виявлені закономірності:

- температура металізації T^S , визначена за залежністю $S(T)$, завжди нижча від температури металізації T^{σ} , визначеної за залежністю $\sigma(T)$;
- енергія активації $E^{\sigma}(0)$ не співпадає з $E^S(0)$, а в області переходу, як правило, виконується співвідношення $E^{\sigma}(0) > E^S(0)$;
- при певній температурі може спостерігатися різке зростання енергії активації від $E^{\sigma}(0)_1$ до $E^{\sigma}(0)_2$ при незмінній $E^S(0)$.

Тому виникла необхідність розширити область досліджень рідких напівпровідників з метою вивчення закономірностей їхньої металізації. Об'єктами досліджень вибрані термодинамічно однорідні розплави CuTlTe_2 ,

Sokolovskii B.I., Ph.D.
Sklyarchuk V.M., Ph.D.
Plevachuk Yu.O., Ph.D.

Electrical conductivity and thermoelectric power of Te-based liquid alloys

Electrical conductivity $\sigma(T)$ and thermoelectric power $S(T)$ were measured for ternary CuTlTe_2 , CuAsTe_2 , and TlAsTe_2 liquid alloys in a temperature range from 600 to 1800 K. The observed $\sigma(T)$ dependence points to the semiconductor-metal transition. The temperature of metallization $T^S < T^{\sigma}$, the activation energy $E^{\sigma}(0)$ does not coincide with $E^S(0)$, and a condition $E^{\sigma}(0) > E^S(0)$ in the vicinity of the semiconductor-metal transition takes place. The semiconductor-metal high-temperature transition is interpreted in the frame of a developed transformation mechanism of liquid semiconductors electron spectrum.

Key Words: Semiconductor-metal transition, electrical conductivity, thermoelectric power

CuAsTe_2 і TlAsTe_2 , які раніше в широкому температурному інтервалі не вивчалися.

Особливості експерименту

Експерименти проводились контактним методом за 4-х точковою схемою в умовах високого тиску аргону (до 500 атм) для збереження постійного хімічного складу зразків і запобігання випаровуванню летких компонентів [4]. Похибка визначення електропровідності не перевищувала 1,5%, термо-е.р.с - 5%.

Експериментальні результати

Усереднені результати вимірювань електропровідності та термо-е.р.с. розплавів CuTlTe_2 , CuAsTe_2 і TlAsTe_2 приведені на рис. 1,2. Результати для CuTlTe_2 добре узгоджуються з даними [5], отриманими до 800 К. Криві всіх складів мають загальновідомий вигляд. До деякого, притаманного кожному сплаву значення температури, $\sigma(T)$ описується експоненціальною залежністю, характерною для власної провідності напівпровідників. При подальшому нагріві залежність електропровідності від температури стає менше вираженою.

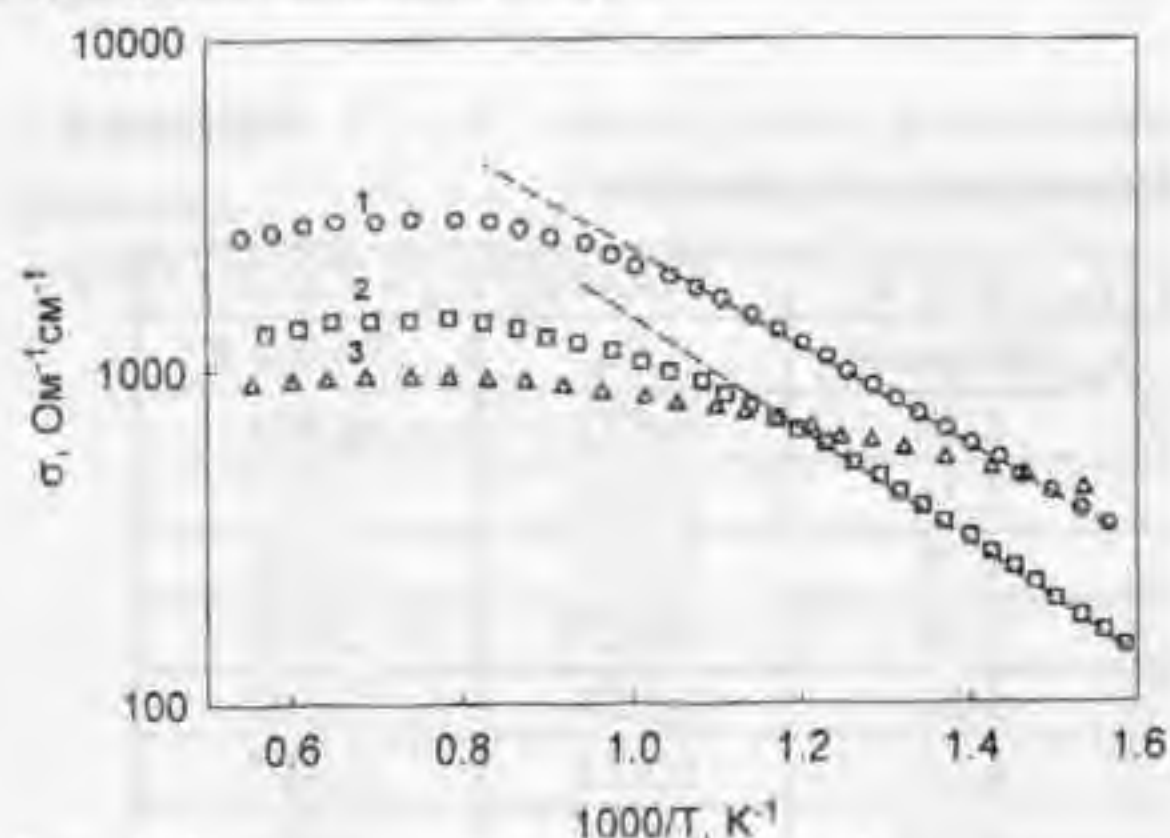


Рис. 1. Електропровідність розплавів
CuAsTe₂ (1), TlAsTe₂ (2), CuTlTe₂ (3)

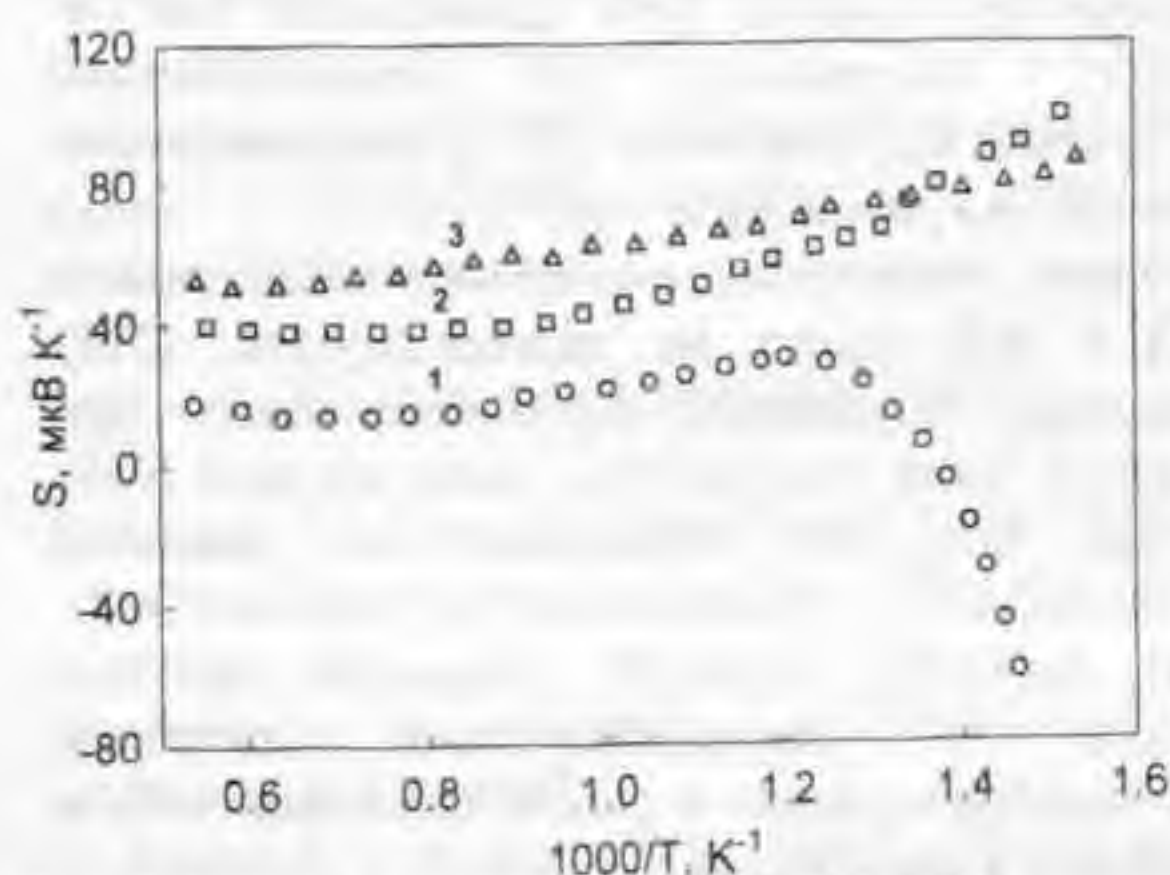


Рис. 2 Термо-е.р.с. розплавів CuAsTe₂ (1),
TlAsTe₂ (2), CuTlTe₂ (3)

Звертає на себе увагу той факт, що при високих температурах σ усіх трьох розплавів досягає і навіть перевищує значення мінімальної металевої провідності 150-350 $\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$, передбачене Моттом [6]. З рис. 1 видно, що при цих значеннях σ відбувається зменшення енергії активації провідності $E^{\sigma}(0)$. Так для TlAsTe₂ згаданий ефект спостерігається при $T_{s-m}^{\sigma} = 770$ К, для CuAsTe₂ - при 740 К, для CuTlTe₂ - при 770 К. Зменшення $E^{\sigma}(0)$ можна пояснити зникненням локальних станів у псевдощільності і ліквідацією механізму термоактивації носіїв струму через псевдощільність. Подальше зростання σ до насичення вище вказаних температур зумовлене, очевидно, збільшенням густини електронних станів на рівні Фермі. Таким чином, відзначені T_{s-m}^{σ} згідно з [1], слід вважати температурами металізації відповідних розплавів. $S(T)$ відразу після плавлення проявляє типово металеві властивості, а електропровідність зберігає напівпровідникові. Нетрадиційним, на перший

погляд, є поведінка $S(T)$ розплаву CuAsTe₂. В області температур $T_{пл} = 830$ К $S(T)$ змінює знак на додатний, що можна пояснити переходом від переважаючого електронного до діркового типу провідності. Цікаво перевірити положення переходу в металевий стан, виходячи з даних по термо-е.р.с. Для рідких напівпровідників $S(T)$ можна описати формулою:

$$S(T) = -\frac{k}{e} \left(\frac{E_c - E_v}{2kT} + A \right) \quad (1)$$

в якій параметр розсіювання A є постійною величиною, і в області власної провідності вважається рівним 1 [6]. Отже, при зникненні псевдощільності, коли $E_c - E_v \approx 2kT$, $S = 86$ мкВ/К. Саме ця величина і є критерієм переходу напівпровідник-метал по термо-е.р.с. Як видно з рис. 2, для всіх досліджуваних сплавів термо-е.р.с. набуває металевих значень відразу після плавлення, в той час як провідність зберігає напівпровідниковий характер поведінки.

Обговорення результатів

Виходячи з даних роботи [6], трансформація енергетичного спектру 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 ΔE_0 - екстрапольоване до 0 К значення ширини псевдощільності (суть енергії активації); γ - температурний коефіцієнт замивання псевдощільності.

Відомі формули для опису $\sigma(T)$ і $S(T)$ при дірковій провідності набувають вигляду:

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left(-\frac{E(0) - \gamma T}{kT} \right) \quad (3)$$

$$S = -\frac{k}{e} \left(-\frac{E(0) - \gamma T}{kT} \right) \quad (4)$$

Температурна залежність електропровідності рідкого напівпровідника має експоненціальний характер. Однак у порівнянні з кристалічними напівпровідниками, енергії активації $E(0)$, визначені з нахилу кривих $\lg \sigma = f(T^{-1})$ і $S = f(T^{-1})$, не є півшириною забороненої зони, а виступають в ролі своєрідної псевдощільності. Слід зауважити, що формули (3) і (4) дійсні до температури переходу, вище від якої всі стани на рівні Фермі є

Таблиця 1

Числа Лоренца та електронна складові теплопровідності досліджених розплавів

Температура, К	CuTlTe ₂ (T _{пл} = 660 К)		CuAsTe ₂ (T _{пл} = 645 К)		TlAsTe ₂ (T _{пл} = 470 К)	
	L/L ₀	λ_e , Вт/(см К)	L/L ₀	λ_e , (Вт/см К)	L/L ₀	λ_e , (Вт/см К)
800	0,891	10,78	0,971	2,28	0,872	0,854
900	0,903	15,68	0,975	3,74	0,896	1,371
1000	0,912	19,38	0,982	4,78	0,919	1,738
1100	0,917	22,79	0,987	5,45	0,923	2,079
1200	0,920	26,17	0,991	5,81	0,924	2,271
1300	0,922	29,99	0,992	6,15	0,933	2,487
1400	0,928	32,07	0,993	6,17	0,933	2,635
1500	0,932	34,50	0,993	5,28	0,933	2,709

делокалізовані. Оскільки $\sigma \sim g^2$ (g - фактор Мотта, що набуває значень $0,3 \leq g \leq 1$), то при підвищенні температури $g \rightarrow 1$ [1], а електропровідність повільно зростає і досягає насичення при $g=1$.

Отримана експериментальна інформація дає можливість оцінити число Лоренца і електронну складову теплопровідності [7]. В таб.1 подане відношення розрахункового L до числа Лоренца повністю виродженого електронного газу L_0 і електронної складової теплопровідності λ_e . Співвідношення $L/L_0 \rightarrow 1$ є свідченням сильного виродження електронного газу, що свідчить про ступінь наближення до металізації напівпровідникового розплаву.

Отримані результати демонструють експоненціальний ріст $\sigma(T)$ з подальшим зменшенням залежності від T , що відповідає теоретично очікуваному. Зменшення $E^s(0)$ відбувається на рівні мінімальної металевої провідності. Виходячи з цього, може видатися, що отримані дані повністю підтверджують механізм переходу, який ґрунтується на теорії Мотта [6]. Але це не зовсім так.

З аналізу (4) випливає, що лінійне зменшення півширини псевдощілини з ростом температури визначає лінійну залежність $S = f(T^{-1})$. З рис. 1 видно, що експериментальні криві не відповідають рівнянню (4), тому що S відразу після плавлення набуває металевих значень. У цьому випадку для розрахунку температури повного зникнення псевдощілини з $S=f(T^{-1})$ коректніше 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 в низькотемпературній області. До температури переходу напівпровідник-металл $\sigma(T)$ відповідає виразу (3), який, як і (4), непридатний при $E_c - E_v \approx kT$. Але згідно з [1], параметри псевдощілини

$E(0)$ і γ , які входять в (3) і (4), при даній температурі повинні бути однаковими; тому в області температур, де спостерігається відхилення від лінійності $S(T^{-1})$, слід очікувати аномалії на кривих $\log \sigma = f(T^{-1})$.

Однак, комплексні експериментальні дані з $\sigma(T)$ і $S(T)$ цього не підтверджують. $E^s(0)$ продовжує залишатись незмінною навіть при переході через температуру, вище від якої $E^s(0)$ взагалі відсутня. Зазначимо, що наведені невідповідності проявляються в сплавах Se-Te [3,8], As₂Te₃[9], As₂Se₃[9]. Очевидно, що такі ефекти є закономірностями переходу напівпровідник-метал в рідких напівпровідниках і причина в них спільна.

Для інтерпретації отриманих даних, ми скористалися моделлю, розробленою для халькогенідів арсену [10]. Ідеї базуються на висновках теорії протікання про існування в тривимірному просторі двох рівнів протікання: верхнього і нижнього [11]. Вводяться два характерні енергетичні рівні: E_v^s - відповідає порогу рухливості і E_v^s - формально названий порогом з густини станів. E_v^s зсунутий відносно E_v^s 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 $E_F - E_v^s$ як і $E_F - E_v^s$ є лінійними функціями температури:

$$E_F - E_v^s = E^s(0) - \gamma^s_0 T; \quad E_F - E_v^s = E^s(0) - \gamma^s_0 T \quad (5)$$

де $E^s(0)$ і $E^s(0)$ - екстрапольовані до 0 К значення віддалей відповідних порогів до E_F ; γ^s_0 and γ^s_0 - коефіцієнти, що визначають швидкість дрейфу E_v^s і E_v^s , відповідно, в напрямку до E_F . Для коректнішого визначення ширини відповідних псевдощілин враховується теплове розмиття

($\sim kT$), тобто γ^σ_0 і γ^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) набувають вигляду:

$$\sigma = \sigma_0 \exp \left(1 - \frac{E^\sigma(0) - \gamma^\sigma_0 T}{kT} \right) \quad (6)$$

$$S = -\frac{k}{e} \left(1 - \frac{E^s(0) - \gamma^s_0 T}{kT} \right) \quad (7)$$

Звідси зрозуміло, що зникнення псевдощільності, тобто перехід напівпровідник-метал, рівнозначне умовам $E_F - E^\sigma_v \approx kT$ і $E_F - E^s_v \approx kT$. При застосуванні цієї моделі стають зрозумілими різні температури переходу T^{σ}_{s-m} та T^s_{s-m} , різні енергії активації $E^\sigma(0)$ і $E^s(0)$, а також виконання умови $E^\sigma(0) > E^s(0)$ поблизу переходу напівпровідник-метал.

Список використаних джерел

1. Мотт Н., Дзвіс Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. - Москва: Мир, 1982.
2. Катлер М. Жидкие полупроводники. - Москва: Мир, 1982.
3. Perron Y. C. // Adv. Phys. - 1967. - 16, No. 64. - P. 657.
4. Plevachuk Yu., Sklyarchuk V. // Meas. Sci. Technol. -2001. -12, №1. - P.23-26.
5. Y. Nakamura // Suppl. of the Progr. of Theor. Phys. - 1982. - 72. - P. 124.
6. Мотт Н. Переходы металл-изолятор. - Москва: Мир, 1979.
7. Смирнов И.А., Тмарченко В. И. Электронная теплопроводность в металлах и полупроводниках. - Ленинград: Наука, 1977.
8. Андреев А.А., Алексеев В.А., Манукян А.Л. и др. // ФТТ. - 1973. - 15, N2. - С. 382.
9. Андреев А.А., Лебедев Э.А., Шмуратов Е.А. и др. // ФТТ. - 1973. - 15, N9. - С.3456-3457.
10. Bandrovskaya I., Prokhorenko V., Romanov V., Sokolovskii B. // Phys.stat.sol.(b).-1981. -107.- K95.
11. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. - Москва: Наука, 1979.

Надійшла до редколегії 16.03.07

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 виродження ненульових власних значень матриці густини. Серед станів з невиродженою матрицею густини розплутані стани утворюють двовимірну поверхню особливих станів.

Ключові слова: квантовий канал, переплутаність, незвідне подання

E-mail: usenko@univ.kiev.ua

Частина 2.

4 Двочастинкові квантові канали

Двокомпонентна система зазвичай складається з пари кубітів, в загальному випадку кожна з частинок може мати базис простору станів з більше ніж двома векторами.

Найуживанішими прикладами є паракубіт та паракутрит – комбінація кубіту та кутриту.

4.1 Опис простору станів пари

Ми будемо позначати як $\mathcal{H}_A$ простір станів частинки сорту A і $\mathcal{H}_B$ простір станів частинки сорту B , тоді спільний простір станів є прямим добутком цих підпросторів $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Для пари кубітів спільний простір є чотиривимірним $C^4 = C^2 \otimes C^2$, тоді як для комбінації кубіта з кутритом – шестивимірним $C^6 = C^2 \otimes C^3$.

4.1.1 Індуковані та переплутані базиси

Індукований базис спільного простору станів $\{|k\rangle\} \in \mathcal{H}$ зображується прямими добутками базисів $\{|m\rangle\} \in \mathcal{H}_A$ простору станів частинки

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

сорту A та $\{|n\rangle\} \in \mathcal{H}_B$ сорту B

$$|k = m \cdot n\rangle = |m\rangle \otimes |n\rangle \quad \forall m, n. \quad (29)$$

Індукований базис простору станів паракубіту утворюють чотири добутки

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle, & |1, 0\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle, \\ |0, 1\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle, & |1, 1\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

Індукований базис простору станів паракутриту утворюють шість добутків

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle, & |0, 1\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle, \\ |1, 0\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle, & |1, 1\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle, \\ |2, 0\rangle &= |2\rangle \otimes |0\rangle, & |2, 1\rangle &= |2\rangle \otimes |1\rangle. \end{aligned} \quad (31)$$

Загальний базис є результатом довільного унітарного перетворення індукованого базису. Якщо таке перетворення не є добутком унітарних перетворень підпросторів, хоча б частина векторів загального базису є деякою лінійною комбінацією прямих добутків і відповідає переплутаним станам.

$$|k\rangle = \sum_{m,n} c_{m,n}^{(k)} |m\rangle \otimes |n\rangle \quad (32)$$

Такий переплутаний базис необхідно використовувати, наприклад, якщо його вектори є власними векторами матриці густини.

Якщо частинки є тотожними, необхідно використувати (анти)симетричні вектори базису. За цієї умови в базисі простору станів кубіту лишається триплетна система симетричних станів

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle, \\ |1, 1\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle, \\ |t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle), \end{aligned} \quad (33)$$

або синглетний антисиметричний стан

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle). \quad (34)$$

Останній простір станів є одновимірним.

4.1.2 Матриці спостережуваних

Спостережувані композитної системи зображуються ермітовими матрицями в композитному базисі

$$\hat{O} = \sum_{\forall k, k'} O_{k, k'} |k\rangle \langle k'| \quad (35)$$

і можуть бути зображені також ермітовими матрицями в індукованому базисі

$$\hat{O} = \sum O_{m, m'; n, n'} |m\rangle \langle m'| \otimes |n\rangle \langle n'| \quad (36)$$

В цьому базисі спрощений вигляд мають матриці спостережуваних кожної підсистеми.

$$\begin{aligned} \hat{O}_A &= \sum_{\forall m, m'} O_{m, m'} |m\rangle \langle m'| \otimes \hat{I}_B \\ \hat{O}_B &= \hat{I}_A \otimes \sum_{\forall n, n'} O_{n, n'} |n\rangle \langle n'| \end{aligned} \quad (39)$$

Для чистих станів, що належать до індукованого базису, середні значення спостережуваних однієї підсистеми не залежать від властивостей стану другої підсистеми

$$\begin{aligned} \left\langle \left\langle m, n \left| \hat{O}_A \right| m, n \right\rangle \right\rangle &= O_{m, m} \\ \left\langle \left\langle m, n \left| \hat{O}_B \right| m, n \right\rangle \right\rangle &= O_{n, n} \end{aligned} \quad (40)$$

Власні вектори спостережуваних підсистеми завжди вироджені, оскільки, наприклад, якщо деякий вектор $|\psi\rangle \otimes |\xi\rangle$ є власним для спостережуваної підсистеми A , тобто $\hat{O}_A |\psi\rangle \otimes |\xi\rangle = O |\psi\rangle \otimes |\xi\rangle$, то і вектор $|\psi\rangle \otimes |\zeta\rangle$ є власним з тим самим власним значенням $\hat{O}_A |\psi\rangle \otimes |\zeta\rangle = O |\psi\rangle \otimes |\zeta\rangle$.

Проектування спостережуваних підсистеми в просторі станів підсистем здійснюється зовсім просто, достатньо в виразі (14) виділити

4.1.3 Власний базис спостережуваної

Ермітова матриця кожної спостережуваної має систему власних векторів та власних значень.

$$\hat{O} |k\rangle = O_k |k\rangle. \quad (37)$$

Якщо власні значення невироджені, система власних векторів означена однозначно і утворює ортогональне представлення одиниці

$$\sum_{\forall k} |k\rangle \langle k| = \hat{I}. \quad (38)$$

Для виродженої системи власних значень система власних векторів означена неоднозначно, хоча можливість вибору ортогонального базису залишається.

4.1.4 Спостережувані підсистем

Спостережувані, що залежать тільки від підсистеми A або B відповідно, мають своїми матрицями вирази (14)

одиночну матрицю іншої підсистеми

$$\begin{aligned} \hat{O}_A|_A &= \sum_{\forall m, m'} O_{m, m'} |m\rangle \langle m'| \\ \hat{O}_B|_B &= \sum_{\forall n, n'} O_{n, n'} |n\rangle \langle n'| \end{aligned} \quad (41)$$

Власні вектори таких матриць породжують асоційовані з відповідними спостережуваними базис просторів станів підсистем, а з ними - індукований базис простору станів композитної системи.

Власні вектори довільної спостережуваної далеко не завжди співпадають з векторами індукованого базису.

4.1.5 Матриця густини

Матриця густини композитної системи, подібно до матриць спостережуваних, є ермітовою, але має дві особливі властивості: по-перше, матриця густини має тільки невід'ємні власні

значення $\{0 \leq \rho_k \leq 1 : \forall k\}$, по-друге, сума власних значень матриці густини дорівнює одиниці $\sum_k \rho_k = 1$.

Наслідком цих властивостей є можливість тлумачити власні значення матриці густини, як ймовірності станів квантової системи, що відповідають власним векторам матриці густини, а розкладенню матриці густини за власними векторами

$$\bar{\rho} = \sum_k \rho_k |k\rangle \langle k|, \quad (42)$$

$$\bar{\rho} = \sum_{\forall m, m'; \forall n, n'} \left[\sum_k \rho_k c_{m,n}^{\{k\}} c_{m',n'}^{*\{k\}} \right] (|m\rangle \otimes \langle m'|) \otimes (|n\rangle \otimes \langle n'|). \quad (43)$$

Матриці густини підсистем будуються шляхом усереднення матриці густини композитної системи по станах другої підсистеми

$$\hat{\rho}^{\{A\}} = \sum_n (n | \hat{\rho} | n); \quad \hat{\rho}^{\{B\}} = \sum_m \langle m | \hat{\rho} | m \rangle. \quad (44)$$

З урахуванням явного вигляду матриці густини

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{\{A\}} &= \sum_m \left[\sum_{n,k} \rho_k \left| c_{m,n}^{\{k\}} \right|^2 \right] |m\rangle \langle m| = \sum_m \rho_m^{\{A\}} |m\rangle \langle m| \\ \hat{\rho}^{\{B\}} &= \sum_n \left[\sum_{m,k} \rho_k \left| c_{m,n}^{\{k\}} \right|^2 \right] |n\rangle \langle n| = \sum_n \rho_n^{\{B\}} |n\rangle \langle n| \end{aligned} \quad (45)$$

Залежно від властивостей власного базису матриця густини композитної системи в окремих випадках може бути добутком матриць густини підсистем або сумішшю таких добутків – обидва ці випадки можуть мати місце і для класичного спареного каналу переносу інформації. Квантові властивості спареного каналу, а саме такі, що не мають класичного аналога, мають місце в усіх тих випадках, коли стан каналу не може бути зведений до жодного з класичних варіантів, подібно до того, як не зводиться до класичного аналогу переплутані стани паракубіту. Некласичні стани, як і у випадку паракубіту, називають переплутаними, тому всі стани двочастинкового квантового каналу переносу інформації можна поділити на такі три типи:

1. Незалежні підсистеми: $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$;

2. Суміш незалежних підсистем: $\hat{\rho} \approx$

надавати тлумачення ймовірнісної суміші чистих станів $|k\rangle$, в якій відносну частку кожного стану визначає відповідне власне значення матриці густини ρ_k .

Власний базис матриці густини зазвичай складають вектори простору станів композитної системи, що є деякими нетривіальними комбінаціями (7) векторів індукованого базису, а зображення матриці густини в індукованому базисі має не тільки діагональні компоненти

в індукованому базисі (18) маємо

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{\{A\}} &= \sum_k \rho_k c_{m,n}^{\{k\}} c_{m',n'}^{*\{k\}} |m\rangle \langle m'|; \\ \hat{\rho}^{\{B\}} &= \sum_k \rho_k c_{m,n}^{\{k\}} c_{m',n'}^{*\{k\}} |n\rangle \langle n'|. \end{aligned} \quad (46)$$

Зазвичай в суперпозиції (7) кожному базисному вектору однієї частинки відповідає тільки один базисний вектор другої, тому матриці густини підсистем (21) є діагональними

$$\sum_s p_s \hat{\rho}_A^{(s)} \otimes \hat{\rho}_B^{(s)};$$

3. Переплутані стани підсистем; все інше.

4.2 Вимірювання станів двочастинкового каналу

Найважливішою відмінністю процесу вимірювання станів двочастинкового квантового каналу переносу інформації є можливість одночасного вимірювання двох спостережуваних. Якщо ці спостережувані є одночастинковими, за результатами вимірювання можна відрізнити стани, в яких окремі частинки утворюють незалежні підсистеми – в таких станах результати вимірювання одночастинкових спостережуваних є незалежними. В тих станах, що є сумішшю підсистем, так само, як і в переплутаних станах, результати вимірювання одночастинкових спостережуваних корелюють.

Реальними характеристиками станів частинок і каналу в цілому є не значення спостережуваних, а розподіли ймовірностей для заданого набору детекторів. Ці розподіли ймовірностей можуть визначатися безпосередньо за статистикою послідовних вимірювань, або ж за допомогою необхідної кількості моментів деякої спостережуваної. Кожен набір одночастинкових детекторів має своєю математичною моделлю послідовність проекторів на власні стани одночастинкової спостережуваної. Якщо власні значення спостережуваної є невідродженими, її власні стани утворюють базис, а детектори, подібно до (??), моделюються проекторами на базисні стани

$$\hat{P}_m^{(A)} = |m\rangle \langle m|; \quad \hat{P}_n^{(B)} = |n\rangle \langle n|. \quad (47)$$

Повна система детекторів композитної системи моделюється прямими добутками $\hat{P}_m^{(A)} \hat{P}_n^{(B)}$ таких проекторів

$$\hat{P}_{m,n} = |m\rangle \langle m| \otimes |n\rangle \langle n| = |m, n\rangle \langle m, n|. \quad (48)$$

Одночасному вимірюванню обох частинок відповідає спрацьовування деякого m -того детектора частинок сорту A та n -того детектора частинок сорту B одночасно. Результатом таких вимірювань є розподіл ймовірностей сумісного спрацьовування детекторів частинок обох сортів, що може бути обчислений за матрицею густини композитної системи, як слід добутку матриці густини та обох проекторів

$$P_{m,n} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_m^{(A)} \hat{P}_n^{(B)}). \quad (49)$$

4.2.1 Вимірювання незалежних станів

Якщо матриця густини системи є добутком матриць густини підсистем, цей слід розділяється на добуток двох слідів

$$\frac{\text{Tr}(\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B \hat{P}_m^{(A)} \hat{P}_n^{(B)})}{\text{Tr}(\hat{\rho}_A \hat{P}_m^{(A)}) \cdot \text{Tr}(\hat{\rho}_B \hat{P}_n^{(B)})} = \quad (50)$$

Відповідно розподіли ймовірностей частинок є незалежними

$$P_{m,n} = P_m^{(A)} \cdot P_n^{(B)}. \quad (51)$$

Таким чином, двочастинковий квантовий канал переносу інформації з незалежними частинками породжує незалежні розподіли ймовірностей

станів підканалів подібно до класичного паралельного каналу.

Два інших типи станів двочастинкового каналу породжують корельовані розподіли ймовірностей.

4.2.2 Класичні кореляції

Станам, що є класичною сумішшю незалежних станів, властива кореляція результатів вимірювань. Класична кореляція станів підсистем – частинок заслуговує на увагу з огляду на те, що нею маскуються більш важливі, суто квантові кореляції. Ми обмежимося розглядом найпростішого прикладу таких станів – суміші двох кубітів з діагональною матрицею густини. Припустимо, що з ймовірністю p обидва кубіти знаходяться в нульовому стані, а з ймовірністю $1-p$ – одиничному

$$\hat{\rho} = p |0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 0| + (1-p) |1\rangle \langle 1| \otimes |1\rangle \langle 1|. \quad (52)$$

Матриці густини кожної з частинок обчислюються усередненням по станах другої частинки і мають однаковий вигляд

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(A)} &= p |0\rangle \langle 0| + (1-p) |1\rangle \langle 1|; \\ \hat{\rho}^{(B)} &= p |0\rangle \langle 0| + (1-p) |1\rangle \langle 1|. \end{aligned} \quad (53)$$

Результатами вимірювань кожної з частинок є стан $|0\rangle$ з ймовірністю p та $|1\rangle$ з ймовірністю $1-p$. Водночас ймовірність отримати стан $|0\rangle$ для однієї з частинок за умови, що друга зареєстрована в стані $|1\rangle$, дорівнює нулю, тобто стани частинок є повністю корельованими.

Статистичний характер результатів вимірювань каналу в наведеному прикладі закладається на етапі підготовки стану, оскільки в серії вимірювань довжиною N канал готується в стані $|0, 0\rangle$ Np разів і в стані $|1, 1\rangle$ $N(1-p)$ разів відповідно.

Ентропія стану

$$S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \log_2 \hat{\rho}) \quad (54)$$

в цьому прикладі співпадає зі звичайною ентропією дворівневого класичного дубльованого каналу. Такою ж є величина ентропії кожного з каналів.

Інформація, отримувана при кожному вимірюванні стану каналу або ж станів частинок, дорівнює $-\log_2 p$ або $-\log_2(1-p)$ відповідно.

таким чином, в подібних каналах просто дублюється на пару частинок інформація, що закладається в канал, а процес вимірювання нової інформації не створює.

4.2.3 Народження інформації

Кореляція розподілів ймовірностей вимірювань станів окремих частинок двочастинкового квантового каналу є найбільш важливою для тих випадків, коли стан каналу є чистим. Припустимо, що вектор стану каналу є деякою суперпозицією векторів базису, індукованого власними станами вимірюваних спостережуваних

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |m_k\rangle \otimes |n_k\rangle : \sum_k |\psi_k|^2 = 1$$

Можна впорядкувати стани частинок таким чином, аби номери станів m_k, n_k співпадали з номером k члена в суперпозиції.

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |k\rangle \otimes |k\rangle \quad (55) \quad \text{і дорівнює}$$

Стан кожної з частинок каналу не є чистим. Він отримується з матриці густини чистого стану композитної системи усередненням по станах другої частинки

$$\hat{\rho}^{(A)} = \sum_{\forall n} (n|\psi\rangle\rangle \langle\langle\psi|n\rangle) \quad (56)$$

Після підстановок і спрощень

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(A)} &= \sum_{\forall n} (n| \sum_{k,k'} \psi_k \psi_{k'}^* |k\rangle \langle k'| |k\rangle \langle k'| |n\rangle) \\ &= \sum_{\forall n,k,k'} (n|k\rangle \psi_k \psi_{k'}^* |k\rangle \langle k'| |k\rangle \langle k'| |n\rangle) \\ &= \sum_{\forall n,k,k'} \delta_{n,k} \psi_k \psi_{k'}^* |k\rangle \langle k'| \delta_{k',n} \end{aligned}$$

отримуємо матриці густини станів частинок

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(A)} &= \sum_k |\psi_k|^2 |k\rangle \langle k|; \\ \hat{\rho}^{(B)} &= \sum_k |\psi_k|^2 |k\rangle \langle k|. \end{aligned} \quad (57)$$

Оскільки ці стани є мішаними, вони мають ентропію переплутування

$$S^{(A,B)} = - \sum_k |\psi_k|^2 \log_2 |\psi_k|^2, \quad (58)$$

яка може обертатись на нуль тільки в тому разі, коли в суперпозиції (30) тільки один з коефіцієнтів відмінний від нуля (він тоді еквівалентний одиниці).

Розглянемо тепер інформаційну оцінку процесу вимірювання. Оскільки стани частинок реєструються з ймовірностями $p_k = |\psi_k|^2$, інформація, що отримується при черговому вимірюванні частинки сорту A або B в стані k , дорівнює $I_k = -\log_2 p_k = -\log_2 |\psi_k|^2$. Ці значення цілком узгоджуються з величиною сигнатур каналів.

Розглянемо тепер сумісну ймовірність реєстрації m -того стану частинки A -того сорту і n -того стану частинки B -того сорту. Вона обчислюється, як середнє значення добутку двох проєкторів

$$p_{m,n} = \text{Tr}(|\psi\rangle\rangle \langle\langle\psi| |m\rangle \langle m| |n\rangle \langle n|) \quad (59)$$

$$p_{m,n} = \sum_k |\psi_k|^2 \delta_{n,k} \delta_{k,m} = p_m \delta_{n,m}. \quad (60)$$

Для кожного значення m в цій сумі лишається тільки один член з певним номером k і n має відповідати тому ж номеру k . Таким чином, вимірювання станів частинок є повністю корельованими - вимірювання k -того стану однієї частинки обов'язково супроводжується вимірюванням того ж k -того стану другої.

Чисті стани відрізняються тим, що в процесі їх створення ніякої інформації в канал не заноситься - канал готується в одному чистому стані для кожної чергової спроби вимірювання. Як наслідок, статистичні відхилення результатів вимірювань від спроби до спроби дають інформацію, яка в канал не закладалась, ця інформація народжена в процесі вимірювання каналу. Причиною народження інформації в кожному вимірюванні є несутимість (некомутативність відповідних матриць) аналізатора, що готує стан для переносу в каналі з тим аналізатором, що здійснює редукцію стану перед детектуванням. Саме в процесі редукції стану каналу аналізатором вимірювального приладу і створюється нова інформація.

4.3 Виродженість станів

Класичними чи квантовими будуть кореляції між частинками двочастинкового квантового каналу переносу інформації, залежить від властивостей власних значень та власних векторів матриці густини, але ця залежність не є надто прозорою.

Легко впізнається канал з незалежними частинками, матриця густини якого має власними векторами добутки власних векторів підканалів, а власними значеннями - добутки власних значень.

$$\hat{\rho}^{(A)} \otimes \hat{\rho}^{(B)} |m\rangle \otimes |n\rangle = \rho_m^{(A)} \rho_n^{(B)} |m\rangle \otimes |n\rangle \quad (61)$$

Так само легко визначаються властивості чистого стану - такий стан або має незалежні частинки, або є переплутаним.

Найскладнішою є межа між переплутаними станами та сумішами незалежних станів, оскільки суміш переплутаних станів може мати такі ж властивості, як і суміш незалежних. Прикладом такої суміші переплутаних станів є рівноважна суміш станів $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,0\rangle \pm |1,1\rangle)$. Матриці густини кожного з станів

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{\pm} = & \frac{1}{2} \left(|0,0\rangle \langle 0,0| + |1,1\rangle \langle 1,1| \right) \\ & \pm \frac{1}{2} \left(|1,1\rangle \langle 0,0| + |0,0\rangle \langle 1,1| \right) \end{aligned}$$

містять діагональні компоненти та інтерференційні члени, тоді як їх рівноважна суміш

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{1/2} &= \frac{1}{2} (\hat{\rho}_{+} + \hat{\rho}_{-}) \\ &= \frac{1}{2} \left(|0,0\rangle \langle 0,0| + |1,1\rangle \langle 1,1| \right) \end{aligned}$$

має тільки діагональні члени і є знов-таки рівноважною сумішшю незалежних станів

$$|0,0\rangle \langle 0,0| = |0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 0|;$$

$$|1,1\rangle \langle 1,1| = |1\rangle \langle 1| \otimes |1\rangle \langle 1|.$$

Наведений приклад свідчить, що тільки серед чистих станів легко відрізнити незалежні від переплутаних, тоді як суміш переплутаних станів може бути повністю еквівалентною до суміші незалежних і питання про ефективні критерії існування чи відсутності квантових кореляцій в заданому мішаному стані залишається відкритим.

Важливо, що перетворення суміші переплутаних станів на суміш незалежних, принаймні в цьому прикладі, супроводжується виродженням матриці густини. Нерівноважна суміш переплутаних станів

$$\hat{\rho}_{p \neq 1/2} = p \hat{\rho}_{+} + (1-p) \hat{\rho}_{-}$$

$$= \frac{1}{2} \hat{1} + (p-1/2) \left(|1,1\rangle \langle 0,0| + |0,0\rangle \langle 1,1| \right)$$

має матрицю густини, в якій залишаються некомпенсованими інтерференційні члени, що й забезпечують квантову кореляцію між частинками двочастинкового квантового каналу переносу інформації.

5 Розплутування станів

Побудована вище класифікація станів двочастинкового квантового каналу переносу інформації по власних значеннях матриць густини кожної з частинок каналу дає можливість ефективно досліджувати властивості реальних каналів, в тому разі й найважливішу з них - переплутаність станів.

Канали переносу інформації з класичними властивостями є такими ж самими квантовими каналами, що і усі інші, але в процесі переносу інформації весь (або майже весь) час знаходяться в станах, що не мають квантових особливостей, отже не є переплутаними. Квантовий канал переносу інформації (принаймні двочастинковий) має всього два чистих стани не переплутаними і сподіватись, що техніка створення станів каналу є настільки бездоганною, що не домінує до переплутаних станів деяку частку переплутаних, було б занадто високою оцінкою досконалості техніки переносу інформації - мають існувати інші підстави відсутності переплутаності в типових станах класичних каналів переносу інформації.

5.1 Виродження матриці густини

Загальні, тобто такі, що не мають жодних особливих властивостей, мішані стани є переплутаними, тому причиною відсутності переплутаності може бути тільки залежність матриці густини як ермітової матриці з власними значеннями та власними векторами до множини матриць зі спеціальними властивостями. До спеціальних

властивостей ермітової матриці в скінченновимірному просторі належить тільки виродження власних значень.

Далеко не завжди виродження власних значень матриці густини має наслідком розплутування станів. Дійсно, з одного боку, повністю вироджена матриця густини пропорційна одиничній матриці, яка є добутком одиничних матриць підсистем, тому вона є добутком матриць густини станів підсистем, а отже відповідає незалежним підканалам переносу інформації. З другого боку, виродження властиве, в тому разі, кожному чистому стану, в якому матриця густини є $N-1$ -кратно виродженою ($\rho_k^{deg} = 0$), але серед чистих станів тільки два відповідають незалежним підканалам переносу інформації. Таким чином, тільки для деяких пар власних значень результатом виродження матриці густини є розплутаність стану.

5.1.1 Розплутування паракубіту

Найпростіший приклад двочастинкового квантового каналу переносу інформації – паракубіт є доволі простим прикладом впливу виродження матриці густини на розплутування станів.

Загальний стан паракубіту має матрицю густини у вигляді суми

$$\hat{\rho} = p_{00} |0, 0\rangle \langle 0, 0| + p_{11} |1, 1\rangle \langle 1, 1| + p_s \hat{\rho}_s + p_t \hat{\rho}_t, \quad (62)$$

з часткою p_s синглетного стану, частками p_{00} та p_{11} станів незалежних частинок та часткою p_t переплутаного триплетного стану. Ймовірності станів задовольняють умови $p_s = 1 - p_{00} - p_{11} - p_t$, $p_{00} \geq 0$, $p_{11} \geq 0$, $p_t \geq 0$, $p_s \geq 0$.

В індукованому базисі ця ж матриця має вигляд

$$\bar{\rho} = p_{00} |0\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 0| + p_{11} |1\rangle \langle 1| \otimes |1\rangle \langle 1| + \frac{p_t + p_s}{2} (|0\rangle \langle 0| \otimes |1\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 1| \otimes |0\rangle \langle 0|) + \frac{p_t - p_s}{2} (|0\rangle \langle 1| \otimes |1\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 0| \otimes |0\rangle \langle 1|), \quad (63)$$

в якому добре виділяється частина, що відповідає за переплутування станів (останній рядок). Ця частина зникає, якщо співпадають частка синглетного та переплутаного триплетного станів $p_s = p_t$.

Зникнення переплутаності станів в наведеному прикладі відбувається за рахунок виродження матриці густини – співпадіння власних значень p_s та p_t , що відповідають переплутаним станам.

Співпадіння будь-якої іншої пари власних значень, а ні p_{00} з p_{11} або p_t або p_s , а ні p_{11} з p_t або p_s не породжує розплутування станів – розплутаність є проявом спеціального виродження матриці густини.

5.1.2 Розплутування паракутриту

Довільний стан паракутриту є зваженою сумішшю чистих станів і може бути зображений у вигляді

$$\bar{\rho}_p = \sum_{m=\pm 1/2} p_{1/2,m} |1/2, m\rangle \langle 1/2, m| + \sum_{m=\pm 1/2, \pm 3/2} p_{3/2,m} |3/2, m\rangle \langle 3/2, m|,$$

суміш двох станів $|1/2, \pm 1/2\rangle$ з повним моментом $1/2$ (перша сума) та чотирьох станів $|3/2, \pm 1/2\rangle$, $|3/2, \pm 3/2\rangle$ з повним моментом $3/2$.

Зображення матриці густини в індукованому базисі містить шість звичайних добутків та чотири інтерференційних

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_p = & p_{3/2,+3/2} |1\rangle \langle 1| \otimes |1/2\rangle \langle 1/2| + p_{3/2,-3/2} |-1\rangle \langle -1| \otimes |-1/2\rangle \langle -1/2| \\ & + \left(\frac{1}{3} p_{3/2,1/2} + \frac{2}{3} p_{1/2,1/2} \right) |1\rangle \langle 1| \otimes |-1/2\rangle \langle -1/2| + \left(\frac{1}{3} p_{3/2,-1/2} + \frac{2}{3} p_{1/2,-1/2} \right) |-1\rangle \langle -1| \otimes |1/2\rangle \langle 1/2| \\ & + \left(\frac{2}{3} p_{3/2,1/2} + \frac{1}{3} p_{1/2,1/2} \right) |0\rangle \langle 0| \otimes |1/2\rangle \langle 1/2| + \left(\frac{2}{3} p_{3/2,-1/2} + \frac{1}{3} p_{1/2,-1/2} \right) |0\rangle \langle 0| \otimes |-1/2\rangle \langle -1/2| \\ & + \frac{\sqrt{2}}{3} \left[\left(p_{3/2,1/2} - p_{1/2,1/2} \right) (|1\rangle \langle 0| \otimes |-1/2\rangle \langle 1/2| + |0\rangle \langle 1| \otimes |1/2\rangle \langle -1/2|) \right. \\ & \left. + \left(p_{3/2,-1/2} - p_{1/2,-1/2} \right) (|-1\rangle \langle 0| \otimes |1/2\rangle \langle -1/2| + |0\rangle \langle -1| \otimes |-1/2\rangle \langle 1/2|) \right]. \end{aligned} \quad (64)$$

В квадратних дужках виділені члени, що відповідають за переплутаність станів. Можливе часткове ($p_{3/2,\pm 1/2} = p_{1/2,\pm 1/2}$; $p_{3/2,\mp 1/2} \neq p_{1/2,\mp 1/2}$) або повне ($p_{3/2,1/2} = p_{1/2,1/2}$; $p_{3/2,-1/2} = p_{1/2,-1/2}$) розплутування станів.

Серед частково вироджених виділяються стани, в яких залишається внесок тільки двох базисних станів, наприклад, суміші станів $|3/2, 3/2\rangle \langle 3/2, 3/2|$ та $|3/2, 1/2\rangle \langle 3/2, 1/2|$ з ймовірностями $(1 \pm d)/2$.

$$\hat{\rho}_p = +\frac{1}{2}(1-d/3)|1\rangle\langle 1| \otimes |-1/2\rangle\langle -1/2| + \frac{1}{2}(1+d/3)|0\rangle\langle 0| \otimes |1/2\rangle\langle 1/2| + \frac{\sqrt{2}}{3}d\left[|1\rangle\langle 0| \otimes |-1/2\rangle\langle 1/2| + |0\rangle\langle 1| \otimes |1/2\rangle\langle -1/2|\right] \quad (65)$$

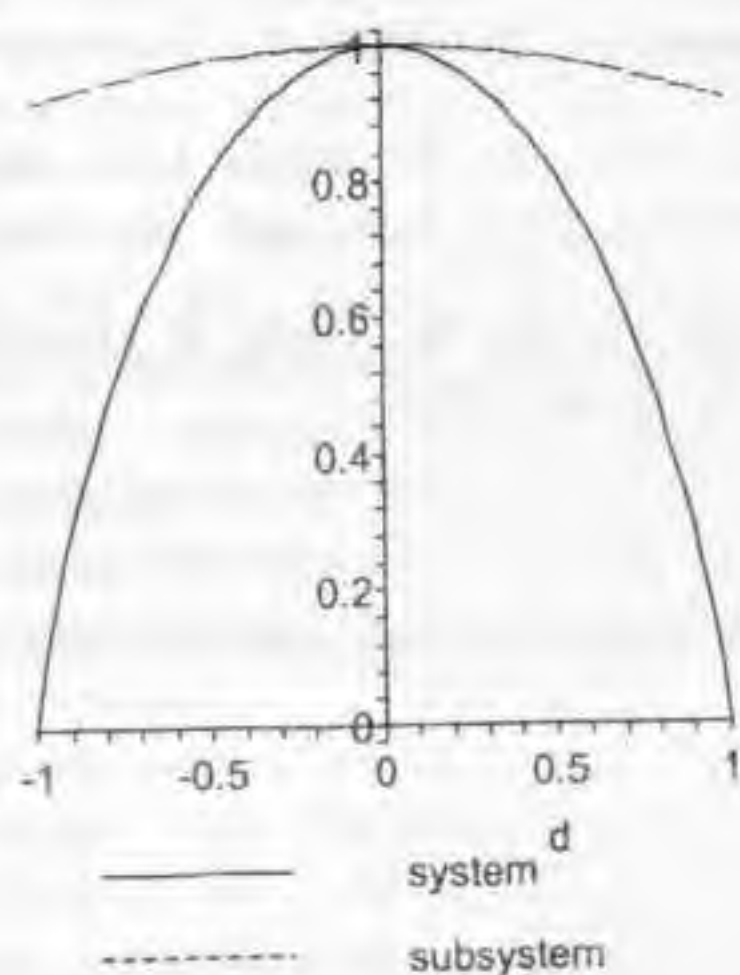


Рис.1. Залежність ентропій паракутриту і його кубіту від невиродженості стану.

Ентропії такого стану та його піденстем дорівнюють $S_{sys} = h\left(\frac{1+d}{2}\right)$, $S_A = S_B = h\left(\frac{1+d/3}{2}\right)$ (тут використано позначення $h(x) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x)$).

Повному виродженню власних значень матриці густини відповідає значення міри невиродженості $d = 0$. Графік Рис.1. зображує залежність ентропій паракутриту та однієї з його частинок від міри невиродженості стану. Повністю виродженому стану відповідає однакове значення ентропій паракутриту та однієї з його частинок, що властиве для класичного дублювання інформації. Довільне відхилення від виродження супроводжується перевищенням ентропії кубіту над ентропією системи внаслідок переплутаності стану паракутриту.

Висновки

Двочастинкові паралельні квантові канали переносу інформації можуть бути класифіковані за рівнем виродженості ненульових власних значень матриці густини.

Серед невироджених станів виділяється двовимірний множина переплутаних станів, всі інші невироджені стани є переплутаними.

Виродження власних значень може в спеціальних випадках супроводжуватись втратою переплутаності (розплутуванням) стану.

Перевищення ентропії кожного з підканалів над ентропією паралельного квантового каналу переносу інформації свідчить про переплутаність стану.

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. Klímov 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] Życzkowski 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 редколегії 14 лютого 2007 р.

УДК 535.34

І.А. Шайкевич, д.ф.-м.н., проф.
Я.А. Шибіко, аспірант
Л.Ю. Мельниченко, к.ф.-м.н., ст.н.с.
В.В. Пророк, к.ф.-м.н., ст.н.с.

Спектральні залежності еліпсометричних параметрів тонких плівки високопровідних металів при збудженні поверхневих поляритонів

Розраховані спектральні залежності еліпсометричних параметрів при збудженні поверхневих поляритонів за методом Кречмана для плівок високо провідних металів Au, Ag, Cu і Al. Розрахунки проводились по формулам Ейрі. Одержані результати показали, що для всіх вищезазначених високо провідних металів на спектральних залежностях величини $\text{tg } \Psi$, де Ψ - азимут відновленої лінійної поляризації, спостерігаються максимуми в ультрафіолетовій ділянці спектру, які співпадають по довжинам хвиль з максимумами на спектральних кривих оптичної провідності. Таким чином спектральні залежності еліпсометричних параметрів при збудженні поверхневих поляритонів можуть використовуватись для плівок високопровідних металів для дослідження міжзонних переходів.

Ключові слова : тонкі плівки, поверхневі поляритони, еліпсометричні параметри, спектральні залежності.

*E-mail: shaykevi@univ.kiev.ua

I.A. Shaykevich, prof.
Ya.A. Shybiko, post grad.stud.
L.Yu. Melnichenko, senior research.
V.V. Prorok, senior research

Spectral dependencies of ellipsometric parameters of high conductive thin films with excitation of surface polaritons

Spectral dependencies of ellipsometric parameters with excitation of surface polaritons with Kretschmann method for thin film of high conductive metals Au, Ag, Cu and Al were calculated. The calculations were carried on Airy formulas. Obtained results show that for all these high conductive metals at spectral dependencies of $\text{tg } \Psi$ (Ψ is azimuth of the restored linear polarization) there are maximums at ultraviolet region. Wavelengths of these maximums coincident with wavelengths of maximums at spectral dependencies of optical conductivity for these films. So, spectral dependencies of ellipsometric parameters of high conductive thin films with excitation of surface polaritons may be used for investigation of interband transitions at high conductive metal films.

Key Words: thin films, surface polaritons, ellipsometric parameters, spectral dependencies.

Вступ

Оптичні біосенсори і оптичні сенсори для малих молекулярних забруднень в екології із збудженням поверхневих поляритонів за методом Кречмана працюють на вимірюванні коефіцієнта відбивання. При цьому використовують як залежність коефіцієнту відбивання від кута падіння при сталій довжині світлової хвилі. (лазерні сенсори), так і залежність коефіцієнту відбивання від довжини світлової хвилі при сталому куті падіння (спектральні сенсори). Суть роботи таких сенсорів полягає в тому, що для перших при попаданні на тонку металічну плівку сенсора малого молекулярного забруднення відбувається

зміщення поляритонного мінімуму для кутової залежності коефіцієнта відбивання по куту падіння, а для других зміщення поляритонного мінімуму для коефіцієнта відбивання на спектральній залежності коефіцієнта відбивання по довжині хвилі. Найчастіше використовуються в ролі тонких металічних плівок в таких сенсорах плівки благородних металів золота і срібла, а іноді і бінарні сенсори, де золота плівка нанесена згори срібної [1]. Останнє зумовлено тим, що золото з усіх металів найменше піддається окисленню і градування сенсора не треба кожного разу перевіряти перед черговим вимірюванням. Для найкращої роботи сенсора необхідно вибрати таку товщину робочої плівки

металу, при якій поляритонний мінімум найбільш глибокий, бо при цьому чутливість сенсору найбільша. Але слід відзначити, що вимірювання еліпсометричних параметрів при збудженні поверхневих поляритонів за методом Кречмана, а саме зсуву фаз між p - та s -компонентами відбитої хвилі Δ і азимута відновленої лінійної поляризації Ψ , дає більш точні результати по дослідженню малих молекулярних забруднень, ніж вимірювання коефіцієнту відбивання. Крім того ці вимірювання дозволяють визначати значно більше величин, які характеризують молекулярний шар, що знаходиться на сенсорі. Нарешті, для азимута відновленої лінійної поляризації Ψ існує теж поляритонний мінімум, чутливий до тонких молекулярних шарів, розташованих на сенсорі. При цьому також треба знайти таку товщину робочої металічної плівки сенсора, при якій мінімум найглибший. Це найкраще зробити шляхом відповідних розрахунків. Тому нами були проведені розрахунки спектральних залежностей еліпсометричних параметрів металічних плівок високопровідних металів Au , Ag , Cu і Al при збудженні поверхневих поляритонів за методом Кречмана.

Постановка задачі

Для розрахунку спектральних залежностей еліпсометричних параметрів тонких плівок Au , Ag , Cu і Al використовувались формули Ейрі [2]. Розглядався випадок падіння світла з боку підкладки, бо саме при цьому збуджуються поверхневі поляритони за методом Кречмана. Розрахунки проводились по методиці, описаній в [3], з тією різницею, що в [3] змінними величинами були кут падіння ϕ_i і товщина металічної плівки d при сталій величині довжини світлової хвилі λ . В даній роботі змінними величинами є довжина світлової хвилі λ і товщина плівки d , а кут падіння світла ϕ_i береться сталим. Для кожного з вищенаведених металів кут падіння вибирається згідно з [3] так, щоб поляритонний мінімум був найглибшим для величини $tg\Psi$. Розраховувалися залежності величин $tg\Psi$ і $\cos\Delta$ від довжини світлової хвилі для кожного металу. Оптичні сталі для різних довжин хвиль для вищенаведених металів бралися з [4].

Результати, та їх обговорення

Оскільки більш цікавий фізичний зміст з точки зору збудження поверхневих поляритонів

мають спектральні залежності азимута відновленої лінійної поляризації Ψ , то саме їх ми будемо наводити і обговорювати. На рис.1 приведена спектральна залежність величини $tg\Psi$ від довжини світлової хвилі λ для плівки золота товщиною 56 нм. Кут падіння ϕ_i був вибраним 44° , бо згідно [3] саме при такій товщині плівки Au для кута падіння $\phi=44^\circ$ має місце найглибший поляритонний мінімум. Як видно з рис.1 існує максимум на кривій залежності $tg\Psi$ від λ приблизно при $\lambda \approx 400$ нм. Такий же максимум існує і на кривій оптичної провідності золота $\sigma(\lambda)$, приведений в [5]. Довжини хвиль обох максимумів співпадають.

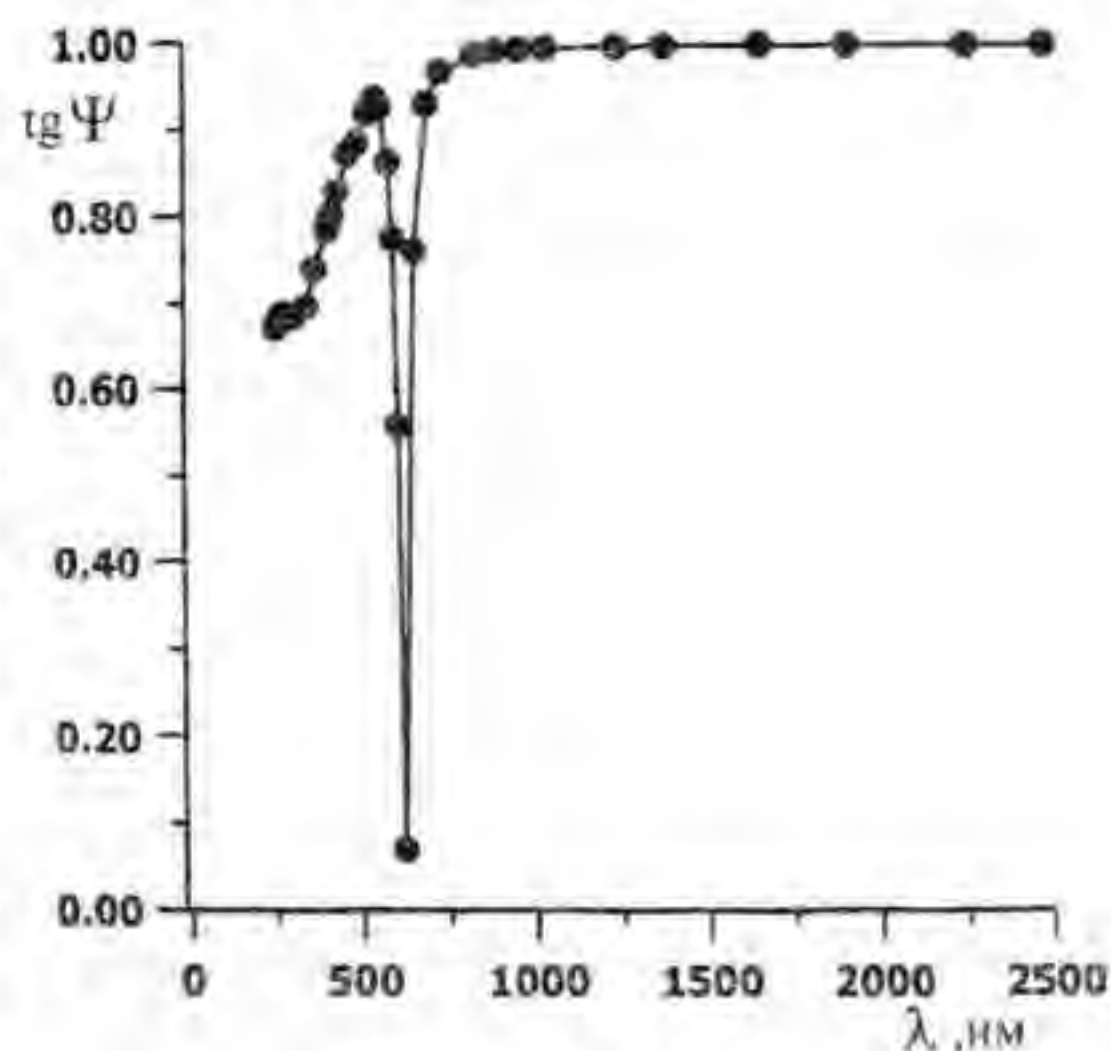


Рис. 1

В [6,7] наведено енергетичний спектр золота. Виходячи з енергетичного спектру можна зробити цілком вірогідне припущення, що одержаний максимум (рис.1) обумовлений електронними переходами із станів, які лежать під самим рівнем Фермі, на стани, які лежать над самим рівнем Фермі поблизу точки X зони Бріллюена. Енергетичне співпадання при цьому цілком задовільне. Отже спектральна залежність величини $tg\Psi$ на рис.1 якісно співпадає з залежністю оптичної провідності σ для золота [5], що дає можливість спостерігати міжзонні переходи в золоті за допомогою поляритонних досліджень. Аналіз рис.1 показує, що величина $tg\Psi$ в довгохвильовій ділянці спектру практично є сталою величиною із значенням близьким до одиниці. Це обумовлено значним вкладом вільних електронів в оптичні сталі золота в довгохвильовій ділянці спектру.

На рис.2 показана спектральна залежність величини $tg\Psi$ від довжини світлової хвилі λ для

тонкої плівки срібла при куті падіння $\phi_1=44^\circ$. Товщина плівки згідно [3] була обрана 23 нм. На рис.2 теж спостерігається значний максимум для $\text{tg}\Psi$ в далекій ультрафіолетовій ділянці спектру. І знову цей максимум співпадає по довжині хвилі з відповідним максимумом для оптичної провідності σ на спектральній залежності σ від довжини хвилі λ приведений в [5] для Ag.

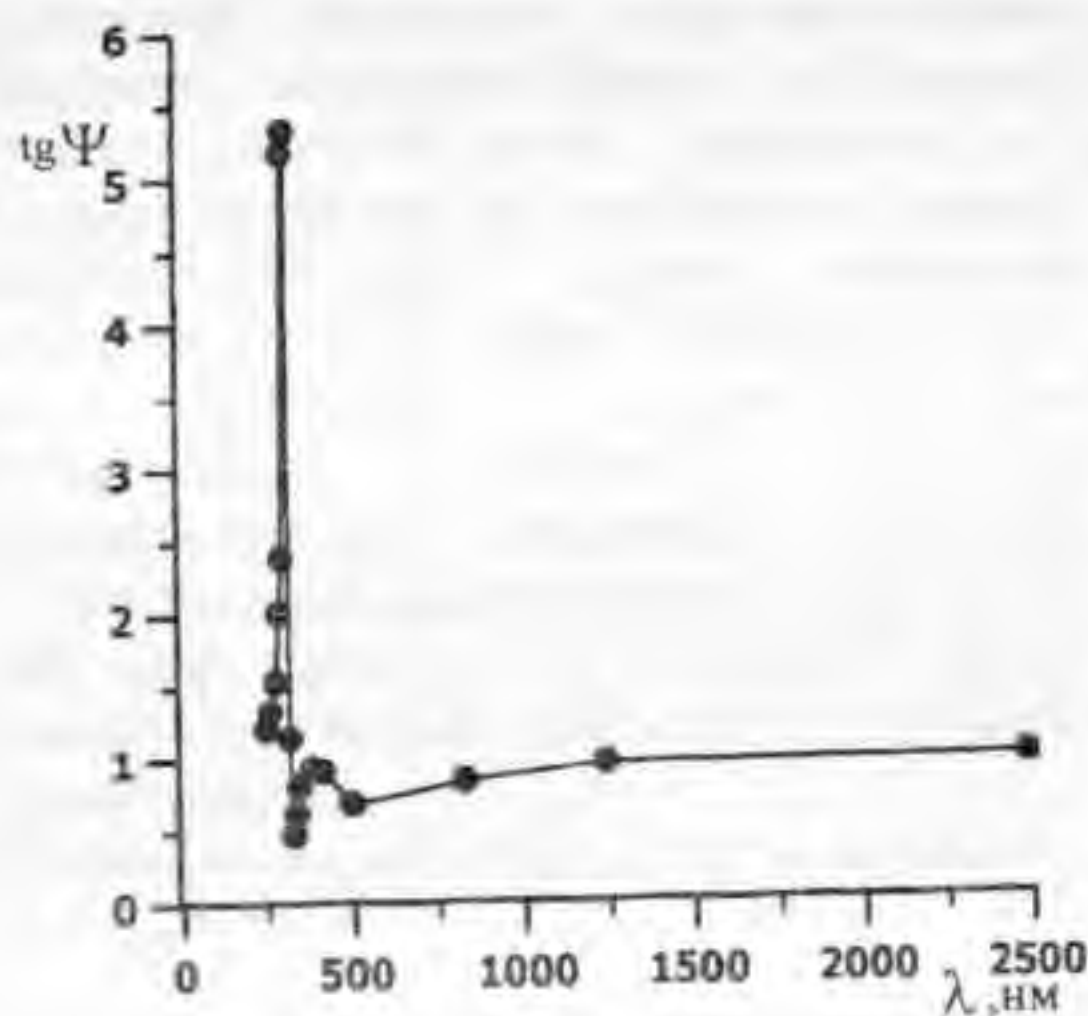


Рис. 2

Слід відзначити, що максимальне значення $\text{tg}\Psi$ перевищує одиницю, тобто величину $\text{tg}\Psi$ для падаючого випромінювання, що пояснюється більшим збудженням p -компоненти відбитого світла у порівнянні з s -компонентою при поляритонних дослідженнях. В довгохвильовій ділянці спектру залежність $\text{tg}\Psi$ від λ на рис.2 для Ag аналогічна тій, що була для Au на рис.1. Пояснення може бути таке ж, як і для Au.

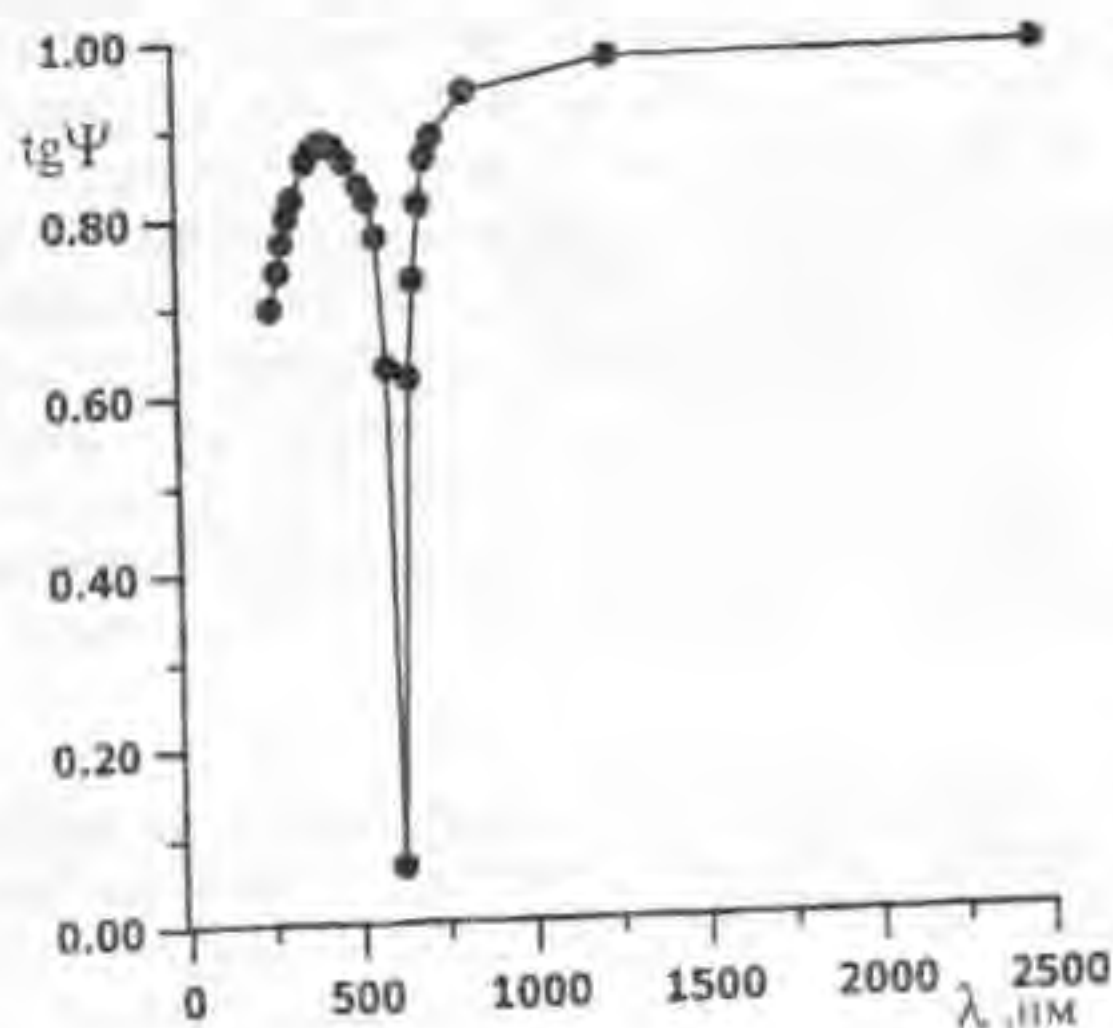


Рис. 3

На рис.3 приведена залежність величини $\text{tg}\Psi$ від довжини хвилі λ для міді. Згідно [3] кут падіння був вибраний $\phi_1=44^\circ$, а товщина плівки Cu $d=44$ нм. Як впливає з рис.3 ультрафіолетовий максимум для величини $\text{tg}\Psi$ досить широкий. Такий же широкий максимум існує і для Cu на спектральній залежності σ від довжини хвилі λ в [5]. І знову для Cu, як і для Au і Ag має місце співпадання ходу спектральної залежності $\text{tg}\Psi$ із ходом спектральної залежності σ в ультрафіолетовій ділянці спектру, тобто в області потужних міжзонних переходів. Згідно [7,8], де наведено енергетичний спектр міді, можна вважати, що цей максимум зумовлений міжзонними переходами в околиці L і X точок зони Бріллюена із енергетичних станів, що лежать нижче рівня Фермі в електронні стани, що лежать вище рівня Фермі, а саме: $(X_5 \rightarrow X_4', L_3 \rightarrow L_2' \text{ і } L_2' \rightarrow L_1)$.

Нарешті, на рис.4 наведено спектральну залежність величини $\text{tg}\Psi$ для тонкої плівки алюмінію. Кут падіння був вибраний згідно [3] $\phi_1=42^\circ$, а товщина плівки $d=12$ нм. Ця залежність ще більш цікава, ніж у попередніх металів. На рис.4, крім збільшення величини $\text{tg}\Psi$ в бік малих довжин хвиль в ультрафіолетовій ділянці спектру спостерігається ще максимум в ділянці $\lambda \sim 800$ нм. Оптична провідність для алюмінію вивчалась в ряді робіт, зокрема в [4,9,10]. У всіх цих роботах спостерігався максимум оптичної провідності для $\lambda \sim 800$ нм. Аналогічний максимум відзначений і в [6].

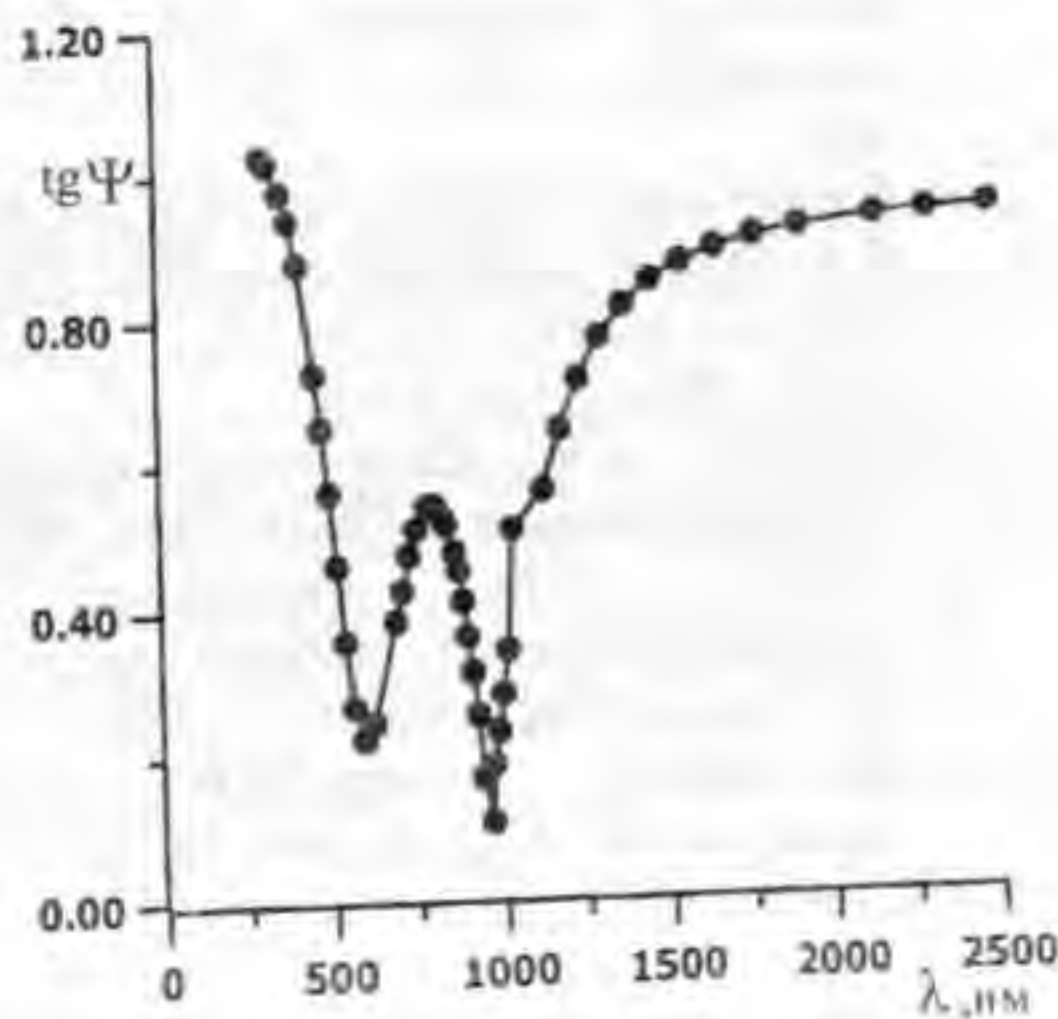


Рис. 4

Цей максимум може бути пояснено, виходячи з енергетичної зонної структури для Al, приведеної в [8], міжзонними переходами в

околиці W і K точок зони Бріллюена із заповнених енергетичних станів W_3 і Σ_3 в незаповнені стани W_1 і Σ_1 . Таким чином і для Al спектральні залежності величини $tg\psi$ дозволяють спостерігати міжзонні переходи.

Висновки. Одержані спектральні залежності величини $tg\psi$ для Au , Ag , Cu і Al показують, що на них спостерігаються максимуми, які відповідають максимумам на, відомих з літератури, спектральних залежностях оптичної провідності для цих металів. Це дозволяє зробити висновок, про те, що для високопровідних металів дослідження еліпсометричних параметрів при збудженні поверхневих поляритонів за методом Кречмана дозволяють досліджувати міжзонні переходи в цих металах. В довгохвильовій ділянці спектру, де за поглинання відповідають вільні електрони, для всіх досліджених металів величина $tg\psi$ практично стала.

Список використаних джерел

1. Shirshov Yu.M., Samoylov A.V., Zinyo S.A., Surovceva E.R., Mirskiy V. Bimetallic layers increase sensitivity of affinity sensors based on surface plasmon resonance// Sensors.- 2002.-2 -P.62-70.
2. Борн Е.М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970.- 855 с.
3. Шайкевич І.А., Мельниченко Л.Ю., Шибіко Я.А. Поляритонні властивості тонких металічних плівок // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2005.-№2.-С.477-485.
4. Weaver J.H., Krafka C., Lynch D.W., Koch E.E. Optical properties of metals. I,II. – Internal Report D.E.S.J.F41., Hasylab, 81/01, 1981.-172 p., 256 p.
5. Соколов А.В. Оптические свойства металлов. Москва: ГИФМЛ.-1961.- 464 с.
6. Носков М.М. Оптические и магнитооптические свойства металлов. Свердловск: ИНЦ АН СССР.- 1983.-219 с.
7. Достижения электронной теории металлов.- М.: Мир, 1, 1984.-280 с.
8. Харрисон Дж. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972.-616 с.
9. Мотулевич Г.П. Оптические свойства переходных металлов. Труды ФИ им.П.Н. Лебедева АН СССР.- 1971.-55.-С.3-150.
10. Шайкевич І.А., Мельниченко Л.Ю., Титарчук Б.Б. Вплив шорсткості

поверхні на вимірюванні оптичні сталі алюмінію // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2006.-№2.-С.481-486.

Надійшла до редколегії 15.05.07 р.

УДК 537

Слізаров О.І., д.ф.-м.н., проф., Слізаров М.О.,
Журав В.В., Руденко О.П., д.ф.-м.н., проф.

Особливості електропровідності дисперсної системи вологого ґрунту

В статті досліджено електропровідність дисперсного середовища ґрунту на прикладі модельного піщаного ґрунту в залежності від його зволоженості та зовнішнього тиску. Виявлено розмірний ефект зменшення провідності у тонких шарах ґрунту, що може бути практично важливим при антикорозійному захисті підземних металоконструкцій. Методом хемографії візуалізовано особливості перерозподілу вологи в ґрунті при накладанні електричного поля. Отримані результати розглянуті з позицій теорії протікання.

Ключові слова: провідність, ґрунт, розмірний ефект.

A.I. Yelizarov, PhD, M.A. Yelizarov, V.V. Zhurav,
A.P. Rudenko, PhD

Features of electrical conductivity of dispersed system of moisture soil

Electrical conductivity of dispersed system of moisture soil was studied in sandy soil conditions with different moisture and external pressure. The dimension effect has been discovered that conductivity decreases in thin layers of soil. It may be important practically for protection of underground hardware against rust. Features of repartition of moisture in the soil was visualized by a chemographic method when the electric field is applied. Obtained results have been examined from the position of percolation theory.

Key Words: conductivity, soil, dimension effect.

*E-mail: myel@vicard.net, VovaZhurav@mail.ru, maths@pdpu.poltava.ua

Вступ

Природні дисперсні середовища, до яких відносяться піски і ґрунти і які відіграють величезну роль в геологічних процесах, з фізичної точки зору вивчені недостатньо. Однією з причин цього є широка варіаторика їхніх властивостей, обумовлена розмірами частинок, які їх утворюють (від мікронів до міліметрів), відсотковим їх вмістом в загальній масі, рівнем зволоженості і т.д. Окрім самого складу дисперсної системи на її поведінку суттєво впливають силові поля взаємодії, типовими серед яких в природних умовах є ван-дер-ваальсівські сили і гравітація. І нарешті, кінцевий стан дисперсних систем значною мірою буде визначатися факторами зовнішнього впливу. Як приклад можна навести купку вільно насипаного сухого піску і правильні фігури його розподілу на поверхні металевої пластини, в якій збуджені коливання (фігури Хладні [1]). Не тепловий молекулярний рух, а зовнішні чинники фактично відіграють роль ентропійного фактора, і з цієї причини ми не можемо в пошуках рівноважного стану дисперсної системи однотипно ввести функцію мінімізації, аналогічну функції вільної енергії. Доповнена впливом зовнішніх збурень, зміна складу дисперсної системи, викликаючи широкомасштабні зміни ван-дер-ваальсівської взаємодії між піщинками, приводить до появи

багатьох специфічних явищ. Так піски демонструють анізотропію тиску на стінки посудини, яку вони займають, видають дивні звуки, так звані "співи пустель", утворюють просторово регулярні дюни, переносяться вітром на величезні відстані в самих пустелях і пиловими бурями навіть через океан. В ґрунтах неможливе повне замерзання води, і вона мігрує навіть у шарах вічної мерзлоти [2]. Вода взагалі найбільш суттєво впливає на властивості середовища, яке утворює собою пісок. Так, незначної кількості вологи достатньо, щоб сухий розсипчастий пісок почав активно злипатися за рахунок сил поверхневого натягу, але надлишок вологи в ньому перетворює пісок практично в рідину, яка, навпаки, не тримається купи. Оскільки сили поверхневого натягу залежать від радіусу кривизни піщинки, то здатність вологого піску злипатися сильною мірою залежить від середнього радіуса піщинок: чим дрібніший пісок, тим краще він злипається, і навпаки.

Вмістом вологи та розподілом її між піщинками та по їхній поверхні визначається також і електропровідність піску. Задана дослідження явища перенесення електричного заряду в дисперсній системі вологого ґрунту є практично важливою з огляду на те, що саме ґрунт є тим електролітично провідним середовищем, через яке при катодному захисті

підземних металоконструкцій [3] відбувається контакт конструкції з анодним заземленням. Вся корозійна наука для підземних споруд [3] (навіть та, що розглядає локальні корозійні процеси [4]) базується на тому, що вологий ґрунт вважається суцільним електролітом, що забезпечує цей контакт. Однак зрозуміло, що за умов зменшеної вологості це взагалі-то не так, оскільки дисперсна система ґрунту не є суцільним електролітом. В попередній роботі [5] на прикладі модельного піщаного ґрунту нами вже було експериментально встановлено залежність його провідності від об'ємної частки електроліту

в ґрунті (рис. 1, крива 1), а також показано, що ця залежність добре пояснюється за допомогою теорії протікання [6], тобто що провідність у зволоженому ґрунті відбувається за кластерним механізмом. Кластерний механізм провідності дисперсної системи ґрунту передбачає наявність розмірних ефектів, зокрема значне зменшення провідності для випадку тонких шарів ґрунту, адже у цьому разі геометрія системи суттєво порушує зв'язність провідного кластеру. Виявлення цих ефектів дало б вагомий аргумент на користь того, що провідність в ґрунті відбувається саме за кластерним механізмом. Ця

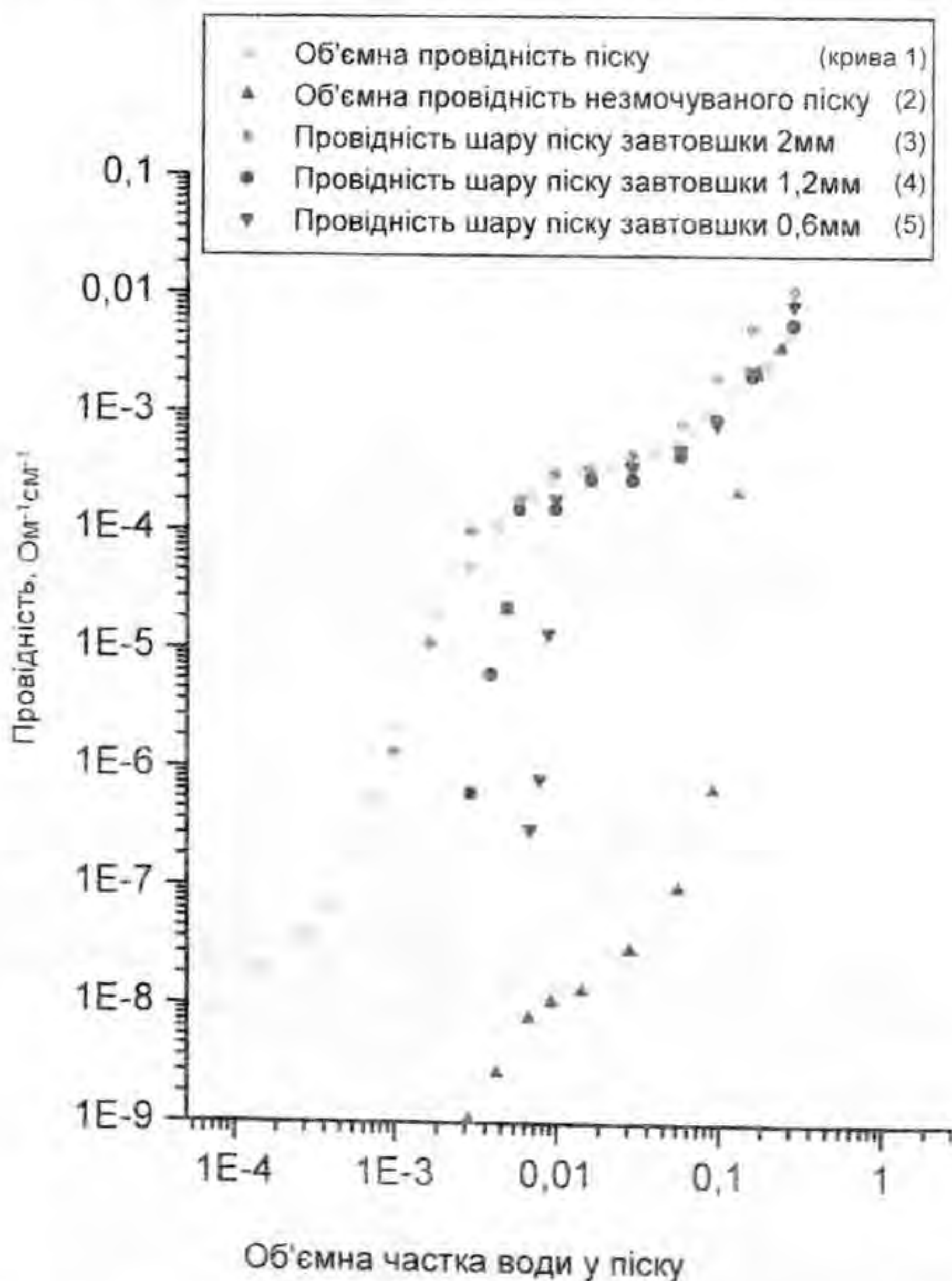


Рис. 1 Залежність провідності піску (пісок з незмочуваними піщинками, тонкі шари піску) від об'ємної частки води (дистильована вода) в ньому

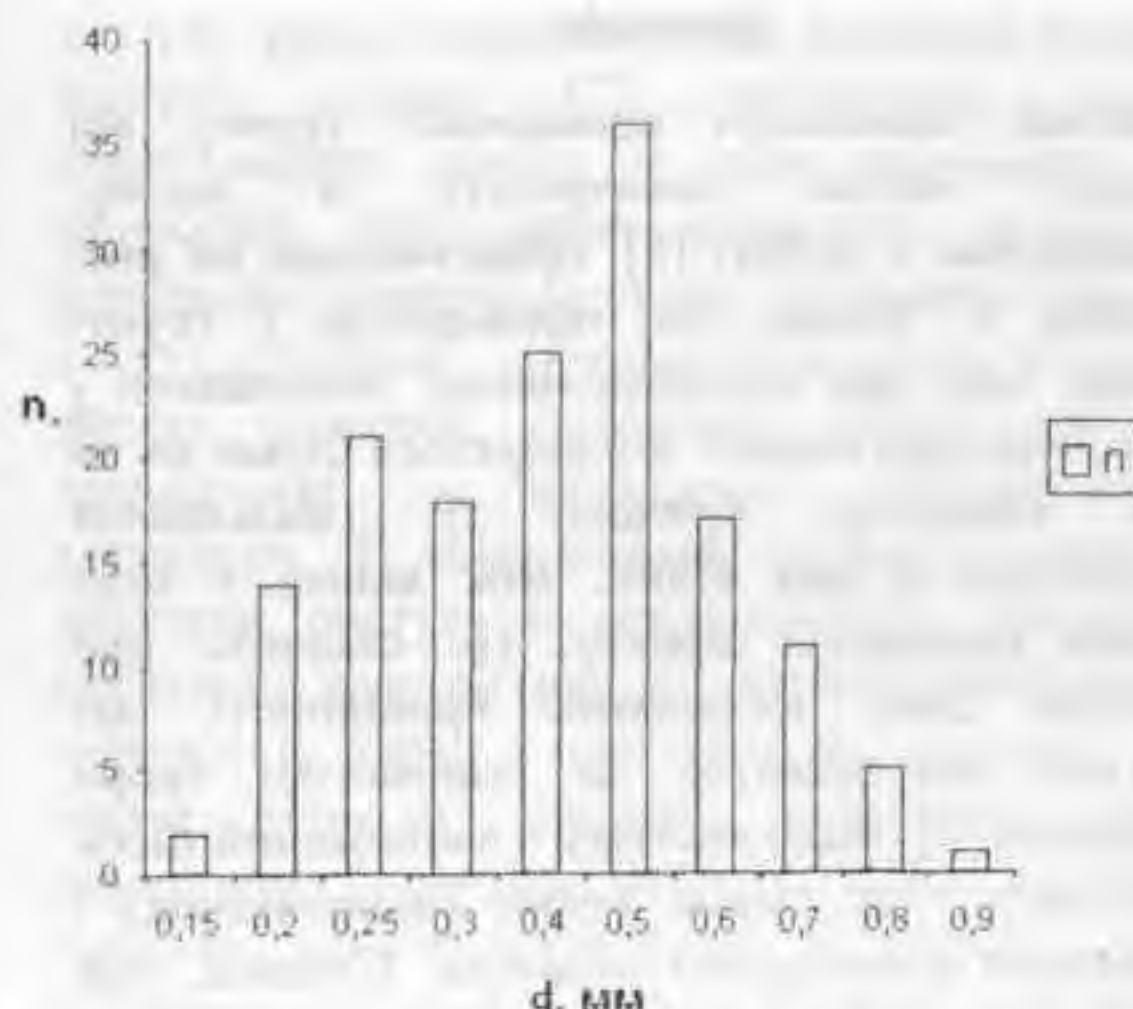


Рис. 2 Розподіл (n , %) піщинок досліджуваного ґрунту залежно від його діаметру d

робота присвячена експериментальним дослідженням провідності тонких шарів ґрунту залежно від його зволоженості.

Експеримент

В якості модельного ґрунту для досліджень брався річковий пісок, який кілька разів промивався звичайною водопровідною водою, а останні рази – дистильованою. Після цього пісок прожарювався для усунення органіки і знищення мікрофлори.

Вихолодий до кімнатної температури після прожарювання пісок використовувався для приготування модельного вологого піску. В порцію піску додавалась порція дистильованої

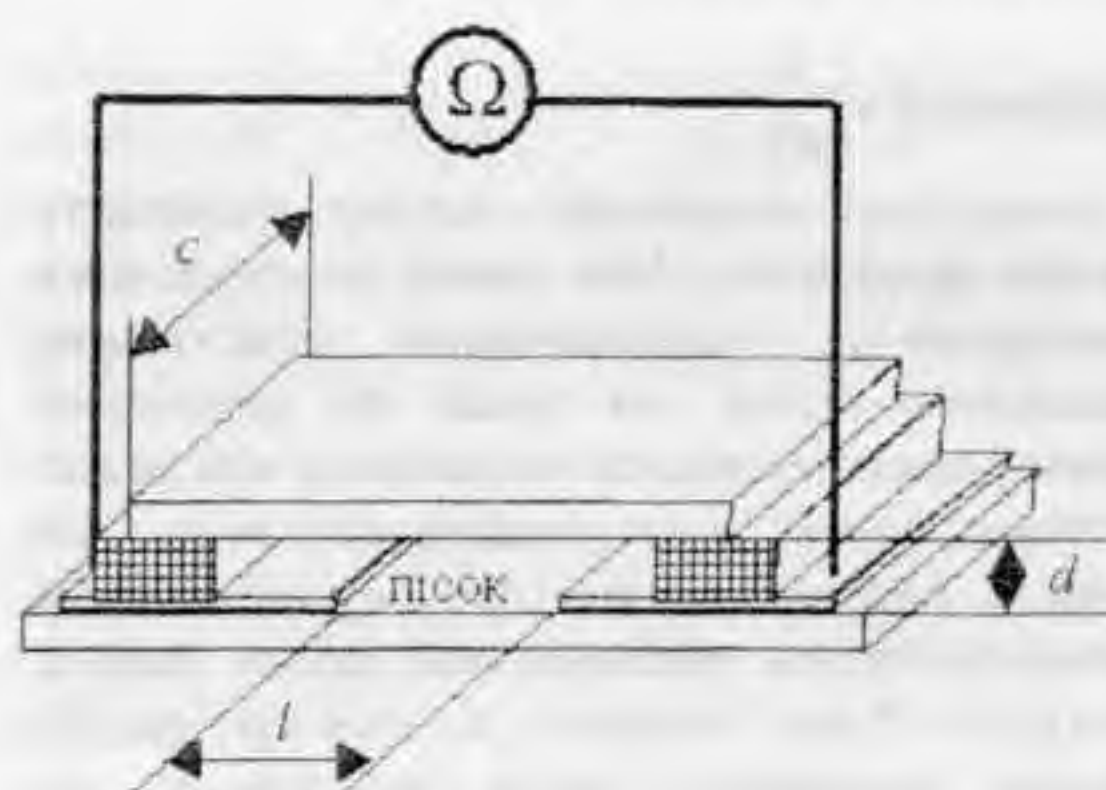


Рис. 3 Схема визначення питомої провідності тонкого шару піску

води, що становила певну частку від об'єму порції піску; далі суміш вручну ретельно перемішувалась до цілковитої однорідності.

За допомогою мікроскопу було одержано наведений на рис.2 розподіл піщинок по діаметру. В деяких дослідках використовувався пісок, що складався з виділених за допомогою просіювання піщинок певного середнього діаметру.

Питома провідність модельного зволоженого піску вимірювалась наступним чином. В об'єм піску занурювались дві однакові металеві пластини площею S , зафіксовані діелектричними деталями паралельно одна одній на відстані l . Зовнішні поверхні пластин були заізовані. Далі вся система – пісок із пластинами в ньому – утворювалась, доки пісок переставав осідати. Відтак опір піску вимірювався омметром, і питома провідність обчислювалась за

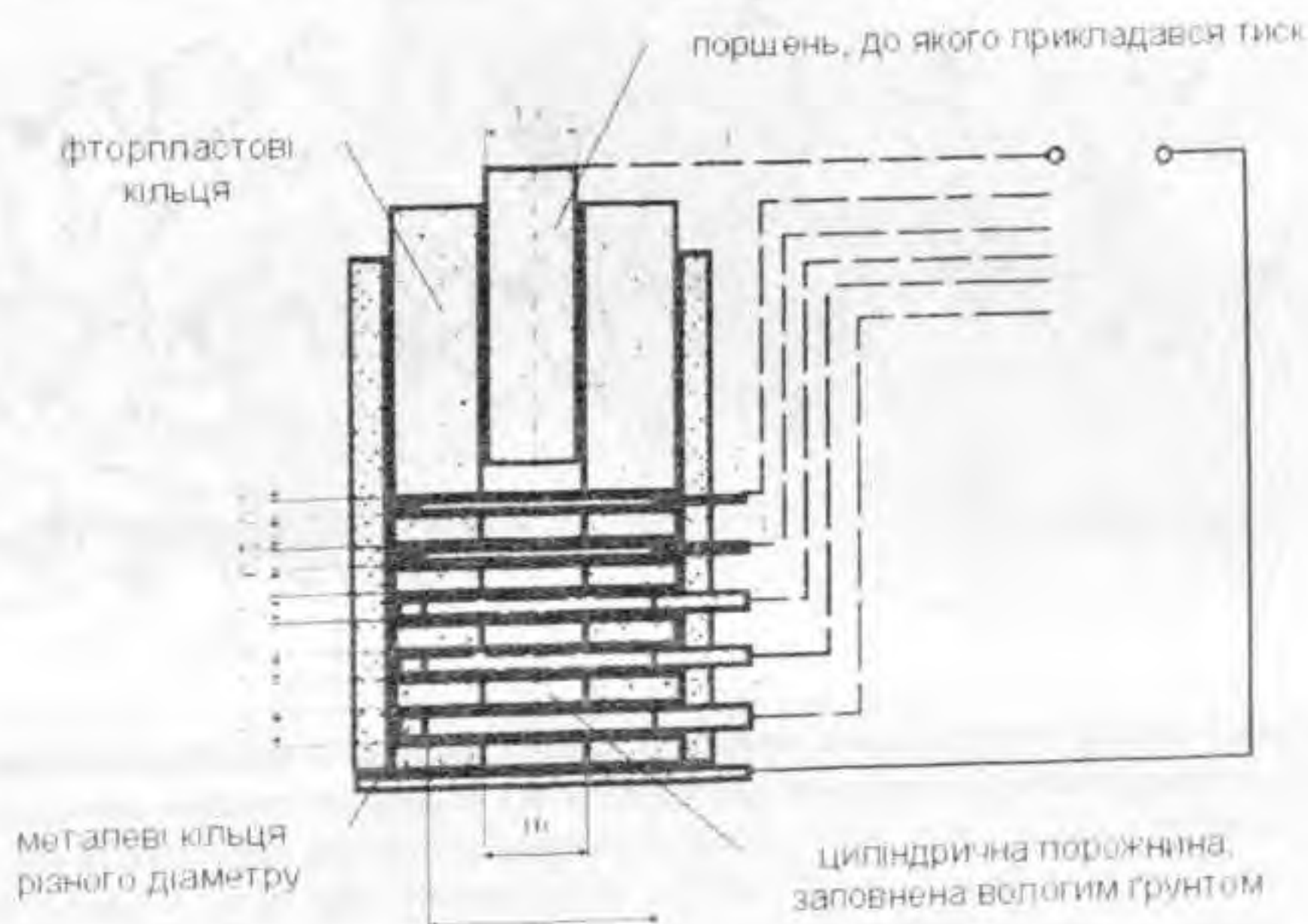


Рис. 4 Схема вимірювання сили струму в щілинах залежно від прикладеного тиску

формулою $\rho = \frac{l}{RS}$.

Аналогічно визначалась питома провідність тонкого шару піску. Між двома незмочуваними (навощеними) діелектричними пластинами, віддаленими одна від одної за допомогою діелектричних прокладок на невелику відстань d , містився тонкий шар ущільненого піску. На одній з пластин малися прямокутні металеві плівки-електроди, відстань між якими була l . Електроди було замкнуто на омметр (рис.3). Питома провідність піску визначалась як

$$\rho = \frac{l}{Rcd}$$

Схему вимірювання сили струму в щілинах, заповнених вологим піском, при різних значеннях тиску показано на рис. 4.

Дискусія

Вигляд залежності провідності ґрунту від об'ємної частки електроліту в ньому, встановлений в роботі [5], представлено на рис. 1, крива 1. Видно, що провідність у ґрунті виникає вже при цюнайменшому зволоженні і далі з додаванням води збільшується більш як на п'ять порядків, причому її збільшення відбувається в два етапи, між якими є етап певного насичення ефекту. Це свідчить про наявність двох механізмів провідності, які непогано пояснюються за допомогою теорії протікання [6], якщо систему – зволожений пісок – розглядати як суміш сухих (непровідних) і звожених (провідних) піщинок. Справді, при малій кількості води вона не може бути "подарована" кожній піщинці, інакше б це значно збільшило енергію поверхневого натягу (рис. 5), яка в системі звожених піщинок відіграє



Рис. 5 Розподілення малої кількості води по всій поверхні піщинок (справа) енергетично не вигідне, бо значно збільшує енергію поверхневого натягу



Рис. 6. Провідний кластер – система, яка виникає з мокрих піщинок в малозволоженому піску між двома плоскими електродами (схематичне представлення). Жирними точками показано вузли-розгалуження кластера провідності. $\langle l \rangle$ – середня довжина ланцюжка провідності між двома сусідніми вузлами кластера. Виділена світлим смуга показує, як у тонкому шарі піску зменшується можливість для самошунтування гілок кластера провідності

суттєву роль завдяки великій кривизні поверхні вологої плівки [7]. Мінімізація енергії поверхневого натягу є тією причиною, яка приводить при малих кількостях води до утворення бінарної системи "зволожені піщинки і сухі піщинки". Дотикаючись одна до одної, вологі піщинки утворюють собою кластери провідності – фрактальні об'ємно-лінійні структури. Зі збільшенням кількості води ці кластери ростуть і, сполучаючись, утворюють провідний кластер (рис. 6), по якому носії струму переносять заряд з електрода на електрод. При малій кількості доданої води у цьому провідному кластері існують лише поодинокі доріжки, канали провідності. Додавання води збільшує кількість мокрих піщинок, провідний кластер росте, кількість каналів провідності збільшується, і провідність системи більшає. Потім система виходить на етап певного насичення, коли додавання води вже не збільшує її провідність, а з величини вологості порядку 10% від об'єму провідність знову

починає збільшуватися, бо в дію вступає інший кластерний механізм провідності – по заповнених рідиною капілярах між піщинками.

Якщо провідність слабо вологого (до 1% від об'єму) піску забезпечується через кластер зі звожених піщинок, то оскільки гілки кластера провідності шунтують одна одну, в тонких шарах слабо вологого піску провідність має суттєво зменшуватися, бо сама геометрія системи відсікає більшість гілок кластера, що могли б забезпечувати провідність в обраному напрямі (див. рис.6). Справді, наші дослідження засвідчили (рис. 1, криві 3-5), що питома провідність тонкого (<2мм) шару піску є для тих же величин звоження значно меншою, ніж провідність грубших (від 2мм і більше) шарів, яка, своєю чергою, співпадає з величинами питомої провідності, одержаними в об'ємних вимірюваннях. Причому чим тонший шар піску, тим дужчий ефект, що також цілком логічно випливає з запропонованої моделі. Ми припускаємо, що товщина шару піску ≈ 2 мм.

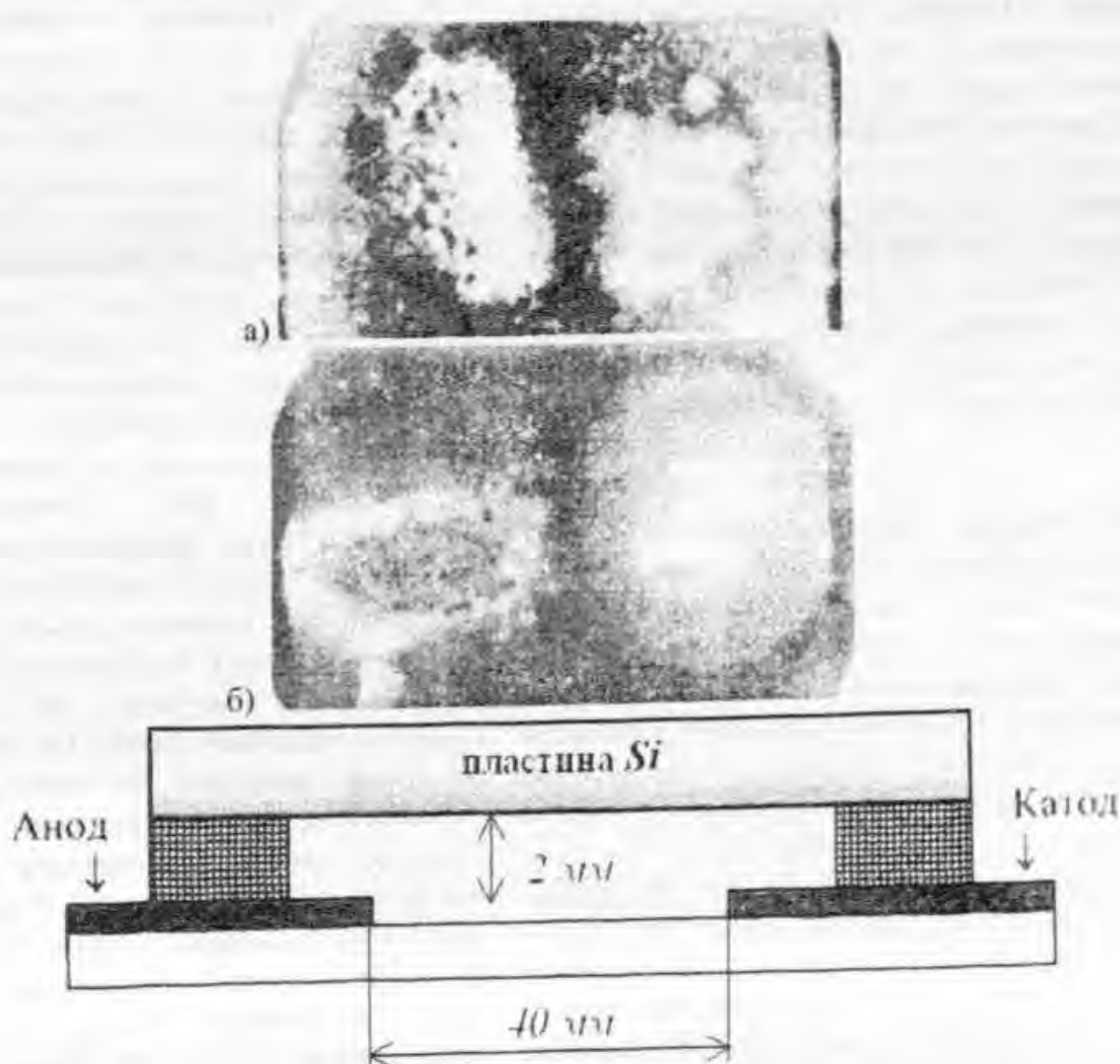


Рис. 7 Хемографічно візуалізовані за допомогою пластини Si процеси електролізу в тонкому (2мм) шарі вологого (10% від об'єму) піску. а) – 15 хв, б) – 60 хв контакту з піском. Внизу показано схему досліду: пластина кремнію очищеною від окислів хемографічно активною стороною контактувала з шаром піску

нижче якої спостерігається зменшення провідності, приблизно дорівнює середній довжині ланцюжка провідності між двома сусідніми вузлами кластера. Це також співмірно діаметру піщинок: 0,2 мм, тож, якщо справедливе попереднє припущення, між вузлами кластера знаходиться приблизно 10 піщинок.

Просторова неоднорідність зволоження, а значить, і електропровідності дисперсного середовища, яка впливає з описаних вище дослідів, неминуче повинна позначитися на характері корозійних явищ, що мають місце, наприклад, на поверхні підземних металоконструкцій. У зв'язку з цим ми спробували візуалізувати процес окислення поверхні металу за умов її контакту з вологим піском. Для цього ми використали метод хемографії [8-10], в якому фотоплівка використовується не як детектор випромінювання, а як детектор атомарного водню, що здатен взаємодіяти з бромистим сріблом з тим самим наслідком – виділенням металевого срібла й утворенням прихованого зображення. Поверхні багатьох металів і напівпровідників під час окислення продукують атомарний водень як проміжний продукт і можуть давати так званий хемографічний ефект – при контакті з фотоплівкою в щільовитій темряві створювати в ній своє зображення, причому зображення є тим інтенсивнішим, чим слабше окислена поверхня, що дозволяє візуалізовувати методом хемографії наслідки дуже широкого кола фізико-хімічних впливів на поверхні хемографічно активних тіл, зокрема середовища вологого піску. В якості хемографічно-активного матеріалу з цією метою ми вибрали кремній, очищена поверхня якого, окислюючись, дає сильний і однорідний хемографічний ефект. Це обумовлено тим, що кремній є мономатеріалом напівпровідникової чистоти, і його поверхня в електроліті, на відміну від сплавів, самовільно не розбивається на позитивно і негативно заряджені ділянки, тому всі нюанси хемографічної активності ділянок поверхні кремнію можна приписувати дії зовнішніх чинників.

Результати хемографічної візуалізації процесу окислення пластини кремнію, що контактувала з тонким шаром піску над плоскими електродами показано на рис. 7. На плоскі електроди, вкриті шаром піску, подавалась напруга 10 В. Товщина шару піску була 2 мм, об'ємна частка води в піску складала 10%, що відповідає переходу до капілярного кластеру провідності. На рис. 7а і 7б представлено хемограми поверхні Si через 15 і

через 60 хвилин її контакту з шаром піску над електродами. Добре видно, що процес окислення ділянок поверхні Si, що знаходились над катодом і анодом, йде неоднаково від самого початку, і що межа між зонами протікання катодної й анодної реакцій лежить рівно посередині між електродами. Оскільки електролітичні реакції суттєво впливають на перебіг процесів окислення, можна констатувати, що отримані нами хемографічні зображення відтворюють неоднорідності окислення кремнію, які виникають завдяки проходженню струму через дисперсне середовище. Ці неоднорідності виникають, вочевидь, внаслідок просторового перерозподілу аніонів і катіонів, що в одних місцях блокують, а в інших – прискорюють окислення кремнію, і на хемограмах видно, що цей перерозподіл має центрально-симетричний характер, але відбувається по-різному біля анода і біля катода та змінюється з часом. Вичерпне тлумачення відбитих тут хемограмами ефектів безумовно потребує додаткових дослідів, наразі важливою є вже сама можливість їх бачити.

Окремим питанням є заповнення виниклої щілини ґрунтом, яке відбувається під дією зовнішнього тиску, і її провідність. Очевидно, що заповнення вузької щілини піском сильно залежить від середнього розміру піщинок а також від глибини щілини. Поставлені нами експерименти, в яких визначалася сила струму в заповнюючому неглибоку (~5 мм) щілину ґрунті залежно від таких факторів як ширина щілини, вологість ґрунту, зовнішній тиск показують, що провідність в тонких щілинах є на 3-4 порядки меншою, ніж у щілинах завтовшки 2 і більше мм. Встановлений факт різкого зменшення провідності тонких шарів вологого піску свідчить про те, що корозія металевих поверхонь, що контактують з тоншими за 2 мм шарами ґрунту (щілинна корозія), відбувається зовсім інакше, ніж корозія поверхонь, що контактують з товстими пластами ґрунту. Це може мати велике практичне значення, бо пошкодження ізоляції підземної металевих конструкцій, яке дає початок її корозії, звичайно починається з розтріскування. Це розтріскування ізоляції є наслідком дії на конструкцію вібрацій, тисків (так питомі тиски на ґрунт становлять в залежності від діаметру труб газопроводів 10 – 13 Н/см², а для нафтопроводів 34 – 49 Н/см² [11]), коливань температури, напружень засипки та різноманітних деформацій внаслідок переміщення ґрунтів, взаємодії покриття з поверхнево-активними складовими ґрунту і т.д.

УДК 532

М.М. Маломуж, аспірант Київського
університету

Кластерна структура та її прояв в особливостях фазової діаграми двовимірного кулонівського газу

Досліджується кластерна структура двовимірного кулонівського газу, який складається з заряджених твердих дисків. Враховується, що різноманітні заряджені диски утворюють зв'язані групи частинок різного розміру: дипольні пари, квадрупольні кластери, кільцеві гексагональні кластери і такі інші. Показано, що найбільш стійкими є дипольні пари та квадрупольні кластери. Останні утворюються з дипольних пар і розпадаються на пари внаслідок зіткнень між кластерами та під дією сил їх електростатичної взаємодії. Рівноважні значення концентрацій дипольних пар та квадрупольних кластерів розраховуються за допомогою методів хімічної кінетики. Взаємодія між кластерами враховується так само, як і при побудові Ван-дер-Ваальсівського рівняння стану дипольно-квадрупольної суміші. Показано, що критична точка системи типу пара-рідина та «газова» гілка бінодали, визначені методами молекулярної динаміки, є розташованими у квадрупольній фазі системи, розбавленій невеликою кількістю ($c < 0.1$) дипольних пар.

M.M. Malomuzh, aspirant of Kyiv University

Cluster structure and its manifestation in peculiarities of the phase diagram for two-dimensional Coulombic gas

The cluster structure for two-dimensional Coulombic gas of charged hard discs is investigated. It is taken into account that discs with opposite charges form connected groups of different size: dipole pairs, quadrupole clusters, ring hexagonal clusters and so on. It is shown, that dipole pairs and quadrupole clusters are the most stable. The last ones are formed from dipole pairs and they disintegrate on dipole pairs because of collisions and the electrostatic interaction between clusters. The equilibrium concentrations of dipole pairs and quadrupole clusters are determined with the help of chemical kinetics methods. The interaction between clusters is taken into account in the same way as for the van der Waals equation of state for the dipole-quadrupole mixture. It is shown that found in computer simulations the critical point of the system, corresponding to the gas-liquid phase transition, and the left branch of its binodal are disposed in the quadrupole phase of the system, diluted by dipole pairs, which concentration does not exceed 10% ($c < 0.1$).

Вступ

Фазова діаграма двовимірного кулонівського газу була об'єктом теоретичних досліджень у багатьох роботах [1-7]. Було встановлено, що її основними елементами є лінії співіснування пара-рідина та переходу діелектрик-провідник, а також характерні точки: критична точка, точка Костерліца-Таулеса або температури переходу діелектрик-провідник при гранично низьких густинах, та точка перетину ліній співіснування та переходу діелектрик-провідник. Проте, на сьогодні можна говорити тільки про якісне узгодження теоретичних передбачень та результатів комп'ютерних експериментів [8,9].

Оскільки двовимірні кулонівські системи у природі відсутні, їх комп'ютерне моделювання

набуває особливого значення. З цього боку особливо важливі результати були отримані у роботі [8]. В ній досліджено фазову діаграму системи твердих дисків діаметром σ , половина з яких має позитивний заряд $+q$, а друга половина – негативний $-q$. Диски рухаються в безструктурному середовищі з діелектричною проникністю ε . У згоді з цим потенціал міждисккової взаємодії приймає вигляд:

$$U_{ij}(r) = \begin{cases} -\frac{q_i q_j}{\varepsilon} \ln\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right), & r_{ij} > \sigma \\ \infty, & r_{ij} < \sigma \end{cases} \quad (1)$$

Побудова фазової діаграми системи стала основним результатом ретельного дослідження в

Представлено
д.ф.-м.н., проф. Адаменко І.І.

[8]. Зокрема, було встановлено, що критична точка має наступні координати:

$$T_*^{(c)} = 0.056, \quad n_*^{(c)} = 0.21. \quad (2)$$

де безрозмірні густина n , та температури T системи задаються співвідношеннями:

$$n = n\sigma^2, \quad T = \frac{k_B T \epsilon}{q^2}, \quad (3)$$

де n - густина числа частинок, k_B - константа Больцмана. Значення критичної температури, отриманої в [9], є помітно більшим ($T_*^{(c)} = 0.085$, а густина дещо меншою: $n_*^{(c)} = 0.16$).

Точка перетину ліній співіснування та переходу діелектрик-провідник є близькою до критичної точки. Температура Костерліца-Таулеса майже співпадає з її теоретичним значенням T_{KT} , обчисленим у роботі [1].

Надзвичайно велике значення для тлумачення отриманих результатів має миттєва картинка у розташуванні заряджених дисків (див Рис.1), яка наведена в [8].

Характерною ознакою миттєвої картини у розподілі різноіменно заряджених дисків є їх кластеризація. Існування дипольних пар здається тривіальним, оскільки енергія взаємодії двох протилежних зарядів стає мінімальною саме при їх безпосередньому контакті. А от домінування чотирьохчасткових кластерів є дещо несподіваним. В системі присутня також невеличка кількість кластерів, які складаються з шести дисків та більше.

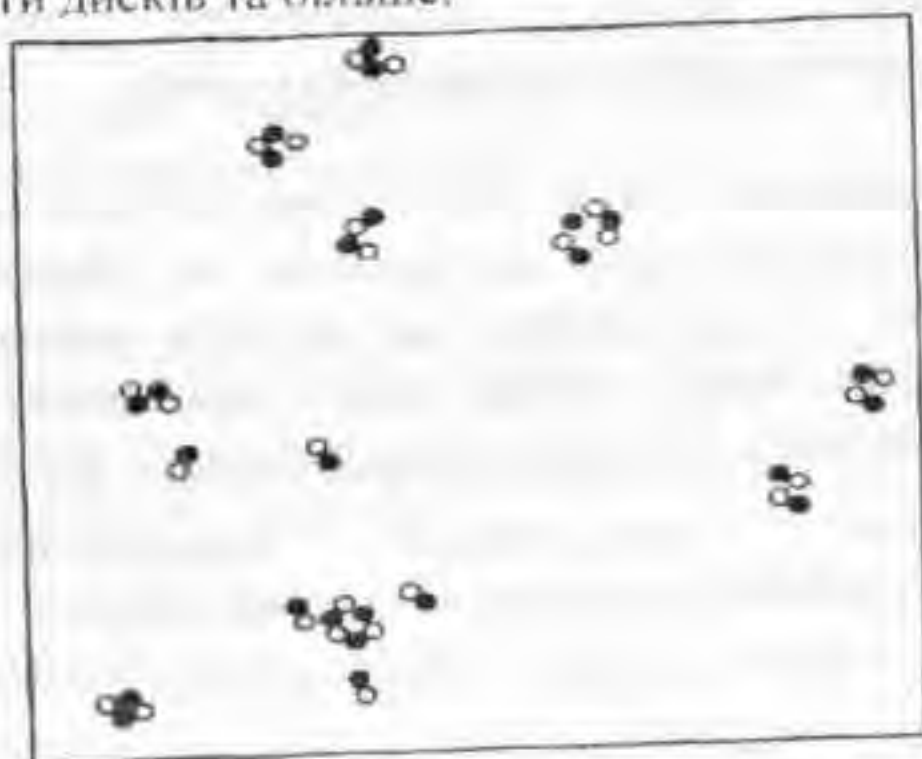


Рис.1. Просторовий розподіл різноіменно заряджених дисків в деякий момент часу у комп'ютерному експерименті [8]. Кружечки різного забарвлення відповідають іонам з протилежними зарядами.

Положення дисків у кластерах утворюють конфігурації, які є близькими до оптимальних (тобто, яким відповідає мінімальна енергія).

Таким чином, основною проблемою при статистичному описі властивостей системи є врахування кластерного характеру її структури.

Саме такий підхід до опису термодинамічних властивостей двовимірного кулонівського газу запропоновано в [10-12]. Вихідною посилкою в цих роботах є припущення про повну димеризацію системи в області існування її газового стану. Фазова діаграма системи будується на основі рівняння Ван-дер-Ваальса, а перехід діелектрик-провідник досліджується в рамках строгої мікроскопічної теорії діелектричної проникненості. В [12] показано, що врахування квадрупользації в системі є необхідним кроком для побудови коректної теорії.

В представленій роботі досліджується характер квадрупольної кластеризації у двовимірному кулонівському газі, рівняння його стану та параметри бінодали і спінодали системи.

1. Дипольні та квадрупольні кластери

Завдяки закону взаємодії (1), існування ізольованих заряджених дисків є неможливим. В системі існує чітко виражена тенденція до кластеризації. Очевидно, що найпростішим кластером є парний. Його дипольний момент, очевидно, дорівнює:

$$\vec{d} = q\sigma \cdot \vec{e},$$

де $\vec{e}$ - одиничний орт, який задає просторову орієнтацію дипольної пари. Тепловий рух такого кластеру складатиметься з поступального руху центра мас та обертання навколо вісі, яка проходить через нього. Характерні значення поступальної V_{tr} та обертальної ω_r швидкостей мають наступний порядок величини:

$$V_{tr} \sim \sqrt{\frac{k_B T}{m}}, \quad \omega_r \sim \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{k_B T}{m}},$$

де m - маса одного диска (враховується, що момент інерції дипольної пари дорівнює

$$I = 2m(\sigma/2)^2 = \frac{1}{2} m\sigma^2). \text{ Середній час}$$

вільного пробігу дипольної пари $\tau_f \sim \frac{1}{\omega_r n}$ є

набагато більшим від часу $\tau_r \sim \frac{1}{\omega_r}$ її обертання,

оскільки в області станів системи, в якій

відбуваються переходи газ-рідина та діелектрик-провідник, безрозмірна густина n_* є набагато меншою від одиниці. Внаслідок цього, дипольна пара може розглядатися як диск з радіусом

$$r_d = \sigma, \quad (4)$$

який має точковий дипольний момент тієї ж величини. Оскільки віддалені один від одного подібні диски взаємодіють так само, як і відповідні дипольні пари, можна стверджувати, що рівняння станів систем дисків і дипольних пар будуть еквівалентними.

Очевидно, що середнє значення дипольного моменту пари $\langle \vec{d} \rangle$ чи еквівалентного диску дорівнює нулю, але

$$\langle d_\alpha d_\beta \rangle_0 = \frac{1}{2} q^2 \sigma^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (5)$$

Важливо зазначити, що параметри дипольних пар залежать від температури та густини системи. Так, позитивно і негативно заряджені диски ізольованої дипольної пари будуть знаходитись у безпосередньому контакті,

доки сила кулонівського тяжіння $\vec{F}_c = -\frac{q^2}{\sigma} \vec{e}_r$

буде більшою за відцентрову силу $\vec{F} = \frac{1}{2} m \sigma \omega_r^2 \vec{e}_r \sim 2 \frac{k_B T}{\sigma} \vec{e}_r$. Ця умова

порушується при температурі:

$$T_c = \frac{q^2}{k_B},$$

яка співпадає з характерною температурою T_c кулонівського газу при $\varepsilon = 1$. Контакт між складовими дисками може порушуватись також внаслідок зіткнень дипольних пар між собою. Але і в цьому випадку, як неважко впевнитись, відокремлення дисків відбувається тільки при температурах $T > T_c$.

Суттєва зміна ситуації відбувається у достатньо густій системі. Тут відстань між позитивно і негативно зарядженими дисками дипольної пари починає змінюватись внаслідок взаємодії з іншими дипольними парами. Енергія такої взаємодії між двома парами має порядок величини:

$$W_{dl} = \frac{d^2}{r_a^2} = T_* \left(\frac{\sigma}{r_a} \right)^2 = T_* n_* < T_*$$

де r_a – середня відстань між найближчими сусідами. Але внаслідок дальнодіючого характеру диполь-дипольної взаємодії, треба враховувати взаємодію з усіма дипольними

парами, які утворюють оточення виділеної пари. В [12] показано, що

$$\sum_i W_{dli} = T_* \frac{n_*}{l},$$

де $l = T/T_*$. Таким чином, при заданій густині і достатньо низьких температурах ($l \ll 1$) енергія взаємодії дипольної пари з її оточенням може перевищувати енергію взаємодії різноіменних зарядів, з яких вона складається. Звідси випливає, що відстань r між центрами дисків, які утворюють дипольну пару, стає певною функцією густини: $r = r(n_*)$. Дипольні пари стають нестійкими і при певних умовах в системі стає можливим обмін зарядами між різними парами, що можна інтерпретувати як перехід діелектрик-провідник. З другого боку, залежність дипольних моментів пар від густини суттєво впливає на характер міжчастинкової взаємодії в системі і особливості фазового переходу типу газ-рідина.

Другою обставиною, що суттєво змінює властивості достатньо густої системи при $T < T_c$, є те, що взаємодія дипольних пар ініціює їх об'єднання у квадрупольні кластери та кластери більш високого порядку. Найстікішим серед них є найменший за розміром та числом частинок квадрупольний кластер типу *a* на Рис.2.

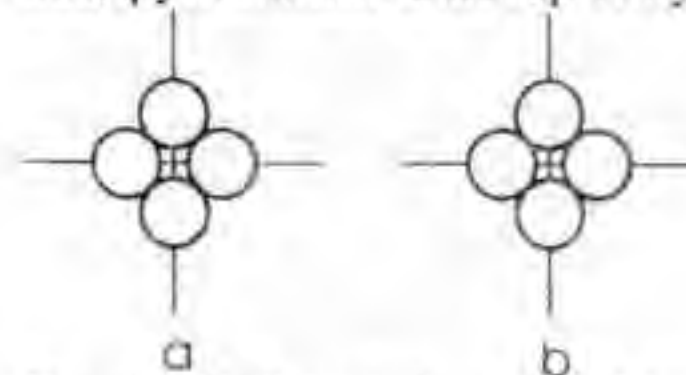


Рис.2. Найпростіші конфігурації квадрупольних кластерів. Різним забарвленням дисків відповідають заряди протилежного знаку.

Порівняємо між собою енергію дипольної пари та найпростіших квадруполів, які зображені на Рис.2. З (1) витікає, що енергія взаємодії дипольної пари, диски якої знаходяться у контакті один з одним, дорівнює нулю: $E_2 = 0$. Найбільш симетричним квадрупольним конфігураціям відповідають значення енергії:

$$E_4^{(a)} = -q^2 \ln 2, \quad E_4^{(b)} = q^2 \ln 2. \quad (6)$$

Бачимо, що утворення квадрупольних конфігурацій типу *a* є, навіть, енергетично більш вигідним, чим дипольних пар.

Зазначимо, що найбільш оптимальною конфігурацією гексагональних кластерів є кільцевий ланцюжок, в якому диски різного заряду перемежуються. Можна впевнитись, що енергія цієї конфігурації близька до

$$E_c \approx -0.12q^2,$$

що повинно приводити до відносно невеликої кількості таких кластерів і ланцюжкових кластерів більш високого порядку.

У власній системі координат, яка співпадає із зображеною на Рис.2, компоненти квадрупольного моменту конфігурації a дорівнюють:

$$Q_{\alpha\beta}^{(a)} = (-1)^{\alpha-1} Q \delta_{\alpha\beta}, \quad Q = q\sigma^2, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (7)$$

Тут ми припускаємо, що позитивні заряди знаходяться на вісі абсцис, а негативні – на вісі ординат. При довільних поворотах кластеру його компоненти приймають значення:

$$Q_{\alpha\beta}^{(a)} = Q(e_{\alpha}^{(1)}e_{\beta}^{(1)} - e_{\alpha}^{(2)}e_{\beta}^{(2)}), \quad (8)$$

де $\vec{e}^{(1)}$ і $\vec{e}^{(2)}$ – власні вектори тензора квадрупольного моменту. Його шпур, який є інваріантним відносно довільних поворотів системи координат, у згоді з (7), дорівнює нулю:

$$\sum_{\alpha=1,2} Q_{\alpha\alpha}^{(a)} = 0.$$

Неважко впевнитись, що рівноважний корелятор $\langle Q_{\alpha\beta}^{(a)} Q_{\gamma\delta}^{(a)} \rangle_0$, який використовується при розрахунках енергії диполь-квадрупольної та квадруполь-квадрупольної взаємодії, має структуру:

$$\begin{aligned} \langle Q_{\alpha\beta}^{(a)} Q_{\gamma\delta}^{(a)} \rangle_0 &= \\ &= \frac{1}{2} Q^2 (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}). \end{aligned} \quad (9)$$

Як і дипольна пара, квадрупольний кластер рухається поступально і обертається. Характерні значення часу його вільного руху та періоду обертання за порядком величини є таким ж, як і для дипольної пари. Тому для спрощення розрахунків квадрупольний кластер бажано замінити диском з радіусом

$$r_Q = \frac{\sigma}{2} (1 + \sqrt{2}), \quad (10)$$

який має точковий квадрупольний момент тієї ж величини, що і кластер a .

До температури $T_* = q^2$, як це витікає з (6), ізолювані квадрупольні кластери залишаються стійкими. При більш високих температурах вони розвалюються на дипольні пари.

В середовищі квадрупольні кластери руйнуються як внаслідок зіткнень, так і внаслідок взаємодії з сусідніми дипольними парами та квадруполями. Останній механізм, як і у випадку дипольних пар, є основним механізмом руйнації квадрупольних кластерів при температурах, помітно менших від T_* .

2. Потенціали взаємодії дипольних та квадрупольних кластерів

Енергію взаємодії $U(r)$ кластерів, які утворюються у двовимірному кулонівському газі, з задовільною точністю можна апроксимувати сумою відштовхувального $U_r(r)$ та притягального $U_a(r)$ внесків:

$$U(r) = U_r(r) + U_a(r) \quad (11)$$

Перший з цих внесків, за звичаєм, моделюється потенціалом твердих сфер:

$$U_r(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq r_0 \\ 0, & r > r_0 \end{cases} \quad (12)$$

де r_0 – характерна відстань між центрами двох кластерів, які знаходяться у контакті. Вона залежить від типу кластерів ($r_0 = r_d, r_Q, \dots$).

Притягальна частина потенціалу утворюється взаємодією їх мультипольних моментів і приймається рівною:

$$U_a(r) = \langle W_{\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_1) \rangle, \quad (13)$$

де $W_{\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_1)$ – енергія мультипольної взаємодії кластерів, а символ $\langle \dots \rangle$ позначає усереднення по їх можливим орієнтаціям у просторі. Розглянемо конкретний вигляд внесків у притягальний потенціал, які обумовлені диполь-дипольною, диполь-квадрупольною та квадруполь-квадрупольною взаємодіями.

У двовимірному випадку енергії електростатичної взаємодії дипольних та квадрупольних кластерів задаються співвідношеннями:

$$W_{dd}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega) = -d_{\alpha}^{(1)} d_{\beta}^{(2)} \frac{\partial^2 \ln r}{\partial r_{\alpha} \partial r_{\beta}}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} W_{dQ}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega) &= \\ &= -\frac{1}{2} (d_{\gamma}^{(1)} Q_{\alpha\beta}^{(2)} - d_{\gamma}^{(2)} Q_{\alpha\beta}^{(1)}) \frac{\partial^3 \ln r}{\partial r_{\alpha} \partial r_{\beta} \partial r_{\gamma}} \end{aligned} \quad (15)$$

$$W_{QQ}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega) = \frac{1}{4} Q_{\alpha\beta}^{(1)} Q_{\gamma\delta}^{(2)} \frac{\partial^4 \ln r}{\partial r_{\alpha} \partial r_{\beta} \partial r_{\gamma} \partial r_{\delta}}, \quad (16)$$

де $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, а Ω – сукупність кутових координат, які задають їх орієнтації.

Для подальшого важливо, що найважливіші елементи фазової діаграми двовимірного кулонівського газу відповідають малим густинам. Внаслідок цього парну кореляційну функцію $g(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega)$, де $\vec{r}_1$ та $\vec{r}_2$ – радіуси-вектори

відповідних кластерів, можна апроксимувати газоподібним виразом:

$$g(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega) \approx C \exp(-\beta W_{cl}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega)) \approx \frac{1}{(4\pi)^3} (1 - \beta W_{cl}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega))$$

В нульовому за енергією взаємодії наближенні всі середні $\langle W_{ab} \rangle_0$, $a, b = d, Q, \dots$, дорівнюють нулю. В першому за взаємодією наближенні потенціали диполь-дипольної, диполь-квадрупольної та квадруполь-квадрупольної взаємодії, таким чином, дорівнюють:

$$U_a^{(dd)}(r) = -\frac{1}{4} \beta d^4 \left(\frac{\partial^2 \ln r}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \right)^2$$

$$U_a^{(dq)}(r) = -\frac{\beta}{4} d^2 Q^2 \left(\frac{\partial^3 \ln r}{\partial r_\alpha \partial r_\beta \partial r_\gamma} \right)^2,$$

$$U_a^{(qq)}(r) = -\frac{1}{16} \beta Q^4 \left(\frac{\partial^4 \ln r}{\partial r_\alpha \partial r_\beta \partial r_\gamma \partial r_\delta} \right)^2$$

Покажемо, що

$$\left(\frac{\partial^n \ln r}{\partial r_{i_1} \partial r_{i_2} \dots \partial r_{i_n}} \right)^2 = \frac{2^{n-1} ((n-1)!)^2}{r^{2n}}. \quad (17)$$

Дійсно, враховуючи, що

$$\delta_{i_n} \frac{\partial^n \ln r}{\partial r_{i_1} \partial r_{i_2} \dots \partial r_{i_n}} = \frac{\partial^{n-2}}{\partial r_{i_1} \dots \partial r_{i_{n-1}}} \Delta \ln r = 0$$

отримуємо рекурентну формулу:

$$\left(\frac{\partial^n \ln r}{\partial r_{i_1} \partial r_{i_2} \dots \partial r_{i_n}} \right)^2 = \frac{\partial}{\partial r_{i_n}} \left(\frac{\partial^{n-1} \ln r}{\partial r_{i_1} \partial r_{i_2} \dots \partial r_{i_{n-1}}} \frac{\partial}{\partial r_{i_n}} \frac{\partial^{n-1} \ln r}{\partial r_{i_1} \partial r_{i_2} \dots \partial r_{i_{n-1}}} \right) = \frac{1}{2} \Delta \left(\frac{\partial^{n-1} \ln r}{\partial r_{i_1} \partial r_{i_2} \dots \partial r_{i_{n-1}}} \right)^2$$

Оскільки $\left(\frac{\partial \ln r}{\partial r_\alpha} \right)^2 = \frac{1}{r^2}$, то безпосереднє

застосування цієї рекурентної формули і приводить до рівняння (17).

У такий спосіб ми остаточно отримуємо:

$$U_a^{(dd)}(r) = -\frac{1}{2} \beta q^4 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^4 \quad (18)$$

$$U_a^{(dq)}(r) = -4 \beta q^4 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \quad (19)$$

$$U_a^{(qq)}(r) = -18 \beta q^4 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^8 \quad (20)$$

Неважко впевнитись, що перехресні середні типа $\langle W_{dd}(r) W_{dq} \rangle_0$ дорівнюють нулю. Дійсно, в таке середнє один з дипольних моментів входить непарним чином і тому після усереднення по кутам прямує до нуля. По тій же причині дорівнює нулеві і комбінація $\langle W_{dd}(r) W_{dq} \rangle_0$.

Таким чином, асимптотичний розклад потенціалу взаємодії двох довільних кластерів приймає наступний вигляд:

$$U_a(r) = \langle W_{cl}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = -\beta (\langle W_{dd}^2 \rangle_0 + \langle W_{dq}^2 \rangle_0 + \langle W_{qq}^2 \rangle_0 + \dots) \quad (21)$$

тобто, далекодіючі сили завжди мають притягальний характер. У згоді з (18) – (20) формула (21) переписується у вигляді:

$$U_a(r) = -\frac{1}{2} \beta q^4 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^4 + 8 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 + 36 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^8 + \dots \right] \quad (22)$$

Зазначимо, що структура асимптотичного розкладу притягальної енергії кластерів є однаковою як для фіксованих значень мультипольних моментів, так і тоді, коли вони змінюються з часом.

4. Рівняння Ван-дер-Ваальса дипольно-квадрупольної суміші

Для опису рівняння стану дипольно-квадрупольної суміші газів скористаємось рівнянням Ван-дер-Ваальса:

$$p = \frac{k_B T}{v - v_0} - \frac{a}{v^2}, \quad (23)$$

в якому v – площа, яка приходить на одну частинку; $v = \frac{1}{n}$. Ефективна площа v_0 , яка займається частинкою, визначається за формулою [13]:

$$v_0 = v_d c + v_q (1 - c)$$

де $v_d = 2\pi d^2$ і $v_q = 2\pi Q^2$ – збільшені вдвоє площі дисків, які відповідають дипольним парам та квадрупольним кластерам. У згоді з (4) і (10),

$$v_0(d) = 2\pi \sigma^2, \quad v_0(Q) = (3/2 + \sqrt{2})\pi \sigma^2$$

Концентрація c дипольних пар стандартним чином пов'язана з густинами кластерів:

$$c = \frac{n_d}{n_d + n_q}$$

Оскільки густини n_d і n_Q дипольних пар та квадрупольних кластерів пов'язані з вихідною густиною системи n_0 співвідношенням:

$$n_d + 2n_Q = n_0,$$

то

$$c = 2 \frac{n_d}{n_0 + n_d} \quad (24)$$

Коефіцієнт a , як і v_0 , є суперпозицією парціальних внесків:

$$a = a_{dd}c^2 + a_{dQ}(1-c)^2 + 2a_{dQ}c(1-c)$$

кожний з яких визначається за формулою:

$$a_{ij} = \pi \int_{(r+r_i)}^{\infty} U_{ij}(r) |rdr$$

де, згідно з (4) і (10), $r_d + r_d = 2\sigma$,

$$r_d + r_Q = \frac{\sigma}{2}(3 + \sqrt{2}), \quad r_Q + r_Q = \sigma(1 + \sqrt{2}).$$

Підставляючи в неї потенціали диполь-дипольної (18), диполь-квадрупольної (19) та квадруполь-квадрупольної (20) взаємодій, знаходимо:

$$\begin{aligned} a_{dd} &= \frac{\pi q^4 \sigma^2}{16 T_*} \frac{1}{t} \\ a_{dQ} &= \frac{16\pi q^4 \sigma^2}{(3 + \sqrt{2})^4 T_*} \frac{1}{t} \\ a_{QQ} &= \frac{3\pi q^4 \sigma^2}{(1 + \sqrt{2})^6 T_*} \frac{1}{t} \end{aligned} \quad (25)$$

Таким чином, коефіцієнт a дорівнює:

$$a = \pi \frac{q^4 \sigma^2}{T_*} \frac{1}{t} \left[\frac{1}{16} c^2 + \frac{3}{(1 + \sqrt{2})^6} (1-c)^2 + \frac{32}{(3 + \sqrt{2})^4} c(1-c) \right] \quad (26)$$

В подальшому має сенс перейти до безрозмірних змінних: $\tilde{v} = v/\sigma^2$, $\tilde{v}_0 = v_0/\sigma^2$, $\tilde{p} = p/p_*$, де $p_* = T_*/\sigma^2$, $\tilde{a} = a/\sigma^2 T_*$. В них рівняння Ван-дер-Ваальсу (23) переписується у вигляді:

$$\tilde{p} = \frac{t}{\tilde{v} - \tilde{v}_0} - \frac{\tilde{a}}{\tilde{v}^2} \quad (27)$$

де

$$\tilde{v}_0 = \pi \left[c + \frac{3 + 2\sqrt{2}}{4} (1-c) \right], \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= \frac{\pi}{t} \left[\frac{1}{16} c^2 + \frac{3}{(1 + \sqrt{2})^6} (1-c)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{32}{(3 + \sqrt{2})^4} c(1-c) \right] \equiv \frac{b}{t} \end{aligned} \quad (29)$$

В граничних випадках, коли система складається тільки з дипольних пар чи квадрупольних кластерів, положення критичної точки типу парадина знаходиться з рівнянь:

$$\left. \frac{\partial p}{\partial v} \right|_c = 0, \quad \left. \frac{\partial^2 p}{\partial v^2} \right|_c = 0$$

Критичні значення питомого об'єму, температури та тиску дорівнюють:

$$\tilde{v}_c = 3\tilde{v}_0, \quad t_c = \frac{8}{27} \frac{\tilde{a}}{\tilde{v}_0}, \quad \tilde{p}_c = \frac{1}{27} \frac{\tilde{a}}{\tilde{v}_0^2}. \quad (30)$$

В дійсності, вираз для критичної температури є рівнянням, оскільки у згоді з (29) коефіцієнт $\tilde{a}$ є функцією температури. Приймаючи до уваги що обставину ми знаходимо:

$$t_c = \frac{2}{3} \left(\frac{2b}{3\tilde{v}_0} \right)^{1/2} \quad (31)$$

Підставляючи в (30) і (31) значення параметрів (28) та (29), отримуємо:

$$\tilde{v}_c = \begin{cases} 6\pi, & d \\ 3(3/2 + \sqrt{2})\pi, & Q \end{cases} \quad (32)$$

$$t_c = \begin{cases} \frac{1}{6\sqrt{3}} \approx 0.1, & d \\ \frac{2\sqrt{2}}{3(1 + \sqrt{2})^3} \frac{1}{(1.5 + \sqrt{2})^{1/2}} \approx 0.039, & Q \end{cases} \quad (33)$$

Як бачимо, значення критичної температури $t_c^{(1)} = 0.056$ і $t_c^{(2)} = 0.085$, наведені в [8] і [9] відповідно, лежить між значеннями, отриманими нами в наближенні дипольних пар та квадрупольних кластерів. Наведенням вище значенням питомого об'єму відповідають наступні значення безрозмірної густини системи:

$$n_*^{(c)} = \begin{cases} 1/3\pi \approx 0.106, & d \\ 4/3(3/2 + \sqrt{2})\pi \approx 0.146, & Q \end{cases} \quad (34)$$

Тут враховано, що безрозмірна густина ефективних частинок дорівнює $n_*^{(eff)} = 1/\tilde{v}_c$, а для знаходження повної густини іонів в системі потрібно $n_*^{(eff)}$ помножити на число іонів, які входять до кластера, тобто,

$$n_*^{(c)} = \begin{cases} 2/\tilde{v}_c, & d \\ 4/\tilde{v}_c, & Q \end{cases}$$

Порівнюючи (34) зі значеннями $n_*^{(1)} = 0.21$ і $n_*^{(2)} = 0.16$, отриманими в комп'ютерних

експериментах [8] і [9], ми бачимо, що у наближенні квадрупольних кластерів узгодженість теоретичних і комп'ютерних значень критичної густини системи значно покращується.

Таким чином, для подальшого узгодження теоретичних і «експериментальних» оцінок дуже важливо визначити ступінь однорідності складу системи.

5. Залежність концентрації дипольних пар та квадрупольних кластерів від температури та густини

Кінетику кластеризації $d + d \leftrightarrow Q$ в розрідженій суміші дипольних пар та квадрупольних кластерів можна описати рівнянням:

$$\frac{1-c}{c^2} = P \exp\left(\frac{2\chi_d - \chi_Q}{T}\right), \quad (35)$$

запозиченим з теорії хімічних реакцій [13,14] (див. також [15]). Тут $c = n_d / n$ - концентрація

диполів, P - тиск, $K(T) = \exp\left(-\frac{2\chi_d - \chi_Q}{T}\right)$ - константа хімічної рівноваги, функції χ_i , $i = d, Q$, у двовимірній системі апроксимуються виразами:

$$\chi_d = T \ln \frac{\Lambda_d^2}{\xi_d T}, \quad \chi_Q = T \ln \frac{\Lambda_Q^2}{\xi_Q T}, \quad (36)$$

де Λ_d і Λ_Q - теплові довжини хвиль Де-Бройля для дипольних пар та квадрупольних кластерів відповідно, ξ_d і ξ_Q - їх внутрішні статистичні суми. З урахуванням (36), рівняння (35) для концентрації дипольних пар переписується у вигляді:

$$\frac{1-c}{c^2} = n \sigma^2 \frac{\Lambda_d^3}{\Lambda_Q^2 \sigma^2} \frac{\xi_Q}{\xi_d^2} \quad (37)$$

Зв'язок густини частинок n з повною густиною дисків в системі n_0 встановлюється з рівняння їх балансу:

$$2n_d + 4n_Q = n_0.$$

Переходячи в ньому до концентрацій частинок: $n_d = cn$ і $n_Q = (1-c)n$, отримуємо:

$$n = \frac{n_0}{2(2-c)} \quad (38)$$

Оскільки маса квадрупольного кластера вдвічі перевищує масу дипольної пари, то $\Lambda_d^2 / \Lambda_Q^2 = 2$. Приймаючи, що класичний характер руху частинок спостерігається при $T > T_0$, де температура T_0 визначається рівнянням: $\Lambda_d^2(T_0) / \sigma^2 = 0.1$, з (37) та (38) отримуємо рівняння:

$$\frac{(1-c)(2-c)}{c^2} = 0.1 n_* \frac{T_0}{T} \frac{\xi_Q}{\xi_d^2}, \quad (39)$$

де $n_* = n_0 \sigma^2$ - безрозмірна густина.

При $T \ll T_*$ внутрішні степені свободи дипольних пар та квадрупольних кластерів можна вважати незбудженими, тому значення ξ_i , $i = d, Q$, будуть визначатись енергією $E_i^{(0)}$ їх основного стану: $\xi_i = \exp(-E_i^{(0)} / T)$. Оскільки,

$$E_d^{(0)} = 0, \quad E_Q^{(0)} = -q^2 \ln 2 \equiv -T_* \ln 2$$

то

$$\xi_d = 1, \quad \xi_Q = \exp\left(\ln 2 \cdot \frac{T_*}{T}\right) = 2^{T_*/T}. \quad (40)$$

Таким чином, з (39) і (40) випливає, що

$$\frac{(1-c)(2-c)}{c^2} = 0.1 \cdot n_* \frac{T_0}{T} 2^{T_*/T} \quad (41)$$

В граничному випадку, коли $2^{T_*/T} n_* \rightarrow 0$, концентрація дипольних пар змінюється за законом:

$$c = 1 - 0.1 \cdot 2^{T_*/T} n_* + 0.03 \left(2^{T_*/T} n_*\right)^2 + \dots$$

що свідчить про їх домінування. В протилежному граничному випадку, коли $2^{T_*/T} n_* \gg 1$, концентрація прямує до нуля:

$$c \approx 3.16 \cdot 2^{-1/2(1+T_*/T)} n_*^{-1/2} \rightarrow 0,$$

тобто система стає майже повністю утвореною з квадрупольних кластерів.

Скористаємось формулою (41) для оцінки густинної залежності концентрації c дипольних пар при температурі Костерліца-Таулеса $t_{KT} = 0.25$. При $T_0 / T_* = 0.1$ вона приймає вигляд:

$$\frac{(1-c)(2-c)}{c^2} = 1.01 \cdot n_*$$

і в області густин $n_* \ll 1$ приводить до розв'язку:

$$c \approx 1 - n_* + 3n_*^2 + \dots$$

Тобто, стан і властивості системи повністю визначається дипольними парами.

Визначимо положення сепаратиси, яка поділяє площину (n, t) на області, в яких $c > c_0$ і $c < c_0$. Очевидно, що така сепаратиса задовольняє рівнянню: $c(n, t) = c_0$, де $t = T/T_*$, причому концентрація дипольних пар зростає при переході з лівого боку сепаратиси на її правий бік. Сімейство сепаратис при різних значеннях c_0 представлено на Рис.3.

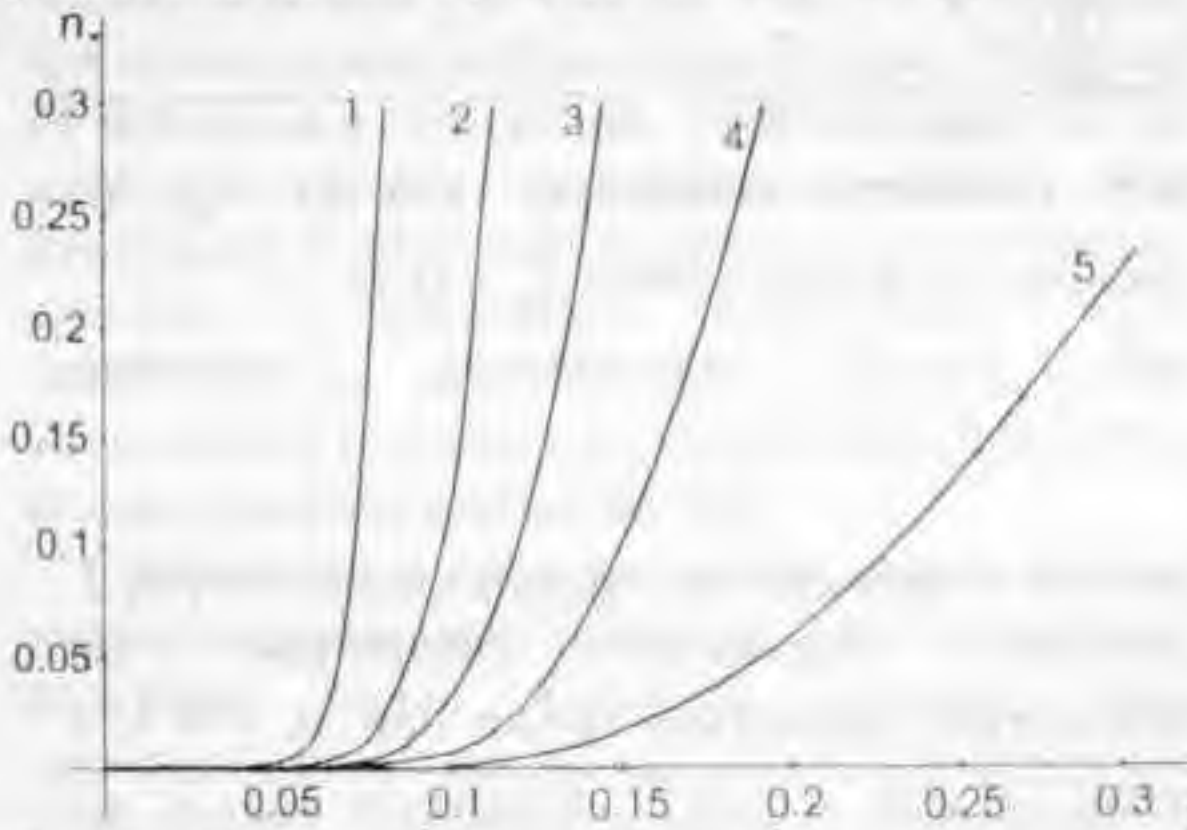


Рис.3. Сімейство сепаратис $c(n, t) = c_0$, які відповідають формулі (41) і $T_0 = 0.1T_*$. Лінії 1,...,5 відповідають значенням $c_0 = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$.

На Рис.4 ілюструється залежність положення сепаратиси $c(n, t) = 0.5$ від значення T_0 . Неважко бачити, що в цьому випадку значення густини на сепаратисі змінюються за законом:

$$n_s(t) \approx \begin{cases} 93.75t^{1/2}, & T_0 = 0.1T_* \\ 214.29t^{1/2}, & T_0 = 0.02T_* \end{cases}$$

Визначимо за допомогою Рис.3 склад системи в околі критичної точки, яка спостерігалась в комп'ютерному експерименті [8]. Неважко бачити, що точці $(t_c = 0.056, n_c^{(d)} = 0.21)$ відповідає концентрація дипольних пар $c < 0.1$. Це означає, що критична точка двовимірного кулонівського газу знаходиться у квадрупольній фазі системи, розбавленій менш ніж 10% дипольних пар. Переважно у квадрупольній фазі знаходиться і ліва гілка бінодалі системи.

Зроблені висновки повинні бути уточненими, оскільки густина системи в критичній точці знаходиться далеко за межами застосування наближення розрідженого газу.

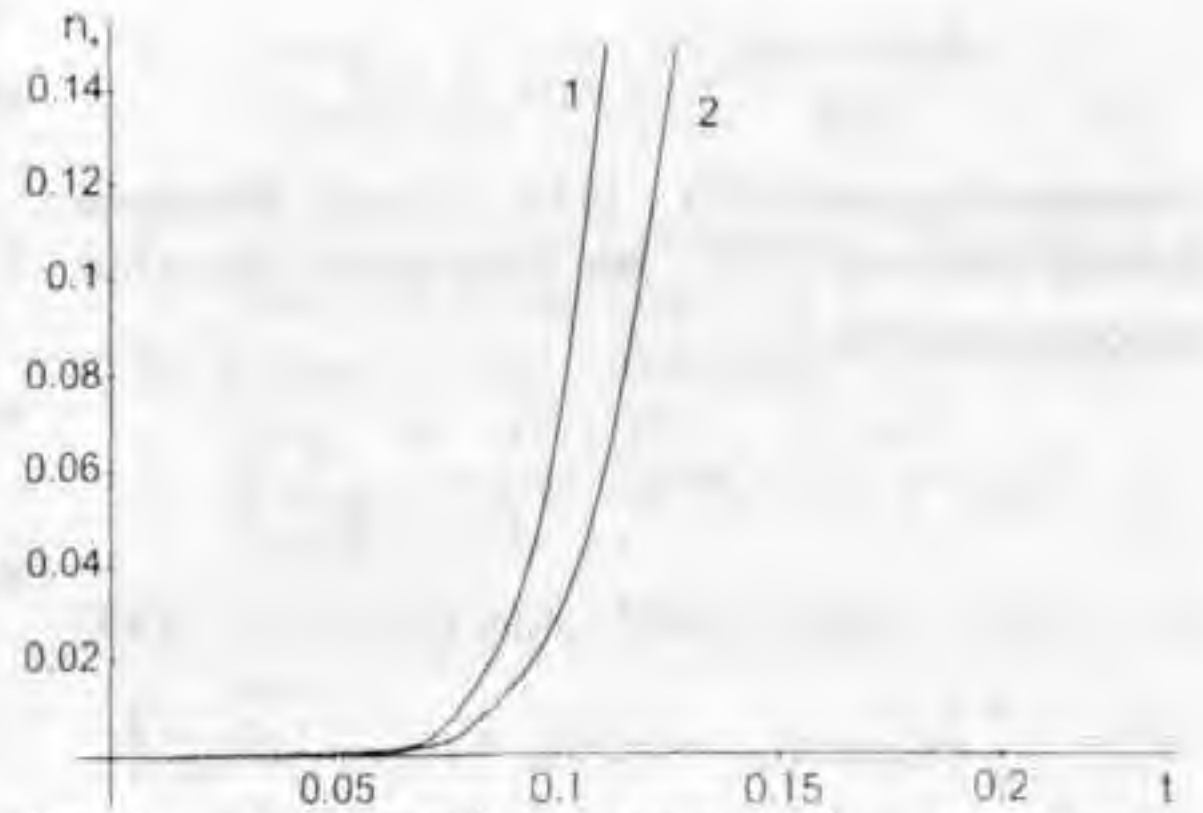


Рис.4. Ілюстрація залежності положення сепаратиси ($c = 0.5$) від значень T_0 :

1 - $T_0 = 0.02T_*$, 2 - $T_0 = 0.1T_*$.

В загальному випадку [13-15] хімпотенціали дипольних пар та квадрупольних кластерів мають структуру:

$$\mu_d = T \ln P_{nd}^{(d)} + \chi_d(T) + \mu_d^{(ex)}$$

$$\mu_Q = T \ln P_{nQ}^{(Q)} + \chi_Q(T) + \mu_Q^{(ex)}$$

де $P_{nk}^{(k)}$, $k = d, Q$, парціальні внески компонентів у тиск, розраховані в наближенні ідеального газу. Внаслідок чого формула (35) для концентрацій дипольних пар в дипольно-квадрупольній суміші узагальнюється наступним чином:

$$\frac{(1-c)(2-c)}{c^2} = 0.1n_s \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \frac{\zeta_Q}{\zeta_d^2} \exp \left(\frac{2\mu_d^{(ex)} - \mu_Q^{(ex)}}{T} \right) \quad (42)$$

Внески $\mu_d^{(ex)}$ і $\mu_Q^{(ex)}$ в хімічні потенціали дипольних пар та квадрупольних кластерів є пов'язаними з ефектами взаємодії між частинками. В подальшому ці ефекти будуть враховуватись у тому ж наближенні, в якому будується Ван-дер-Ваальсівське рівняння стану системи. У такий спосіб ми отримуємо (див.[13,15]):

$$\mu_d^{(ex)} = v(P - P_{nd}) - T \ln(1 - nv_d(c)) - c \frac{a_{dd}}{v} - \frac{1}{2}(1-c) \frac{a_{dd}}{v} \quad (43)$$

$$\mu_Q^{(ex)} = v(P - P_{nQ}) - T \ln(1 - nv_Q(c)) - (1-c) \frac{a_{Qd}}{v} - \frac{1}{2}c \frac{a_{Qd}}{v} \quad (44)$$

де $P_{nd} = P_{nd}^{(d)} + P_{nd}^{(Q)}$, а P - повний тиск неідеального газу. Позначаючи:

$$\frac{2\mu_d^{(ex)} - \mu_d^{(ex)}}{T} = Z_1 + Z_2 + Z_3$$

і використовуючи (43) і (44), а також рівняння Ван-дер-Ваальсу (23), ми отримуємо наступні значення внесків Z_i :

$$Z_1 = \frac{Pv}{T} - 1 = nv_0 \left(\frac{1}{1 - nv_0} - \frac{a}{Tv_0} \right)$$

$$Z_2 = -\ln(1 - nv_0), \quad (45)$$

$$Z_3 = \frac{n}{T} \left[a_{dd} - a_{dd} + c(2a_{dd} + a_{dd} - 1.5a_{dd}) \right]$$

З урахуванням (25)-(29), комбінації nv_0 , a/Tv_0 , а також Z_1 приймають вигляд:

$$nv_0 = \frac{\pi n_*}{2(2-c)} \left[1.5 + \sqrt{2} - (\sqrt{2} - 0.5)c \right], \quad (46)$$

$$\frac{a}{Tv_0} = \frac{1}{t^2} \frac{16c^2 + \frac{3}{(1+\sqrt{2})^6} (1-c)^2}{1.5 + \sqrt{2} - (\sqrt{2} - 0.5)c} +$$

$$\frac{32}{(3+\sqrt{2})^4} \frac{c(1-c)}{1.5 + \sqrt{2} - (\sqrt{2} - 0.5)c} \quad (47)$$

$$Z_3 = \frac{\pi}{2(2-c)} \frac{n_*}{t^2} \left[\frac{16}{(3+\sqrt{2})^4} \frac{3}{(1+\sqrt{2})^6} + \right.$$

$$\left. + c \left(\frac{1}{8} + \frac{3}{(1+\sqrt{2})^6} - \frac{24}{(3+\sqrt{2})^4} \right) \right] \quad (48)$$

Оскільки $\exp(Z_2) = \frac{1}{1 - nv_0}$, формула (42)

перетворюється у наступне рівняння для концентрації дипольних пар:

$$\frac{(1-c)(2-c)}{c^2} \times$$

$$\times \left[1 - \frac{\pi n_*}{2(2-c)} \left(1.5 + \sqrt{2} - (\sqrt{2} - 0.5)c \right) \right] =$$

$$- \frac{0.01}{t} \cdot 2^{1/2} n_* \exp(Z_1 + Z_3) \quad (49)$$

Область його застосування обмежена густинами:

$$n_* < 1/\pi, \quad (50)$$

при яких ліва частина залишається позитивною. Фактично, нерівність (50) співпадає з областю застосування самого рівняння Ван-дер-Ваальса.

Сепаратиси, розраховані за рівнянням (49), представлені на Рис.5. Якісно вони є

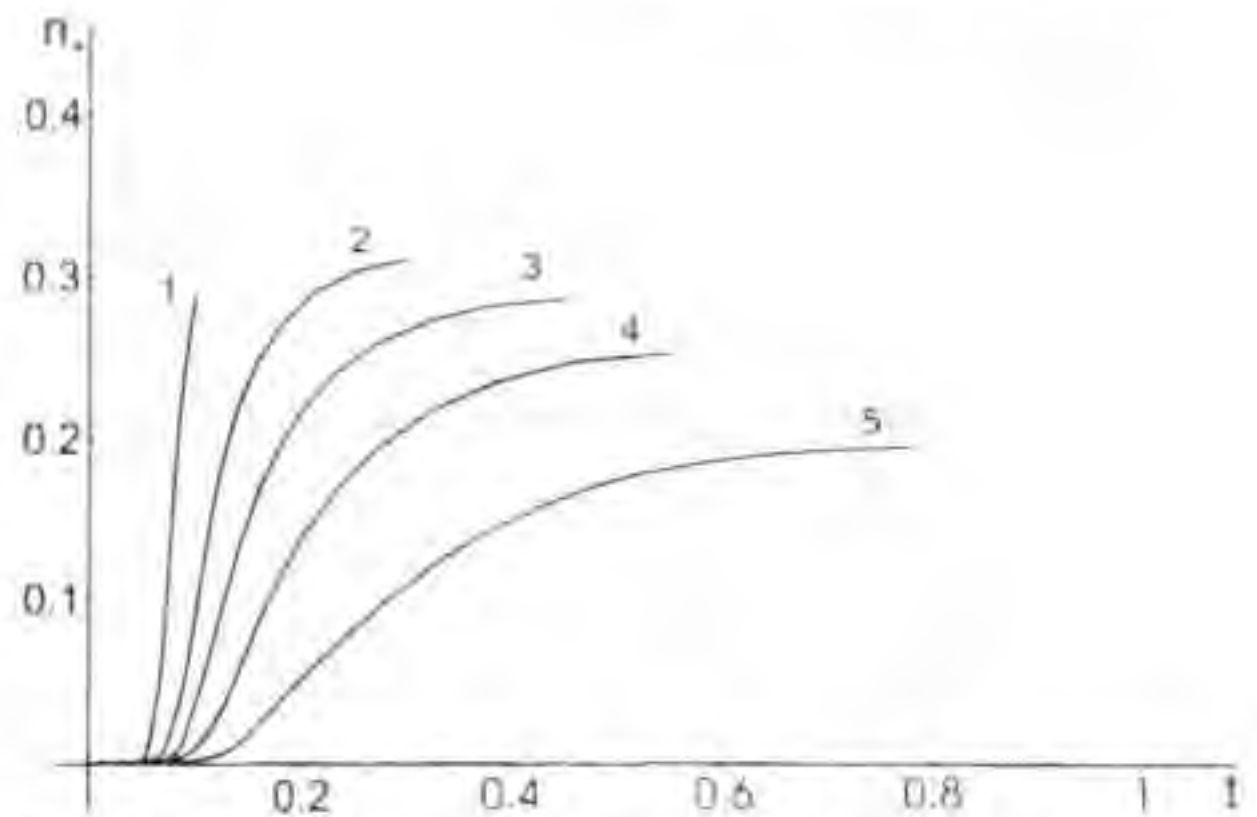


Рис.5. Сімейство сепаратрис $c(n_*, t) = c_0$, які відповідають формулі (49) і $T_0 = 0.1T_*$.

Лінії 1,...,5 відповідають значенням $c_0 = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$.

повністю подібними до представлених на Рис.3. Фактично, залежність сепаратрис від температури змінюється тільки при $n_* > 0.1$, а суттєво – при $n_* > 0.2$. Внаслідок цього, всі висновки відносно складу системи в околі критичної точки, зроблені раніше, залишаються незмінними.

Висновки

В роботі досліджується кластерна структури двовимірного кулонівського газу, який складається з заряджених твердих дисків. Завдяки кулонівській взаємодії різноіменно заряджені диски притягуються і утворюють зв'язані групи частинок різного розміру: дипольні пари, квадрупольні кластери, кільцеві гексагональні кластери і таке інше. Аналіз енергії зв'язку та ентропії утворення кластерів показує, що найбільш стійкими є дипольні пари та квадрупольні кластери. Останні утворюються з дипольних пар і руйнуються внаслідок зіткнень між кластерами та під дією сил їх електростатичної взаємодії. Рівноважні значення концентрацій дипольних пар та квадрупольних кластерів розраховуються за допомогою методів хімічної кінетики. Додатково приймається, що і дипольні пари, і квадрупольні кластери знаходяться у своїх основних енергетичних станах. Взаємодія між кластерами враховується у тому ж наближенні, в якому будується рівняння Ван-дер-Ваальсу дипольно-квадрупольної суміші. У такий спосіб показано, що критична точка системи типу пара-рідина та «газова» гілка бінодалі системи, визначені методами молекулярної динаміки, є розташованими у

квадрупольній фазі системи, розбавленій невеликою кількістю ($c < 0.1$) дипольних пар.

Аналіз фазової діаграми системи квадрупольних кластерів показує, що її критична точка типу пара-рідина є дуже близькою до відповідної точки, визначеної методами молекулярної динаміки у роботах [8,9]. Подальше уточнення теоретичних результатів має включати в першу чергу: 1) розрахунок впливу домішок дипольних пар на положення критичної точки та обох гілок бінодалі системи і 2) врахування збуджених станів квадрупольних кластерів. Вплив дипольних домішок буде приводити до підвищення критичної температури системи, а врахування коливальних станів квадрупольних кластерів буде супроводжуватись зменшенням їх стійкості і подальшим зростанням впливу дипольної компоненти.

Зазначимо, що додавання до системи невеличкої кількості гексагональних кластерів і кластерів більш високого порядку буде приводити до бажаного зростання її густини, але буде також супроводжуватись зниженням її критичної температури.

Таким чином, актуальною стає задача побудови Ван-дер-Ваальсівського рівняння стану системи, яка є сумішшю квадрупольної фази з невеликими доданками дипольних пар та гексагональних кластерів. Природним шляхом розв'язання цієї проблеми є термодинамічна теорія збурень.

Автор висловлює глибоку подяку академіку Л.А.Булавину і професору І.І.Адаменко за стимулювання виконання цієї роботи і обговорення отриманих результатів.

Література

1. Kosterlitz J.M. and Thouless D.J. // J.Phys.C – 1973. – 6. – P.1181–1203.
2. Levine Y., Li X. and Fisher M.E. // PRL – 1994. – 73. – P.2716–2719.
3. Levine Y. and Fisher M.E. // Physica – 1996. – 225. – P.164–220.
4. Villain J. // J. Phys. (Paris) – 1975. – 36. – P.581–589.
5. Young A.P. // Phys.Rev.B – 1979. – 19. – P.1855–1866.
6. Minnhagen P. // Rev. Modern Phys. – 1987. – 50. – P.1001–1066.
7. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. – Москва: Наука, 1987.
8. Orkoulas G. and Panagiotopoulos A.Z. // J.Chem.Phys. – 1996. – 104. – P. 7205–7209.
9. Gaillol J.M. and Levesque D., Phys.Rev.B – 1986. – 33. – P.499–508.
10. Kulinskii V.L., Malomuzh N.P. // PRE – 2003. – 67. – P.011(501–509).
11. Malomuzh M.N. // J.Mol.Liq. – 2006. – 127. – P. 40–43.
12. Malomuzh M.N. // Ukr.J.Phys. – 2007. – in press.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физка, часть I. – Москва: Наука, 1976.
14. Guillot B. & Guissani Yv.// Mol.Phys. – 1996. – 87. – P.37–86.
15. Kulinskii V.L., Malomuzh N.P. Properties of water near its critical point (In book “Soft matter under exogenic impacts”, Editors V. A. Mazur, S.J. Rzoska, Springer, 287–304, 2007.

УДК 539.194

Охріменко Б.А., доктор фіз.-мат. наук,
професор, Яблочкова К.С., аспірант

Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію N-H зв'язку молекули NH₃

Використано модельні потенціали Морзе та Меннінга для вивчення впливу ангармонізму коливань на явище девіації хімічного зв'язку. Показано, що на відміну від гармонічного наближення кут девіації приймає різні значення для стискування та розтягування зв'язку. Кут девіації залежить також від величини зміщення атому з положення рівноваги.

Ключові слова: хімічний зв'язок, ангармонізм нормальних коливань, обернена спектральна задача

Okhrimenko B.A., Doctor of phys-math. sciences,
professor, Yablochkova K.S. PhD student

The influence of anharmonicity on the deviation of N-H bond of the NH₃ molecule.

Morse and modified Manning-Rosen potentials were used to study the influence of anharmonicity on the deviation of the chemical bond. As opposed to the outcome of the harmonic approach, the deviation angle constitutes different values for the compression and stretching of the bond. The deviation angle also depends on the magnitude of the atom displacement from the equilibrium position.

Key Words: chemical bond, anharmonicity of normal vibrations, reverse spectral problem.

*E-mail: bao@univ.kiev.ua, yablochkova@yahoo.com

Вступ

Як відомо, при розв'язанні оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії найбільш поширеним є використання моделі валентно-силового поля. В цій моделі вважається, що напрямок хімічного зв'язку між хімічно зв'язаними атомами спрямований вздовж прямої лінії, яка з'єднує ядра цих атомів. Інша модель – модель центрально-силового поля практично не застосовується при розв'язанні оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії.

В той же час не можна на 100% виключати того, що реальне силове поле молекули відповідає деякій суперпозиції цих моделей. Наприклад, цілком імовірним є припущення, що реальне силове поле молекули в основному відповідає моделі валентно-силового поля, а відносно невеликий вклад припадає на модель центрально-силового поля. Наслідком реалізації такої ситуації буде відхилення напрямку хімічного зв'язку між хімічно зв'язаними атомами від напрямку прямої лінії, яка з'єднує ядра цих атомів.

Дійсно, при розв'язанні оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії в роботі [1] методом 3N-матриць, який не використовує попередніх припущень про

характер силового поля [2], було показано існування відхилення напрямку хімічного зв'язку від напрямку прямої лінії, яка з'єднує ядра атомів. Це явище в роботі [3] було названо девіацією хімічного зв'язку.

Для молекули води в конденсованому стані кут девіації складає 7,5° [3], що узгоджується із відомим явищем «викривлення» водневих зв'язків. Таким чином, з одного боку, результати розрахунків кута девіації підтверджуються експериментальними нейтронографічними дослідженнями викривлення водневих зв'язків [4], а з іншого боку – явище девіації хімічного зв'язку природним чином пояснює причину викривлення водневих зв'язків. Існування девіації хімічного зв'язку O-H у молекули води узгоджується також із розрахунками розташування ефективних точкових зарядів в нейтральній молекулі H₂O. Згідно із розрахунками [5], розташування ефективних додатних зарядів співпадає із розташуванням атомів водню, а відповідний від'ємний заряд зсунутий від атома кисню в бік атомів водню майже на третину відстані між атомом кисню та лінією H-H.

Ці факти дозволяють вважати, що напрямки хімічних зв'язків, які утримують атоми молекули в положенні рівноваги, визначаються особливостями будови колективної електронної оболонки молекули,

«центр ваги» якої може не співпадати з розташуванням окремого атома молекули. Тобто, практично «невагома» електронна оболонка молекули керує як розташуванням атомів в положенні рівноваги, так і коливним рухом ядер атомів. При такому тлумаченні хімічних зв'язків молекули цілком природним є висновок, що між атомами молекули взаємодія здійснюється за рахунок як центральних, так і нецентральних сил. Зазначимо, що факт існування нецентральних сил є дуже важливим, бо не дозволяє поширювати одне з найбільш відомих доведень закону збереження моменту імпульсу на багатоатомні молекули [6].

Для того, щоб такі уявлення про хімічні зв'язки набули узагальнення і певного розвитку, доцільно вивчити характеристики девіації для достатньо великої кількості молекул з урахуванням, по можливості, всіх факторів, які впливають на це явище.

Девіацію хімічного зв'язку було досліджено для молекул H_2O [1,3,7,8], H_2S [9], H_2Se , H_2Te [10], NO_2^- [11], NH_3 [12-14] та для деяких інших молекул [14,15]. Для всіх досліджених молекул спостерігається явище девіації, що свідчить про певну поширеність цієї особливості хімічного зв'язку.

Доцільно звернути увагу на деякі спільні риси, що характеризують всі згадані роботи, які присвячені вивченню девіації. По-перше, для визначення силової матриці молекули використовуються значення нульових частот нормальних коливань. По-друге, розрахунки петлі девіації виконуються в гармонічному наближенні за допомогою визначеної силової матриці.

Що стосується молекули NH_3 , то в роботі [12] використано наведені в науковій літературі значення нульових частот. Такий спосіб врахування нульових частот не позбавлений недоліків, бо на одержані в науковій літературі значення впливають наближення і моделі, які можуть суперечити методу $3N$ -матриць.

Крім того, в роботі [12] при пошуку матриці форм нормальних коливань використано 3 параметри форм коливань, що створює певні незручності під час розрахунків частот вироджених нормальних коливань. Обидва вказані недоліки роботи [12] враховано в роботі [13]. По-перше,

розроблено процедуру використання «неповного» базису, що дозволяє використовувати 2 замість 3-х параметрів форми коливань. По-друге, розрахунок значення нульових частот виконано способом, який базується на значеннях експериментальних частот нормальних коливань.

Стосовно наближень, які використовуються в роботах [13,14], можна зробити наступні зауваження. На етапі розрахунку нульових частот замість необхідних чотирьох параметрів ангармонізму використовується лише 2 параметри. Крім того, розрахунки петлі девіації виконано без врахування ангармонічності коливань. Обидва вказані недоліки враховано в даній роботі.

Метод

Для відшукування значень чотирьох нульових частот коливань молекули NH_3 , двох параметрів форми коливань, та чотирьох параметрів ангармонізму використовувались експериментально визначені частоти коливань трьох ізотопних модифікацій молекули аміаку — NH_3 , ND_3 та $^{15}NH_3$. В випадку помітного інверсійного розщеплення використовувалося середньо арифметичне значення частот. Процес відшукування нульових частот і зазначених вище параметрів ангармонізму та форми коливань відбувався наступним чином. В якості початкового наближення були застосовані літературні дані про нульові частоти. Дані про експериментальні та нульові частоти використані для розрахунку чотирьох початкових значень констант ангармонізму.

$$u_i = \frac{1}{\omega_{0i}} \left(\frac{\omega_i}{\omega_{0i}} - 1 \right) \quad (1)$$

Тут ω_i — експериментальне значення i -ї частоти коливань, ω_{0i} — нульова частота цього ж коливання, u_i — параметр ангармонізму. Відомості про параметри форми коливань [12-14] використано також як початкове наближення.

Ця сукупність даних дозволяє визначити в першому наближенні силову матрицю молекули NH_3 за наступною формулою:

$$\hat{V}(u_i, \psi_i) = \hat{M} \hat{L}(\psi_i) \hat{\omega}(u_i) \hat{L}(\psi_i) \hat{M}^T, \quad (2)$$

де $\hat{V}$ - силова матриця, $\hat{M}$ - діагональна матриця мас атомів, що входять до складу молекули NH_3 , матриця $\hat{L}$ визначає форму власних і невластних нормальних коливань молекули NH_3 , $\hat{\omega}$ - діагональна матриця квадратів частот, як власних, так і невластних нормальних коливань молекули NH_3 , знаком тильда позначена операція транспонування.

Знайдена матриця як функція шости змінних використовувалася для розв'язання прямої спектральної задачі коливальної спектроскопії для молекул ND_3 та $^{15}\text{NH}_3$.

$$\hat{D}_i(\psi_1, \psi_2, u_1, u_2, u_3, u_4) = \hat{M}_i^{-1} \hat{V}(\psi_1, \psi_2, u_1, u_2, u_3, u_4), \quad (3)$$

де матриця $\hat{M}_i$ відповідає одній з ізотопних модифікацій молекули NH_3 : ND_3 або $^{15}\text{NH}_3$. Власні значення матриць $\hat{D}_i$ дорівнюють квадратам дев'яти нульових частот ω'_{0i} нормальних коливань для кожної з ізотопних модифікацій молекули NH_3 . Одержані частоти нормальних коливань обох молекул порівнювалися з експериментальними.

Далі використовувалася операція варіювання параметрів форми і ангармонізму для забезпечення мінімальної розбіжності між розрахованими і експериментальними частотами коливань.

Одержані після даної процедури нові значення параметрів форми і ангармонізму використовувалися для визначення в наступному наближенні нульових частот. Після цього весь процес повторювався з початку.

Описаний цикл виконувався кілька разів і зупинявся при відсутності розбіжностей між даними на початку циклу і в його кінці. Знайдена силова матриця використовувалася для подальших розрахунків.

Для визначення кута девіації хімічного зв'язку обчислювалася полярна діаграма залежності енергії молекули від напрямку постійного по величині зсуву одного з атомів водню. Положення інших атомів водню й атома азоту залишалися незмінними.

Для врахування ангармонізму коливань використовувалися потенціал Морзе та модифікований потенціал Меннінга [16, 17].

Потенціальна енергія молекули знаходилася як сума

$$V = \sum_i V(Q_i), \quad (4)$$

Вектор зсуву атомів з положення рівноваги $\vec{X}$ зв'язаний з вектором нормальних координат $\vec{Q}$ наступним співвідношенням:

$$\vec{X} = \hat{L} \vec{Q}. \quad (5)$$

Залежність потенціальної енергії для координати Q_1 , що відповідає повносиметричному нормальному коливанню ω_1 , а також для нормальних координат Q_3 та Q_4 , що відповідають двічі виродженим коливанням ω_3 та ω_4 , моделюється функцією Морзе:

$$V(Q_i) = D_i (1 - e^{-\sigma_i Q_i})^2. \quad (6)$$

Використовуючи відомий вираз для енергії коливальних станів

$$E_v = \hbar \omega_{0i} \left(v + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_{0i} \chi_i \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (7)$$

і функцію Морзе знаходимо параметри потенціалу (6)

$$\omega_i = \frac{E_{v1} - E_{v0}}{\hbar}, \quad \chi_i = \frac{\omega_{0i} - \omega_i}{2\omega_{0i}},$$

$$D_i = \frac{\hbar \omega_{0i}}{4\chi_i}, \quad \sigma_i = \sqrt{2\chi_i \omega_{0i}}. \quad (8)$$

З аналізу форми коливання ω_2 випливає, що за умови великих амплітуд коливань можливо є інверсія молекули аміаку через нестабільну конфігурацію симетрії D_{3h} . Тому для опису коливання ω_2 було використано двоямний потенціал. У якості модельного потенціалу було запропоновано модифікований потенціал Меннінга [18]:

$$V(Q_2) = D_2 \left[\frac{b_2}{2} - \frac{1}{\cosh^2(\sigma_2 z_2)} \right]^2. \quad (9)$$

В якості аргументу потенціалу Меннінга використовувалася величина, що дорівнює відстані атома азоту від центру мас молекули. В зв'язку з цим слід звернути увагу на необхідність врахування нормальної координати, яка відповідає трансляційному руху молекули. Вираз для координати z_2 таким чином визначається як:

$$z_2 = z_0 - Q_2 \sqrt{\frac{3m}{M(M+3m)}} \sin \psi_1 + z_0, \quad (10)$$

де ψ_1 - параметр форми, M та m - маси атомів азоту і водню, z_0 - координата центру мас

Таблиця 1.

Експериментальні частоти коливань молекул $^{14}\text{NH}_3$, $^{15}\text{NH}_3$, ND_3 ω_{ie} і константи ангармонізму u_i .

ω_i	$u_i \times 10^{-5}$	$^{14}\text{NH}_3 \omega_{ie}, \text{cm}^{-1}$	$^{15}\text{NH}_3 \omega_{ie}, \text{cm}^{-1}$	$\text{ND}_3, \omega_{ie}, \text{cm}^{-1}$
ω_1	1.947	3337	3335	2420.1
ω_2	18.71	950.4	943.5	745.7
ω_3	0.983	3444	3335	2564
ω_4	3.743	1621	1625	1191

молекули, z_0 – описує зміну положення центру мас молекули при коливанні ω_2 .

Вирази для параметрів потенціалу Меннінга знайдені з наступних міркувань. По-перше, покладається, що потенціал дисоціації для кривої Меннінга має бути не меншим, ніж потенціал дисоціації для кривої Морзе. По-друге, висота бар'єра між мінімумами потенціалу Меннінга має бути не більше, ніж значення функції Морзе у точці $z = 0$. По-третє, другі похідні в точці мінімуму для кривої Морзе і кривої Меннінга повинні бути рівні між собою. По-четверте, мінімум кривої Меннінга повинний знаходитися в точці рівноважного положення атома кисню.

Для визначення кута девіації хімічного зв'язку обчислювалася полярна діаграма залежності енергії молекули від напрямку постійного по величині зсуву одного з атомів водню в площині симетрії молекули σ_v . Положення інших атомів водню й атома азоту залишалися незмінними.

Результати

У таблиці 1 наведено значення частот нормальних коливань молекул $^{14}\text{NH}_3$, $^{15}\text{NH}_3$, ND_3 [12] та розраховані параметри ангармонізму. Отримані значення параметрів форми становлять $\psi_1 = 1,263$ та $\psi_2 = 0,923$.

Розбіжність між розрахованими частотами і нульовими частотами при розрахунку прямої спектральної задачі коливальної спектроскопії виявилася порядку 10^{-7} , тобто узгодження між експериментальними та розрахованими частотами можна вважати цілком

задовільним.

У таблиці 2 наведено параметри потенціалів, що були використані при розрахунках.

Із загальних міркувань можна очікувати, що врахування ангармонізму призведе до відхилення форми полярної діаграми залежності енергії молекули від напрямку постійного по величині зсуву одного з атомів водню (петлі девіації) від симетричної. Повинна також з'явитися залежність форми петлі девіації від величини зсуву. Крім того, можна очікувати зміни величини кута девіації, оскільки використані інші значення параметрів ангармонізму u_i .

Виконані розрахунки підтвердили ці очікування. Основні відмінності від результатів гармонічного наближення є наступними: девіаційна петля виявляється асиметричною; її форма залежить від величини зсуву обраного атому; зв'язок Н-Н молекули NH_3 характеризується двома кутами девіації хімічного зв'язку.

На рис. 1 представлені три петлі девіації для зміщень, що становлять 1% (петля 1), 20% (2) та 50% (3) від відстані між атомами N та H.

Для наочності одержані залежності нормовані на величину максимуму петлі, що відповідає розтягання зв'язку N-H молекули NH_3 . Таке представлення результатів дозволяє впевнитися, що полярна діаграма суттєво змінює свій вигляд при збільшенні зміщення атому водню з положення рівноваги.

Як видно з рисунку полярна діаграма перестає бути симетричною, причому видно, що за умови великих зміщень, при наближенні атому

Таблиця 2.

Параметри потенціалів для молекули NH_3 .

Q_i	Значення параметрів потенціалів $D_i (\text{cm}^{-1})$, $\sigma_i (1/\sqrt{\text{cm}})$.
Q_1	$D_1 = 2.913 \times 10^4$; $\sigma_1 = 92.516$
Q_2	$D_2 = 1.7 \times 10^5$; $b_2 = 1.758$; $a_2 = 194.847$
Q_3	$D_3 = 5.439 \times 10^4$; $\sigma_3 = 67.828$
Q_4	$D_4 = 1.503 \times 10^4$; $\sigma_4 = 62.312$

водню до атому азоту енергія молекули є більшою ніж при його віддаленні від атому азоту.

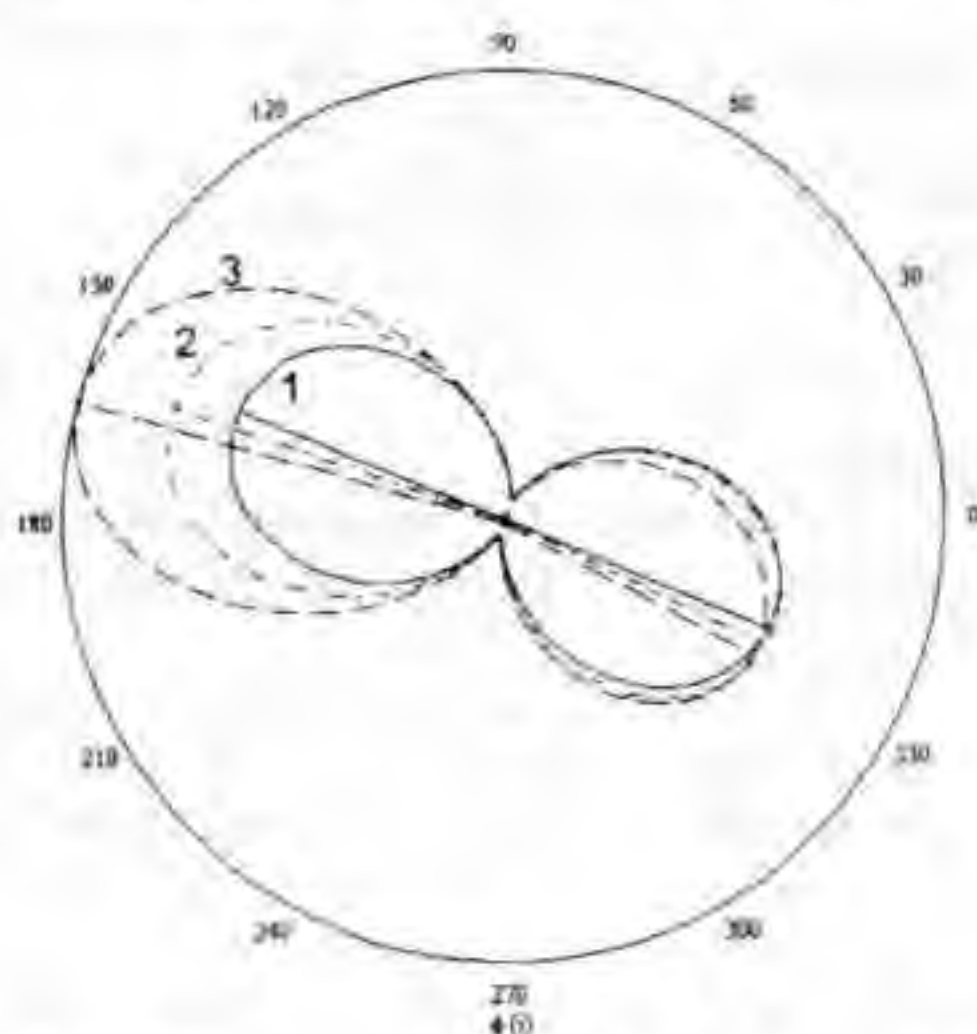


Рис.1 Вигляд петлі девіації молекули NH_3 для різних за величиною зміщень атому водню.

Також можна помітити, що напрямок на кожен з максимумів петлі девіації змінюється при збільшенні за величиною зсуву атому водню.

На рис. 2 наведено залежність кутів девіації стискання та розтягу від величини зміщення атому Н молекули NH_3 . По вісі абсцис відкладене зміщення атому водню з положення рівноваги у відсотках від довжини зв'язку Н – N. Верхня крива Δ_{comp} відповідає стисканню зв'язку Н – N, а нижня Δ_{st} – його розтягу.

З рисунку видно, що відхилення максимумів петлі девіації від напрямку, що з'єднує атоми Н і N, є різними за величиною у випадку зміщення атому водню у протилежних

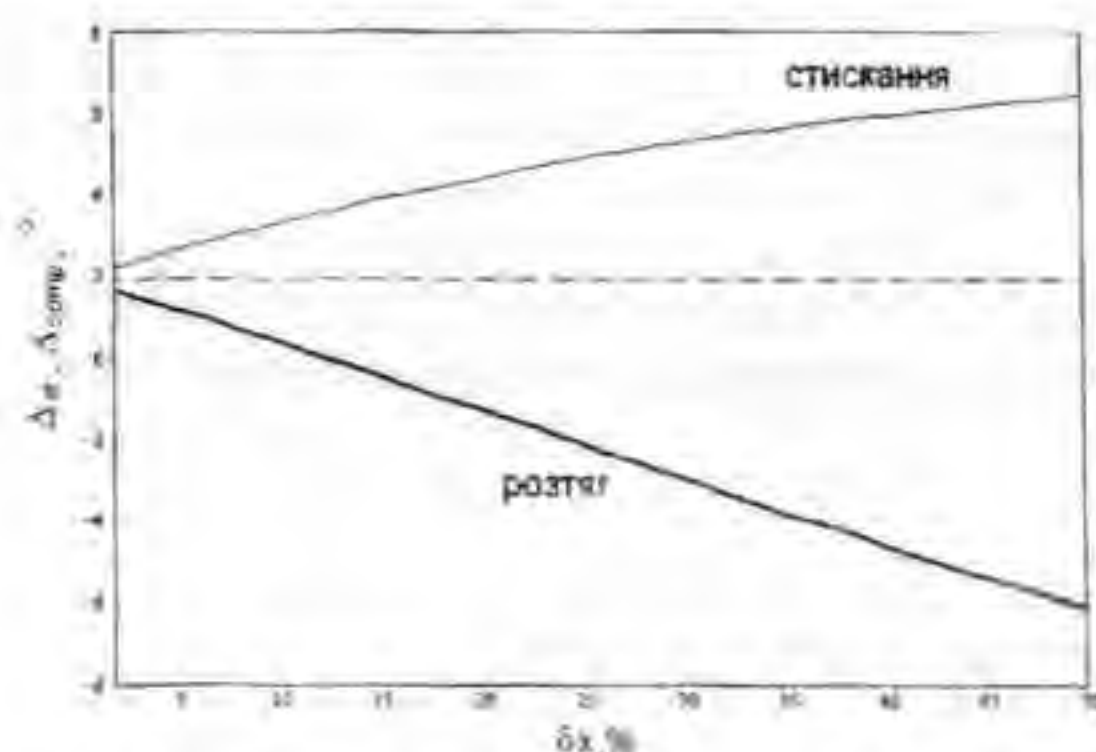


Рис.2 Залежність кутів девіації від величини та напрямку зміщення одного з атомів водню молекули NH_3 .

напрямках, причому, чим більшим за величиною є зміщення атому Н, тим більша різниця між кутами девіації.

Кут девіації росте при зменшенні відстані між атомами водню та азоту і зменшується при збільшенні такої відстані. Зазначимо, що при віддаленні атому водню більше ніж на 12 % від довжини зв'язку Н – N кут девіації стає від'ємним.

У випадку малих зміщень (порядку відсотку від довжини зв'язку Н – N), кут девіації для молекули склав $\Delta \approx 1.9^\circ$.

Це значення є близьким до значення, отриманого для цієї молекули при розв'язку задачі у гармонічному наближенні [5], однак не співпадає з ним з огляду на вибір іншого методу розрахунку параметрів ангармонізму.

Висновки

У роботі запропоновано новий спосіб врахування ангармонізму коливань, що складається з двох етапів. На першому етапі знаходяться значення нульових частот коливань за експериментальними частотами нормальних коливань. В роботі застосовується новий спосіб врахування пошуку параметрів ангармонізму для знаходження нульових частот коливання молекули NH_3 . Цей метод, на відміну від попередніх робіт, де було використано лише два таких параметри для набору з чотирьох коливань, дозволяє врахувати ангармонізм кожного коливання «індивідуально».

На другому етапі врахування ангармонізму коливань для опису кожного коливання використовується свій модельний потенціал. В даній роботі для опису коливань молекули NH_3 запропоновано потенціали типу Морзе (коливання ω_1 , ω_3 та ω_4), та модифікований потенціал Менінга коливання ω_2). У модифікований потенціал Менінга, що був запропонований для опису деформаційного коливання молекули води [16] внесені зміни, що краще описують рух атомів при здійсненні цього коливання – врахована зміна положення центру мас молекули при коливанні ω_2 .

В результаті використання даних наближень, що враховують ангармонізм коливань, показано, що кут девіації хімічного зв'язку має різні значення для розтягу та стискання. Він залежить також від величини зміщення атому азоту із положення рівноваги.

Показано, що характер змін петлі девіації при врахуванні ангармонізму для молекули NH_3 зберігає особливості, характерні для молекули

води та інших гідридів 6-ї групи. Так при розтягу зв'язку Н – Н він зменшується, а стисканні – збільшується.

Деякою відмінністю у результатах для молекули NH_3 та гідридів шостої групи є той факт, що при віддаленні атому водню на відстань більше 12 відсотків зв'язку Н – Н кут девіації стає від'ємним. Для молекул води та інших гідридів розтяг зв'язку, що відповідав би від'ємним значенням девіації становив більше повної довжини зв'язку, що не відповідає уявленням про міцність хімічного зв'язку.

Список використаних джерел

1. М.У.Білий, Б.А. Охріменко Оцінка силової матриці молекули H_2O в рідкому стані// Укр. фіз. журн. – 1999. – 44, №3 – с. 326-331.
2. М.У. Белый, Б.А. Охрименко, С.М. Яблочков Метод решения обратной спектральной задачи // Известия вузов МВ ССО СССР, физика – 1987. – 4. – с.52-57.
3. М.У. Білий, Г.І. Гайдідей, Б.А. Охріменко Девіація ОН- зв'язку в молекулі H_2O // Functional Materials – 2000 – 7, №3. – с.543-5451.
4. Г.В. Юхневич Инфракрасная спектроскопия воды, М.: «Наука».- 1973.-208с.
5. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий.-М.: Наука, 1982 – 312 с.
6. Охріменко Б.А. Про можливість зміни з часом момента імпульсу замкненої системи матеріальних точок, УФЖ, 2002, т.47, №5, С.500-507.
7. Гайдідей Г.І., Охріменко Б.А. Дослідження девіації ОН-зв'язку в молекулі H_2O . КНУ, Вісник, Фізика, 2002.- №4, С.22-24.
8. Охріменко Б.А., Гайдідей Г.І. Вплив міжмолекулярної взаємодії на напрямок О-Н - зв'язку в молекулі води // УФЖ-2003-Т. 48, №7, С.739-743.
9. М.У.Білий, Б.А. Охріменко Девіація хімічного зв'язку S-H молекули H_2S // Укр. фіз. журн. – 2001. – 46, №8 – с. 825-828.
10. Гайдідей Г.І., Охріменко Б.А., Шелехова М.В., Яблочкова К.С. Оцінка силових матриць молекул H_2Se та H_2Te // Вісник КНУ, Фізика, №5, 2003,с.16-19.
11. Білий М.У., Гайдідей Г.І., Охріменко Б.А., Сакун В.П., Самоїленко Д.М. Силовая матрица молекулярного аніона NO_2^- і девіація N-O - зв'язку, УФЖ, 2001, т.46, №12, С.1256-1261.
12. М. У. Білий, Б. А. Охріменко, Девіація N-H зв'язку в молекулі NH_3 , УФЖ, 2001, т.46, №4, С.466-470.
13. Охріменко Б.А. Самоїленко Д.М. Дослідження девіації N-H зв'язку молекули NH_3 . КНУ, Вісник, Фізика, 2002.- №4, С.45-49.
14. В.А. Okhrimenko, G.I. Gaididei, D.M. Samoilenko Chemical bonds deviation in NH_3 , PH_3 , AsH_3 , and SbH_3 molecules. Functional Materials – 2004 – 11, №1. – с.136-141.
15. Б.А. Охріменко, Д.М. Самоїленко Девіація C-H зв'язку в рідкому та газоподібному хлорметані та йодметані, УФЖ, 2005, т.50, №6, С.544-550.
16. В.А. Okhrimenko, K.S. Yablochkova "Barrier of linearity and frequency of inversion through the linear configuration of H_2O molecule ", Conference proceedings, "SPO 2006 – Optics and High Technology Material Science", К. 2006, р.86
17. Б.А. Охріменко, К.С. Яблочкова Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію зв'язків Н-Х молекул типу H_2X , КНУ, Вісник, Фізика, 2006.- №4, С.449-458.
18. Таунс Ч., Шавлов А., Радиоспектроскопия, пер. с англ. – М., 1959

Надійшла до редколегії 01.06.2007

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича

КНУ

ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12829JB

45 - Чит зал періодики та дисерт. 20 00

