



ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Випуск № 3

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**ВІСНИК
КИЇВСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ**

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №3 2009

Вісник Київського університету, випуск №3, 2009

Серія: фізико-математичні науки

З 1991 року серії вісників Київського університету "Математика і механіка", "Фізика", "Моделирование и оптимизация сложных систем" реорганізовано у "Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки". У віснику містяться результати нових досліджень у різних галузях математики, інформатики, механіки, фізики та радіофізики для наукових працівників, викладачів, аспірантів, інженерів і студентів. Друкується за рекомендаціями Вчених Рад фізичного, радіофізичного, механіко-математичного факультетів та факультету кібернетики

Журнал "Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки" включено до переліку фахових видань ВАК України.

Редакційна колегія:

- **Анісімов Анатолій Васильович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор, **головний редактор**;
- **Хусаїнов Денис Ях'євич**, доктор фізико-математичних наук, професор, **заступник головного редактора, відповідальний за видання**;
- **Адаменко Ірина Іванівна**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Акіменко Віталій Володимирович**, доктор технічних наук, професор;
- **Анісімов Ігор Олексійович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Буй Дмитро Борисович**, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
- **Булавін Леонід Анатолійович**, академік НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Гарашенко Федір Георгійович**, доктор технічних наук, професор;
- **Данилов Вадим Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Єжов Станіслав Миколайович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Кириченко Володимир Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Козаченко Юрій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Левитський Сергій Михайлович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Макара Володимир Арсенійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Мелешко В'ячеслав Володимирович**, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Перестюк Микола Олексійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор;
- **Скришевський Валерій Антонович**, доктор фізико-математичних наук, професор.

Редакційний відділ:

- **Анісімова Тетяна Харитонівна**, **відповідальний секретар**;
- **Безущак Оксана Омелянівна**, bezusch@univ.kiev.ua;
- **Мороз Костянтин Олександрович**, morozko@univ.kiev.ua;
- **Родіонова Тетяна Василівна**, rodtv@univ.kiev.ua;
- **Хмелюк Надія Кузьмівна**, khameluk@univ.kiev.ua;
- **Сільвейструк Людмила Миколаївна**, **технічний редактор**, slm-klm@ukr.net.

Адреса редакційної колегії:

Факультет кібернетики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
пр. Глушкова, 2, корп.6. 03680 Тел. (044) 259-01-49

ISBN 978-966-2142-95-2

ISSN 1812-5409

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Ганюшкін О.Г., Турка Т.В. Порядок напівгрупи відповідностей скінченної групи	9
Головащук Н.С., Крюкова Г.В. Про невід'ємні цілі квадратичні форми	14
Жучок А.В. Найменша напівструктурна конгруенція дімоноїду	22
Кириченко В.В., Броницька Н.А. Глобальна розмірність напівпервинних нетерових SPSP-кілець	25
Ковдриш В.В. Вербальні підгрупи груп унітрикутних матриць над кільцями лишків	32
Полосьмак О.В. Умови та швидкість рівномірної збіжності розкладів процесів з $L_2(O)$ по вейвлетам Баттл-Лемарі	36
Романенко В.М. Наближення обмежених розв'язків різницевих рівнянь на півосі розв'язками відповідних задач Коші	41
Рябухо О.М. Функціональний підхід до обґрунтування теорії ідеалів для кілець цілих алгебраїчних чисел в працях Дмитра Граве	45
Чайковський А.В. Узагальнення теореми Крейна для G -секторіальних операторів	49
Ямненко Р.Є., Крєневич А.П. Про розподіл супремума узагальненого ДБР з параметром Нюрста $H < 0,5$	51

ДИФЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Василевський Ю.Є., Лимарченко О.С. Вплив зміни швидкості течії рідини на нелінійний перерозподіл енергії при коливаннях трубопроводу	57
Гарт Е.Л., Гудрамович В.С., Рябоконь С.А. Розв'язування задач пружно-пластичної рівноваги пластин з прямокутним і круговим отворами на основі проєкційно-ітераційних схем реалізації методу скінченних елементів.	61
Карнаухов В.Г., Січко В.М., Карпенюк О.С. Вплив фізичної нелінійності на пасивне демпфування вимушених резонансних коливань ізотропної в'язкопружної циліндричної панелі.	67
Король І.І. Дослідження розв'язків нетерових крайових задач для імпульсних диференціальних систем з виродженням.	71
Лоос І.І. Аналіз напруженого стану гнучкої ортотропної конічної оболонки в лінійній і нелінійній постановках в нестационарному магнітному полі.	77

Лимарченко О.С., Ружицький І.С. Вплив рухомості еліптичного резервуару на нелінійне хвилеутворення на поверхні рідини.	81
Маринець К.В. Дослідження розв'язків триточкових задач типу Коші-Ніколетті та зведення їх до двоточкових.	85
Некислих К.М., Острик В.І. Розклинювання пружного клина.	91
Таран Є.Ю., Кондрат Р.Я. Структурно-феноменологічна реологія розведених розчинів недеформівних вільнопротічних ланцюгових макромолекул.	97
Швець О.Ю., Печерний В.А. Особливості хаотичної динаміки однієї маятникової системи при неідеальному збудженні.	103

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Волошин О.Ф., Пошелюжний О.В. Побудова та дослідження нечіткої моделі поведінки однопродуктової фірми	111
Глебена М.І., Цегелик Г.Г. Чисельний метод відшукування абсолютного екстремуму негладких і розривних функцій двох дійсних змінних	115
Горбачук В.М., Гаркуша Н.І. Багаторівневі моделі та методи обчислюваної загальної рівноваги	121
Іванніков Є.Ю. Послуга множинної автентифікації для ЗОС на базі GNU/Linux з використанням USB накопичувачів	127
Козлов М.В. Ефективні алгоритми обчислення інтегральних ознак для розпізнавання цифрових зображень	133
Луценко Є.О., Доценко С.І. Матричні ігри з обмеженням на множину стратегій	138
Марценюк В.П., Андрущак І.Є. Про стійкість в двокомпартментній фармакокінетичній моделі: метод вироджених функціоналів Ляпунова	146
Мащенко С.О. Стабільні за перевагами рівноваги в одноцільових некооперативних іграх	152
Наконечний О.Г., Репецький С.П., Стащук Б.В. Теорія електропереносу системами з вузькими енергетичними зонами в магнітному полі	158
Подлипенко Ю.К., Горбатенко М.Ю. Оцінювання функціоналів від розв'язків лінійних еліптичних рівнянь, при повністю невідомих правих частинах	164
Пророченко О.С., Чечельницький О.А. Стаціонарні характеристики мережевої моделі з неординарним пуассонівським вхідним потоком вимог	170
Рисай Є.М., Семенов В.В. F^* -розширення некоерцитивних екстремальних задач	174
Рубльов Б.В., Шкуліпа О.В., Шейман Б.С., Колесник Л.О. Застосування t-критерію Стюдента в кластеризації точок у багатовимірному просторі	180
Семенова Н.В., Мащенко О.С. Оптимізація на комбінаторній множині	184

перестановок в умовах неточно заданих даних

Терещенко В.М., Григоренко Д.П. Персептронна модель прогнозування ринкових котирувань	190
Умеров О.С. Оцінка наближених методів вибору оптимального спостерігача в задачах гарантованого оцінювання розв'язків еліптичних рівнянь	196
Усар І.Я., Протопоп Ю.О. Система з повторними викликами керована гістерезисною стратегією	200
Чечельницький О.А. Про дифузійну апроксимацію мережевої моделі з неординарним вхідним потоком вимог	206
Шатирко А.В., Хусаїнов Д.Я. Дослідження інтервальної стійкості диференціальних систем регулювання із запізненням за допомогою функціоналів Ляпунова-Красовського	212
Швець Д.В. Дослідження стійкості розв'язків одновимірної параметричної моделі магнітної надпровідної левітації за першим наближенням	222

РАДІОФІЗИКА

Ананьїна О.Ю., Бутрімов П.А., Северина О.В., Звонова А.В. Квантово-хімічне дослідження геометричних та електронних властивостей нанокластерів графіту	229
Іванов І.І., Скришевський В.А. Вплив адсорбційно-десорбційних явищ на спектральні характеристики Бреггівських дзеркал на основі поруватого кремнію	233
Ільченко В.В., Ільченко Л.Г., Лобанов В.В. Розподіл електростатичного потенціалу в системі напівпровідник - вакуум – метал у відсутності зовнішньої напруги	237
Коломієць І.С., Обуховський В.В., Зміна кількості доступних станів при плавленні простих речовин	243
Коротков П.А., Кириленко Є.К., Гальченко С.М. Методика підвищення чутливості кількісного рентгенофлуоресцентного аналізу біологічних проб, що базується на методі максимальної правдоподібності	248
Кучеренко Є.Т., Костюкевич О.М. Дослідження жевріючого розряду з порожнинними катодами	256
Левитський С.М. Компресія ЛЧМ – імпульсів у плазмі іоносфери	260
Находкін М.Г., Федорченко М.І., Лепявко Б.С. Формування інтерфейсу Sb/Ge(100)	264
Онищук В.М., Первак Ю.О. Прояви резонансу в багат шарових тонкоплівкових структурах без явно виражених резонаторів	269
Ткаченко А.В., Ананьїна О.Ю., Мікасян Г.Р. Теоретичне дослідження взаємодії атомів фосфору з поверхнею SiO ₂ /Si(100)	273

СУЧАСНА ФІЗИКА

Абдікарімов Б.Ж., Альохін О.Д., Неділько С.Г., Остапченко С.Г., Поперенко Л.В. Коефіцієнт дифузії та радіус кореляції розчину ізомасляна кислота - важка вода у критичному стані	279
Адаменко І.І., Григор'єв А.М., Кузовков Ю.Г., Мироненко О.К. Вплив форми молекули на теплофізичні властивості рідин. I. Пружні характеристики	281
Атамась Н.О. Дослідження зміни будови утворень з молекул води та структура системи вода- пропиловий спирт при $T=300\text{K}$ за даними по енергія міжмолекулярної взаємодії	285
Білокриницька Л.М., Грищук О.Ю., Клименко В.С., Шостак С.В., Гречко Л.Г. Поглинання електромагнітного випромінювання (ЕМВ) матричними дисперсними системами з багатошаровими кульовими включеннями	289
Булавін Л.А. Вербінська Г.М., Загородня О.А., Перепелиця С.М., Вареня О.Г., Кравцова Т.А. Визначення енергії взаємодії між водою та молекулами ДНК методом випаровування	295
Головач Г.П., Яшук В.М., Науменко А.П., Василюк С.В. Розрахунок проходження електронного збудження через макромолекулу	299
Гречко Л.Г., Семчук О.Ю., Білокриницька Л.М., Стеценко С.В. Взаємодія електромагнітної хвилі з флуктуаціями поверхневих хвиль релея в фотопружньому середовищі	303
Калініченко Д.В. Зміна структури приповерхневого шару монокристалічного кремнію під дією НВЧ опромінення	311
Королович В.Ф., Адаменко І.І., Даценко О.І., Держипольський А.Г., Меленевський Д.О., Копитков В.В., Селькин В.П., Мороз К.О. Королович А.Ф. Оптичні властивості водно-полімерних систем і полімерних шівок на їх основі	315
Ніколюк П.К., Баран В.В., Серпак Н.Ф., Лукіяничук С.М., Грущенко Н.Л., Ніколайчук В.Я., Чухно М.В. Явище дегібридизації в купратах	319
Пурський О.І., Сисосєв В.М. Вплив обертального руху молекул на ізобарну теплопровідність твердого $\beta\text{-C}_6\text{H}_{12}$	323
Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Розрахунки форми смуги поглинання лазерного барвника	329
Стебленко Л.П., Науменко С.М., Кріт О.М., Коплак О.В., Кобзар Ю.Л., Курилюк А.М., Руденко О.В. Зміна мікротвердості кристалів кремнію, індукована слабоінтенсивним рентгенівським випромінюванням	335
Удалов Є.П. Принципи отримання та керування голографічними зображеннями за допомогою EOM	339

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 512.53

Олександр Г. Ганюшкін,
Тетяна В. Турка

Порядок напівгрупи відповідностей
скінченної групи

Доведено теорему про порядок напівгрупи відповідностей скінченної групи і обчислено порядки напівгруп відповідностей циклічних, дієдральних та елементарних абелевих груп.

Ключові слова: напівгрупа відповідностей, циклічна група, дієдральна група, елементарна абелева група.

ganyushk@univ.kiev.ua, tvturka@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н., професор В.В. Кириченко

1 Вступ

Нехай G — універсальна алгебра. Якщо підалгебру з $G \times G$ розглядати як бінарне відношення на G , то множина $S(G)$ всіх підалгебр з $G \times G$ є напівгрупою відносно деморганівського добутку відношень. Напівгрупа $S(G)$ називається напівгрупою відповідностей алгебри G .

Задачу вивчення напівгруп відповідностей свого часу ставив Курош (див. [1]). Однак зроблено в цьому напрямку небагато. Є кілька робіт (наприклад, Іскандер [2], [3]), де вивчалася будова $S(G)$ як решітки відносно природного часткового порядку. Але напівгрупи відповідностей конкретних універсальних алгебр майже не досліджувались.

У нашій роботі вивчається порядок напівгруп $S(G)$, коли G є скінченною групою. Зокрема, обчислено порядок $|S(G)|$ для трьох класичних серій скінченних груп: циклічних, дієдральних та елементарних абелевих.

При дослідженні підгруп декартового квадрату $G \times G$ корисною є наступна конструкція (див. [4]). Нехай $\varphi : G \rightarrow F$ та $\psi : H \rightarrow F$ — епіморфізми. Тоді множина

$$G \times_F H = \{(g, h) \in G \times H \mid \varphi(g) = \psi(h)\}$$

утворює підгрупу прямого добутку $G \times H$, яка називається розшированим (за допомогою групи F) добутком груп G і H . Нагадаємо, що підгрупа R прямого добутку $G \times H$ називається підпрямим добутком групи G і H , якщо приро-

Oleksandr G. Ganyushkin,
Tetyana V. Turka

The order of semigroups of
correspondence of finite group

The theorem has been proved about the order of semigroups of correspondence of finite group and the orders of semigroups of correspondence cyclic, dihedral and elementary abelian groups.

Key Words: the semigroup of correspondence, cyclic group, dihedral group, elementary abelian group.

дна проекція R на кожен із множників G і H збігається з самим множником.

Теорема 1. (Кляйн-Фрікке, [5]).

Підгрупа $R \leq G \times H$ буде підпрямим добутком груп G і H тоді і тільки тоді, коли R буде розшированим добутком G і H за допомогою деякої групи F .

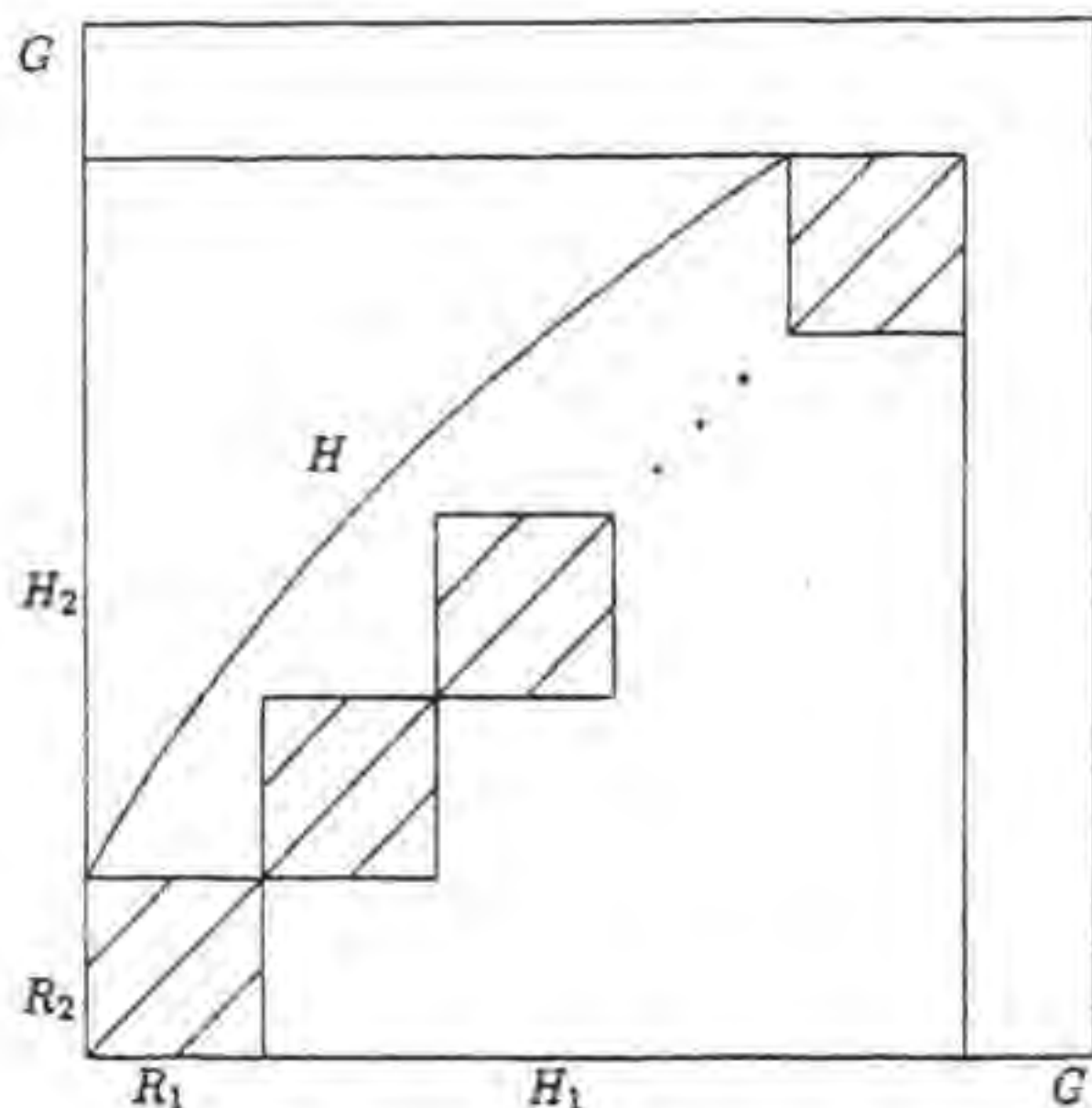
Із теореми Кляйн-Фрікке випливає, що кожна підгрупа H групи $G \times G$ визначається наступними параметрами:

лівою $H_1 = \{g \in G \mid \text{існує такий } x \in G, \text{ що } (g, x) \in H\}$ і правою $H_2 = \{g \in G \mid \text{існує такий } y \in G, \text{ що } (y, g) \in H\}$ проекціями H на множники добутку $G \times G$,

підгрупами $R_1 = H \cap G \times E$ і $R_2 = H \cap E \times G$, які будемо називати лівим і правим ядром підгрупи H .

Очевидно, що R_1 і R_2 природно ототожнюються з відповідними підгрупами лівого і правого множників квадрату $G \times G$.

За теоремою Кляйн-Фрікке R_i має бути нормальною підгрупою в H_i ($i = 1, 2$), причому факторгрупи H_1/R_1 і H_2/R_2 — ізоморфні. Крім того, підгрупа $H \leq G \times G$ визначає деякий ізоморфізм $\varphi : H_1/R_1 \rightarrow H_2/R_2$. Це зручно проілюструвати наступним рисунком:



Таким чином, існує взаємно однозначна відповідність між підгрупами з $G \times G$ (тобто елементами напівгрупи $S(G)$) і п'ятірками $(R_1, H_1, R_2, H_2, \varphi)$, де $R_1 \triangleleft H_1 < G$, $R_2 \triangleleft H_2 < G$ і $\varphi: H_1/R_1 \rightarrow H_2/R_2$ — ізоморфізм.

Далі ми будемо ототожнювати підгрупу $H \leq G \times G$ з відповідною п'ятіркою $(R_1, H_1, R_2, H_2, \varphi)$.

2 Теорема про порядок напівгрупи $S(G)$

Очевидно, що напівгрупа $S(G)$ буде скінченною тоді і тільки тоді коли скінченною буде група G . Далі розглядаємо лише випадок, коли G — скінченна.

Виберемо системи представників $a_1, \dots, a_k$ і $b_1, \dots, b_k$ груп H_1 і H_2 за підгрупами R_1 і R_2 відповідно. Тоді H за теоремою Кляйн-Фрікке можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} H &= a_1 R_1 \times b_1 R_2 + a_2 R_1 \times b_2 R_2 + \dots \\ &\dots + a_k R_1 \times b_k R_2 = \\ &= \sum_{i=1}^k a_i R_1 \times b_i R_2. \end{aligned}$$

Додавки $a_i R_1 \times b_i R_2$ ($i = 1, \dots, k$) називатимемо блоками напівгрупи H .

Нехай $H = (R_1, H_1, R_2, H_2, \varphi)$ — підгрупа із $G \times G$. Із означення деморганівського добутку одразу випливає

Твердження 1. Нехай

$$H = \sum_{i=1}^k a_i R_1 \times b_i R_2 \quad \text{і} \quad H' = \sum_{i=1}^{k'} a'_i R'_1 \times b'_i R'_2.$$

Тоді

a)

$$H \circ H' =$$

$$= \bigcup_{i=1}^k \bigcup_{j=1}^{k'} (a_i R_1 \times b_i R_2) \circ (a'_j R'_1 \times b'_j R'_2);$$

b)

$$\begin{aligned} &(a R_1 \times b R_2) \circ (a' R'_1 \times b' R'_2) = \\ &= \begin{cases} \emptyset, & \text{якщо } b R_2 \cap a' R'_1 = \emptyset; \\ a R_1 \times b' R'_2, & \text{в протилежному разі.} \end{cases} \end{aligned}$$

Якщо $H, N \leq G : N \triangleleft H$, то факторгрупа H/N називається фактором групи G . Виберемо з кожного класу ізоморфних факторів групи G по представнику і позначимо через $\mathfrak{F}(G)$ множину цих представників. Для кожного $F \in \mathfrak{F}$ через K_F позначимо потужність відповідного класу ізоморфних факторів, тобто

$$K_F = |\{(N, H) | N \triangleleft H \text{ і } H/N \simeq F\}|.$$

Теорема 2. Для будь-якої скінченної групи G порядок напівгрупи відвідностей $S(G)$ дорівнює

$$|S(G)| = \sum_{F \in \mathfrak{F}(G)} K_F^2 \cdot |\text{Aut } F|.$$

Доведення. Для кожного елемента $H = (R_1, H_1, R_2, H_2, \varphi) \in S(G)$ існує такий фактор $F \in \mathfrak{F}(G)$, що

$$H_1/R_1 \simeq H_2/R_2 \simeq F \quad (1)$$

Нехай тепер фактор $F \in \mathfrak{F}(G)$ — фіксований. Паря (R_1, H_1) і (R_2, H_2) , для яких виконується (1), можна вибирати K_F способами. Нарешті, якщо зафіксувати деякий ізоморфізм $\varphi_0: H_1/R_1 \rightarrow H_2/R_2$, то кожен ізоморфізм $\varphi: H_1/R_1 \rightarrow H_2/R_2$ розкладається в добуток $\varphi = \varphi_0 \psi$, де $\psi \in \text{Aut}(H_2/R_2)$. Тому компоненти φ в п'ятірці $(R_1, H_1, R_2, H_2, \varphi)$ з умовою (1) можна вибрати $|\text{Aut}(H_2/R_2)| = |\text{Aut } F|$ способами.

□

3 Застосування.

а) Порядок напівгрупи відповідностей $S(C_n)$ циклічної групи C_n .

Нехай C_n — циклічна група порядку n . Для кожного дільника d числа n містить єдину підгрупу C_d порядку d , причому $C_n/C_d \simeq C_{n/d}$. Зокрема $\mathcal{F}(C_n)$ можна ототожнити з множиною $\{C_d \mid d \mid n\}$.

Теорема 3. $|S(C_n)| = \sum_{d_1, d_2 \mid n} \text{НСД}(d_1, d_2)$.

Доведення. За теоремою 2

$$S(C_n) = \sum_{d \mid n} K_{C_d}^2 \cdot |\text{Aut } F|$$

Число K_{C_d} дорівнює кількості таких пар (U, V) , що $V = dU$ і $V \mid n$. Ці умови рівносильні тому, що $n \mid \frac{n}{d}$. Тому K_{C_d} дорівнює кількості $\tau\left(\frac{n}{d}\right)$ дільників числа $\frac{n}{d}$. Крім того, $|\text{Aut}(C_d)| = \varphi(d)$. Отже,

$$\begin{aligned} |S(C_n)| &= \sum_{d \mid n} \tau\left(\frac{n}{d}\right)^2 \cdot \varphi(d) = \\ &= \sum_{d \mid n} \left(\sum_{d' \mid \frac{n}{d}} \left(\sum_{d'' \mid \frac{n}{d}} \varphi(d) \right) \right) = \\ &= \sum_{d' \mid \frac{n}{2}} \left(\sum_{d'' \mid \frac{n}{2}} \left(\sum_{d \mid \text{НСД}\left(\frac{n}{d'}, \frac{n}{d''}\right)} \varphi(d) \right) \right) = \\ &= \sum_{d' \mid \frac{n}{2}, d'' \mid \frac{n}{2}} \text{НСД}\left(\frac{n}{d'}, \frac{n}{d''}\right) \end{aligned}$$

(ми скористались тим, що $\sum_{r \mid m} \varphi(r) = m$). Перепозначивши $d_1 = \frac{n}{d'}$, $d_2 = \frac{n}{d''}$, одержали твердження теореми. $\square$

Наслідок 1. Якщо n і m — взаємно прості, то

$$|S(C_{nm})| = |S(C_n)| \cdot |S(C_m)|.$$

Доведення. Якщо n і m — взаємно прості, то $d \mid nm$ тоді і тільки тоді, коли $d = d' \circ d''$, де $d' \mid n$, $d'' \mid m$. Тому

$$|S(C_{nm})| = \sum_{d_1, d_2 \mid nm} \text{НСД}(d_1, d_2) =$$

$$= \sum_{\substack{d'_1, d'_2 \mid n, \\ d''_1, d''_2 \mid m}} \text{НСД}(d'_1 \cdot d''_1, d'_2 \cdot d''_2) =$$

$$= \sum_{\substack{d'_1, d'_2 \mid n, \\ d''_1, d''_2 \mid m}} \text{НСД}(d'_1, d'_2) \cdot \text{НСД}(d''_1, d''_2) =$$

$$\begin{aligned} &= \left(\sum_{d'_1, d'_2 \mid n} \text{НСД}(d'_1, d'_2) \right) \cdot \left(\sum_{d''_1, d''_2 \mid m} \text{НСД}(d''_1, d''_2) \right) = \\ &= |S(C_n)| \cdot |S(C_m)|. \end{aligned}$$

Лема 1. Якщо p — просте число, то $\square$

$$|S(C_{p^k})| = \frac{p^{k+2} + p^{k+1} - (2k+3)(p+2k+1)}{(p-1)^2}.$$

Доведення. Якщо $d_1, d_2 \mid p^k$ і $(d_1, d_2) = p^i$, то пара може бути лише однією з наступних:

$$(p^k, p^i), (p^{k-1}, p^i), \dots, (p^{i+1}, p^i), (p^i, p^i), (p^i, p^{i+1}), \dots, (p^i, p^k).$$

Отже, таких є рівно $2(k-i)+1$. Тому

$$\begin{aligned} |S(C_{p^k})| &= \sum_{d_1, d_2 \mid p^k} \text{НСД}(d_1, d_2) = \\ &= (2k+1) \cdot 1 + (2k-1) \cdot p + \dots \\ &\quad \dots + 3 \cdot p^{k-1} + 1 \cdot p^k = \\ &= (1+p+\dots+p^k) + 2(1+p+\dots+p^{k-1}) + \\ &\quad + 2(1+p+\dots+p^{k-2}) + \dots + 2(1+p) + 2 = \\ &= \frac{p^{k+1}}{p-1} + 2 \frac{p^k-1}{p-1} + 2 \frac{p^{k-1}-1}{p-1} + \dots \\ &\quad \dots + 2 \frac{p^2-1}{p-1} + 2 \frac{p-1}{p-1} = \\ &= \frac{2}{p-1} (p^{k+1} + p^k + \dots + 1) - \\ &\quad - \frac{2(k+1)}{p-1} - \frac{p^{k+1}-1}{p-1} = \\ &= \frac{p^{k+2} + p^{k+1} - (2k+3)(p+2k+1)}{(p-1)^2}. \end{aligned}$$

Наслідок 2. Якщо $n = p_1^{k_1} \dots p_m^{k_m}$ — канонічний розклад числа n , то

$$\begin{aligned} |S(C_n)| &= \\ &= \frac{p_1^{k_1+2} + p_1^{k_1+1} - (2k_1+3)(p_1+2k_1+1)}{(p_1-1)^2} \dots \\ &\quad \dots \frac{p_m^{k_m+2} + p_m^{k_m+1} - (2k_m+3)(p_m+2k_m+1)}{(p_m-1)^2} \end{aligned}$$

Доведення. Безпосередньо випливає з наслідку 1 і лемми 1. $\square$

Для малих n отримуємо:

n	$ S(C_n) $	n	$ S(C_n) $	n	$ S(C_n) $
2	5	5	8	8	37
3	6	6	30	9	23
4	15	7	10	10	40

б) Порядок напівгрупи відповідностей $S(D_n)$ дієдральної групи D_n .

Теорема 4. Для дієдральної групи D_n порядок напівгрупи відповідностей $S(D_n)$ дорівнює:

а) якщо $n = 2k + 1$, то

$$|S(D_{2k+1})| = \sum_{d|n} \varphi\left(\frac{n}{d'}\right) \left(\frac{n\sigma^2(d')}{d'} + \tau^2(d') \right) + \sigma(n)(\sigma(n) + 2\tau(n))$$

б) якщо $n = 2k$, то

$$|S(D_{2k})| = \sum_{d|2k, d>2} \varphi(d) \left(d \cdot \sigma^2\left(\frac{2k}{d}\right) + \tau^2\left(\frac{2k}{d}\right) \right) + 6\sigma^2(k) + (\sigma(2k) + \tau(2k))^2 + (\sigma(2k) + 2\sigma(k) + \tau(k))^2$$

Доведення. Кожна підгрупа H групи D_n ізоморфна або групі D_d (якщо H містить симетрію), або групі C_d (якщо H містить лише повороти), причому $d | n$. Якщо $n = dl$, то D_n містить єдину підгрупу, ізоморфну C_d , і l підгруп, ізоморфних D_d . Зауважимо також, що $|\text{Aut } D_2| = 6$ і $|\text{Aut } D_n| = \varphi(n) \cdot n$ при $n \neq 2$.

а) Нехай n -непарне. У цьому випадку нормальними підгрупами в D_n будуть сама D_n і всі підгрупи групи поворотів C_n . Крім того, для кожної $C_d \leq C_n$ $D_n/C_d \cong D_{n/d}$. Тому фактори групи D_n будуть ізоморфні або D_d (причому D_1 , природно ототожнюється з C_2), або C_d , де $d | n$.

Щоб застосувати теорему 2, треба для кожного фактора F знайти число K_F .

Фактор D_d можна отримати, якщо візьмемо в D_n підгрупу ізоморфну D_{md} , де $m | \frac{n}{d}$ (для кожного такого m це можна зробити $\frac{n}{md}$ способами), а в D_{md} — нормальну підгрупу C_m (вона там єдина). Тому $K_{D_1} = \sum_{m|\frac{n}{2}} = \sigma\left(\frac{n}{2}\right)$ фактор C_d

($d > 1$) можна отримати тільки за рахунок підгруп із C_n . Тому, як і в попередньому пункті, $K_{C_d} = \tau\left(\frac{n}{d}\right)$.

Нарешті, K_E збігається з кількістю підгруп групи D_n . Тому

$$K_E = \sum_{d|n} \left(\frac{n}{d} + 1 \right) = \sigma(n) + \tau(n).$$

Із теореми 2 тепер випливає, що

$$|S(D_n)| = \sum_{d|n} \left(\sigma\left(\frac{n}{d}\right) \right)^2 \cdot d \cdot \varphi(d) + \sum_{d|n, d>1} \tau^2\left(\frac{n}{d}\right) \varphi(d) + (\sigma(n) + \tau(n))^2.$$

Перейшовши до доповнювального дільника $d' = \frac{n}{d}$, останню суму можна переписати у вигляді

$$|S(D_n)| = \sum_{d'|n} \varphi\left(\frac{n}{d'}\right) \left(\frac{n\sigma^2(d')}{d'} + \tau^2(d') \right) + \sigma(n)(\sigma(n) + 2\tau(n)),$$

що завершує доведення пункту а).

б) Якщо $n = 2k$, то в D_n додатково з'являється 2 нормальні підгрупи індекса 2, кожна з яких ізоморфна D_k . Оскільки, $2 | n$, то вигляд факторів у цьому випадку не відрізняється від попереднього — це знову D_d і C_d , де $d | n$. Крім того, повністю аналогічно попередньому рахуються числа $K_{D_d} = \sigma\left(\frac{n}{d}\right)$ ($d | n, d \neq 1$),

$K_{C_d} = \tau\left(\frac{n}{d}\right)$ ($d | n, d > 2$) і $K_E = \sigma(n) + \tau(n)$. Окремого підрахунку вимагає лише число K_{C_2} (яке збігається з K_{D_1} , бо $C_2 \cong D_1$).

Фактор C_2 можна отримати, якщо беремо в D_n підгрупу, ізоморфну D_d , $d | n$ (для кожного такого d це можна зробити $\frac{n}{d}$ способами), а в D_d — підгрупу C_d ; або якщо беремо в D_n підгрупу, ізоморфну D_{2m} , де $m | k$ (це можна зробити $\frac{k}{m}$ способами), а в D_{2m} — підгрупу, ізоморфну D_m (яких там 2); або вибравши в C_n пару підгруп вигляду C_{2m} і C_m . Тому

$$K_{C_2} = \sum_{d|2k} \frac{2k}{d} + \sum_{m|k} \frac{k}{m} \cdot 2 + \tau(k) = \sigma(2k) + 2\sigma(k) + \tau(k).$$

Із теореми 2 тепер одержуємо:

$$\begin{aligned} |S(D_{2k})| &= \sum_{d|2k, d>2} \sigma^2\left(\frac{2k}{d}\right) \cdot d \cdot \varphi(d) + 6\sigma^2(k) + \\ &+ \sum_{d|2k, d>2} \tau^2\left(\frac{2k}{d}\right) \varphi(d) + (\sigma(2k) + \tau(2k))^2 + \\ &+ (\sigma(2k) + 2\sigma(k) + \tau(k))^2 = \\ &= \sum_{d|2k, d>2} \varphi(d) \left(d \cdot \sigma^2\left(\frac{2k}{d}\right) + \tau^2\left(\frac{2k}{d}\right) \right) + \\ &+ 6\sigma^2(k) + (\sigma(2k) + \tau(2k))^2 + \\ &+ (\sigma(2k) + 2\sigma(k) + \tau(k))^2 \end{aligned}$$

Для малих n отримуємо:

n	$ S(C_n) $	n	$ S(C_n) $	n	$ S(C_n) $
2	67	5	124	8	1295
3	60	6	912	9	589
4	389	7	212	10	1964

с) Порядок напівгрупи відповідностей елементарної абелевої групи.

Теорема 5. Нехай p – просте число. Тоді

$$|S(Z_p^n)| = \sum_{k=0}^n \frac{p^{\frac{k(k-1)}{2}}}{\prod_{i=1}^k (p^i - 1)} \left(\sum_{m=k}^n a_k \right)^2,$$

де

$$a_k = \frac{\prod_{i=n-m+1}^n (p^i - 1)}{\prod_{i=1}^{m-k} (p^i - 1)}.$$

Доведення. Як відомо, кожна підгрупа групи Z_p^n ізоморфна Z_p^k для деякого $k \leq n$, причому кількість $C_{n,m}$ підгруп ізоморфних Z_p^k , дорівнює

$$C_{n,m} = \frac{\prod_{i=0}^{k-1} (p^n - p^i)}{\prod_{i=0}^{k-1} (p^k - p^i)} \quad (2)$$

Крім того, для довільних k і m , $k \geq m$, маємо $Z_p^k / Z_p^m \simeq Z_p^{k-m}$. Тому фактори групи Z_p^n вичерпуються групами $E, Z_p, Z_p^2, \dots, Z_p^n$. Оскільки, $\text{Aut } Z_p^k \simeq GL_k(Z_p)$, то

$$|\text{Aut } Z_p^k| = \prod_{i=0}^{k-1} (p^k - p^i). \quad (3)$$

Легко бачити, що

$$K_{Z_p^k} = \sum_{m=k}^n C_{n,m} \cdot C_{m,m-k}.$$

Тому, за теоремою 2,

$$|S(Z_p^n)| = \sum_{k=0}^n \left(\sum_{m=k}^n C_{n,m} \cdot C_{m,m-k} \right)^2 \cdot |\text{Aut } Z_p^k|.$$

Підставляючи замість $C_{n,m}$ та $|\text{Aut } Z_p^k|$ їх значення із формул (2) та (3), після очевидних перетворень одержуємо твердження теореми

$$|S(Z_p^n)| = \sum_{k=0}^n \frac{p^{\frac{k(k-1)}{2}}}{\prod_{i=1}^k (p^i - 1)} \left(\sum_{m=k}^n a_k \right)^2,$$

де

$$a_k = \frac{\prod_{i=n-m+1}^n (p^i - 1)}{\prod_{i=1}^{m-k} (p^i - 1)}.$$

Зокрема, для малих значень параметрів одержуємо такі числа:

$$|S(Z_3^3)| = 56632, \quad |S(Z_2^3)| = 2825,$$

$$|S(Z_3^2)| = 340, \quad |S(Z_2^2)| = 67.$$

Література

1. Курош А.Г. Общая алгебра (лекции 1969-70 учебного года). – М.: Наука, 1974-160с.
2. Искандер А.А. Структура соответствий универсальной алгебры. Изв. АН СССР, серия матем, 29 (1965), 1357-1372.
3. Искандер А.А. Частичные универсальные алгебры с заданными структурами подалгебр и соответствий, Матем. сб. 70 (1960), 438-456
4. Кох Х. Теория Галуа p -расширений. – Изд-во "Мир", Москва, 1973.
5. Klein F., Friche R. Vorlesungen über die Theorie der elliptischen Modulunktionen. Bd.1, Leipzig, 1890. s. 402-406

Надійшла до редколегії 15.06.2009

УДК 512.642, 512.647, 519.17

Н.С. Головащук, старший наук. співробітник,
Г.В. Крюкова, аспірант.

N.S. Golovaschuk, Senior Researcher
G.V. Kriukova, PhD student.

Про невід'ємні цілі квадратичні форми¹

On non-negative integer quadratic forms

У даній роботі розглядаються квадратичні форми, які використовуються у дослідженнях скінченновимірних алгебр та алгебр Лі. Доведено, що кожний клас $\mathbb{Z}$ -еквівалентності цілих квадратичних форм містить диз'юнктне об'єднання одиничних схем Динкіна з цілими множниками та форми, що відносяться до радикалу. Для критичної цілої квадратичної форми q , існує $\mathbb{Z}$ -еквівалентна ціла схема Динкіна, котра однозначно визначається за q .

The use of quadratic forms as a tool for characterizing classes of finite dimensional algebras and Lie algebras is well known and widely accepted. We prove that each $\mathbb{Z}$ -equivalence class of integer quadratic forms contains a disjoint union of multiplied unit Dynkin diagrams and some form related to radical. For a critical integer quadratic form q , there is a $\mathbb{Z}$ -equivalent integer Dynkin diagram which is uniquely determined by q .

Ключові слова: ціла квадратична форма, схема Динкіна, критерій невід'ємності квадратичної форми.

Key Words: integer quadratic form, Dynkin diagram, non-negativity criterion for quadratic form.

E-mail: golova@univ.kiev.ua, galyna.kriukova@gmail.com

Статтю представив доктор фіз.-мат. наук, професор Квиріченко В.В.

1 Preliminary notions

Given an integral quadratic form $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$

$$q(x) = \sum_{i \in I_n} q_i x_i^2 + \sum_{i < j} q_{ij} x_i x_j,$$

$$I_n = \{1, \dots, n\}, q_i, q_{ij} \in \mathbb{Z}$$

denote by $(\cdot, \cdot) = (\cdot, \cdot)_q: \mathbb{Z}^n \times \mathbb{Z}^n \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{Z}$ the associated symmetrical bilinear form such that $(x, y)_q = \frac{1}{2}(q(x+y) - q(x) - q(y))$, $x, y \in \mathbb{Z}^n$. Let $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ denotes the canonical base of $\mathbb{Z}$ -lattice $\mathbb{Z}^n$. Integral form q is called *reduced* if there does not exist non-trivial integer common divider of the family of coefficients $\{q_i, q_{ij} \mid i, j \in I_n\}$, otherwise it is called *multiplied*. Further we set $q_{ii} = q_i$ and $q_{ji} = q_{ij}$ for $i < j$.

According to [4] the integral quadratic form $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$ is called *semi integer* if $q_{ij} \in q_i \mathbb{Z}$ for all $i, j \in I_n$, and it is called *integer* if in addition $q_i \neq 0$ for all $i \in I_n$. The integer form q is called *unit* if $q_i = 1$ for all $i \in I_n$. The form q is called *classic* if $(\alpha_i, \alpha_j)_q \leq 0$ for all $i, j \in I_n$, $i \neq j$.

Throughout the paper all forms considered are assumed to be semi integer.

The radical of q is $\text{rad } q = \{x \in \mathbb{Z}^n \mid (x, -)_q = 0\}$. Since $\text{rad } q$ is a pure subgroup of $\mathbb{Z}^n$, it is a direct summand of $\mathbb{Z}^n$. We define $\text{corank } q = \text{rank}(\text{rad } q)$. Observe that $\text{rad } q \subset q^{-1}(0)$. The form q is called *balanced* if $q^{-1}(0) \subset \text{rad } q$ (then $q^{-1}(0) = \text{rad } q$). The non-negative form q is balanced.

Let q be a semi integer form. The integer matrix $A_q = (A_{ij})_{i, j \in I_n}$ with $A_{ij} = \frac{2(\alpha_i, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)}$ if $q_j \neq 0$ and $A_{ij} = 0$ otherwise is called the *Cartan matrix* of q ; this matrix has $A_{ii} = 2q_i$ and $A_{ij} = \frac{q_{ij}}{q_j}$, $i \neq j$.

In this topic we will consider the non-negative forms.

For any $x \in \mathbb{Z}^n$ such that $q(x) \neq 0$ define the automorphism $s_x: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}^n$ by the formulae

$$\sigma_x(y) = y - 2 \frac{(x, y)}{(x, x)} x, \quad y \in \mathbb{Z}^n.$$

¹Робота першого автора частково підтримана фондом DFSD, номер гранту Ф28/433-09.

Then $s_x^2 = \text{id}_{\mathbb{Z}^n}$, and for $x, y, z \in \mathbb{Z}^n$, $(x, x) \neq 0$ there hold

$$s_{-x}(y) = s_x(y), s_x(-y) = -y, s_x(x) = -x, \quad (1) \\ (s_x(y), s_x(z)) = (y, z).$$

The automorphism s_x is called a *reflection* relative to x .

Let $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ be the canonical base of $\mathbb{Z}^n$, and let $I_n^* = \{i \in I_n \mid (\alpha_i, \alpha_i) \neq 0\}$. Denote by Δ_q the set of $\mathbb{Z}^n$ defined by

- 1) $\alpha_i \in \Delta_q$ for all $i \in I_n^*$;
- 2) if $x \in \Delta_q$, $i \in I_n^*$, then $s_i(x) \in \Delta_q$.

Then Δ_q is called the set of roots of q . If the form q is integer then any root $\alpha \in \Delta_q$ belongs to integral lattice $\mathbb{Z}(R)$ with the base R . The vectors $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ themselves are called the *simple roots* of q , and R is called the *simple root base* of q . The automorphism group $W(q) = \langle s_i \mid i \in I_n^* \rangle$ is called *Weyl group* of the form q . If q is integer form, then $W(q)$ is a subgroup of the group of invertible integral matrices. Vector $x \in \mathbb{Z}^n$ is a root of q if $s(x) = \alpha_i$ for some $s \in W(q)$, $i \in I_n^*$. Note that in this case $q(x) = q(\alpha_i) = q_i$ is a norm of x . The root x is called *positive* (*negative*) if $x_i \geq 0$ ($x_i \leq 0$) for all $i \in I_n$. Any base $P = \{\beta_1, \dots, \beta_n\}$ of $\mathbb{Z}^n$ is called the *root base* of q if $P \subset \Delta_q \cup \text{rad } q$.

If R is any root base of $q : \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$ then denote by $\mathbb{Z}(R)$ the integer lattice with the base R , and by $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$ the form q considered with respect to the simple root base R . Let $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$, $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ be a semi integral form. Given any subset $J \subset I_n$ we denote $R_J = \{\alpha_j \mid j \in J\}$. Then R_J is a root base of rank $|J|$ and it generates a new restricted integer form $q_J : \mathbb{Z}(R_J) \rightarrow \mathbb{Z}$ such that $q_j = (\alpha_j, \alpha_j)$ for all $j \in J$. The form q_J is called the *full subform* of q to the subset J . The full subform q_J is called the *separated subform* if $(\alpha_i, \alpha_j) = 0$ for all $i \in I_n \setminus J$, $j \in J$. The form q is called *connected* if it has no non trivial separated subform. Any separated subform q_J is called *connected component* of q if q_J itself is a connected form. A form q is called a *disjoint sum* of the forms q' and q'' if they are the connected components of q .

A form $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$ in n variables is called a *direct sum* of the full subforms $q' = q|_{J'}$ and $q'' = q|_{J''}$ with $I_n = J' \sqcup J''$ if q' and q'' are the separated subform of q .

We consider the form $q : \mathbb{Z}^k \rightarrow \mathbb{Z}$ in k variables $q(x) = 0$ which is semi integer by definition.

We call it *trivial form* of rank k . Let's denote it by 0^k .

Lemma 1.1. Let $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$ be an integer non-negative reduced form. Then $q_i > 0$, $i \in I_n$, the smallest common multiple of q_i , $i \in I_n$ is equal 1, 2, 3, or 4, and for any $i, j \in I_n$, $i \neq j$

$$|A_{ij}A_{ji}| \leq 4 \quad (2)$$

and, moreover, one of the following cases occurs:

- 1) either $|A_{ij}| = 1$ or $|A_{ji}| = 1$;
- 2) $A_{ij} = A_{ji} = \varepsilon 2$, $\varepsilon = \pm 1$, $q_i = q_j$, and $\alpha_i - \varepsilon \alpha_j \in \text{rad } q$.

In the case the form q to be positive the condition $|A_{ij}A_{ji}| < 4$ holds for any $i, j \in I_n$ and only the first case can occur.

This result is well known and can be simply verified. For further, we are restricted ourself with the forms for which the assertion of Lemma 1.1 holds. With any such form in n variables one associates its *Coxeter graph* or *bigraph* B_q , which is labeled and partially directed. The vertices of B_q are the base elements $\alpha_1, \dots, \alpha_n$, and above each vertex one writes a norm of corresponding root. The different vertices α_i and α_j are joined

- 1) in the case $|A_{ji}| = 1$, by one edge of a label A_{ij} ; if $|A_{ij}| > 1$ then this edge is directed towards the root α_j (having the smallest norm);
- 2) in the case $|A_{ij}| = |A_{ji}| = 2$, by two undirected edges each of a label 1 if $A_{ij} = 2$ and of a label -1 if $A_{ij} = -2$.

The label 1 usually will be omitted. The directed edges $\alpha_i \xrightarrow[k]{\quad} \alpha_j$, $k = \pm 2, \pm 3$ sometimes are denoted by the following diagrams

$$\begin{array}{cccc} \circ \xrightarrow{\quad} \circ & \circ \xrightarrow{\quad} \circ & \circ \xrightarrow{\quad} \circ & \circ \xrightarrow{\quad} \circ \\ k=-2 & k=-3 & k=2 & k=3 \end{array}$$

Let $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$, $R' = \{\alpha'_i\}_{i \in I_n}$ be two root bases of q . The correspondence $\alpha_i \mapsto \alpha'_i$, $i \in I_n$ gives the linear transformation of lattices $L : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}(R')$, $\sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i \mapsto \sum_{i \in I_n} x'_i \alpha'_i$ such that $\sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i = \left(\sum_{i \in I_n} x'_i \alpha'_i \right)_R$. The linear transformation L is called *integer* if $\alpha'_i \in \mathbb{Z}(R)$

for all $i \in I_n$, and is called $\mathbb{Z}$ -invertible if both L and L^{-1} are integer.

Given any form $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$ and $\mathbb{Z}$ -invertible linear transformation $L : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}(R')$, we construct a new quadratic form $q^L : \mathbb{Z}(R') \rightarrow \mathbb{Z}$ together with its symmetric bilinear form by putting

$$q'_i = (\alpha'_i, \alpha'_i)_{q'} = (\alpha'_i, \alpha'_i)_q,$$

$$q'_{ij} = (\alpha'_i, \alpha'_j)_{q'} = (\alpha'_i, \alpha'_j)_q, \quad i, j \in I_n.$$

The integral forms $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$ and $q' : \mathbb{Z}(R') \rightarrow \mathbb{Z}$ are called $\mathbb{Z}$ -equivalent if there exists a $\mathbb{Z}$ -invertible linear transformation $L : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}(R')$ such that $q' = q^L$. Observe that for two $\mathbb{Z}$ -equivalent forms q, q' , q is non-negative (positive, balanced) if and only if q' is non-negative (positive, balanced), $L(\text{rad } q) = \text{rad } q'$.

Let $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ be a simple root basis of q . Construct a new root basis $\Upsilon_i(R) = R'$ of $\mathbb{Z}^n$ such that $\alpha'_i = -\alpha_i$, $\alpha'_j = \alpha_j$ otherwise. Then Υ_i is a linear transformation which is called a *sign exchange* for form q with respect to i , and the obtained form $\Upsilon_i(q)$ is integer as well as q . For any $x = \sum_{j \in I_n} x_j \alpha_j \in \mathbb{Z}(R)$ we obtain

$$\Upsilon_i(x) = \sum_{j \in I_n \setminus \{i\}} x_j \alpha_j + (-x_i) \alpha'_i \in \mathbb{Z}(R').$$

Given q let $k \mid q_i$, $i \in I_n$, $k \in \mathbb{Z}^+$. Construct a new base R' such that $\alpha'_i = \frac{1}{k} \alpha_i$ and $\alpha'_j = \alpha_j$, $j \neq i$. Set $(\alpha'_j, \alpha'_l)_{q'} = k(\alpha'_j, \alpha'_l)_q$. We have

$$q'_i = \frac{1}{k} q_i, \quad q'_j = k q_j, \quad q'_{ij} = q_{ij}, \quad q'_{jl} = k q_{jl}, \quad j, l \in I_n \setminus i.$$

We obtain the integer form q' . If it is not reduced then we divide all q_i, q_{ij} to k to obtain the reduced integer form $\Lambda^k(q)$.

Two forms q, q' are called *similar* if q' is obtained from q by some sequence of transformations of a type Υ_i or Λ^k .

The form $q : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$ is said to be *critical* if q is not positive but every restricted form q_J for $J \subseteq I_n$ is positive.

2 Reflection transformation for base

Let q be an integer form, $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ be a simple root basis of q . Construct a new base $R' = \{\alpha'_i\}_{i \in I_n}$ of $\mathbb{Z}^n$ in the following way. For any $r \in I_n$ set

$$\alpha'_i = s_r(\alpha_i) = s_{\alpha_r}(\alpha_i), \quad i \in I_n.$$

In particular, $\alpha'_r = -\alpha_r$.

For any $x = \sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i \in \mathbb{Z}(R)$ set $s_r(x) = \sum_{i \in I_n} x'_i \alpha'_i \in \mathbb{Z}(R')$ with $x'_i = x_i$, $i \neq r$ and

$$x'_r = -x_r - 2 \sum_{i \in I_n \setminus \{r\}} A_{ir} x_i.$$

Set $x' = \sum_{i \in I_n} x'_i \alpha'_i \in \mathbb{Z}(R')$. The simultaneous transformations of base S_r and of lattices $S_r : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}(R')$ such that

$$\begin{aligned} S_r : R &\implies R' \\ S_r : x = \sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k &\implies x' = \sum_{k \in I_n} x'_k \alpha'_k \end{aligned}$$

are called the *reflection transformation* of q in $r \in I_n$. Denote $q' = q_{R'}$ the obtained form.

Lemma 2.1. Let $S_r : R \implies R'$ be a reflection. For any $i, j \in I_n$, $(\alpha'_i, \alpha'_j)_{q'} = (\alpha_i, \alpha_j)_q$, the base $R' = S_r(R)$ defines the equal forms $q' = q$, and the following equality holds

$$\sum_{k \in I_n} x'_k \alpha'_k = \sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k. \quad (3)$$

Proof. We have $(\alpha'_i, \alpha'_j)_{q'} = (s_r(\alpha_i), s_r(\alpha_j)) \stackrel{(1)}{=} (\alpha_i, \alpha_j)$. Then

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I_n} x'_i \alpha'_i &= \sum_{i \in I_n \setminus \{r\}} x_i \left(\underbrace{\alpha_i - A_{ir} \alpha_r}_{\alpha'_i} \right) + \\ &+ \left(\underbrace{-x_r - \sum_{i \in I_n \setminus \{r\}} A_{ir} x_i}_{x'_r} \right) \left(\underbrace{-\alpha_r}_{\alpha'_r} \right) = \sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i. \end{aligned}$$

□

The map $\alpha_k \mapsto \alpha'_k = s_r(\alpha_k)$ is the isomorphism of lattices which keeps the bilinear form. In particular,

$$\sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k = s_{i_1} \dots s_{i_l}(\alpha_{i_0}) \iff$$

$$\sum_{k \in I_n} x_k \alpha'_k = s'_{i_1} \dots s'_{i_l}(\alpha'_{i_0})$$

where s'_i denoted the reflection with respect to lattice $\mathbb{Z}(R')$.

For $x \in \Delta_q$ set $h(x) = t$ where t is a minimal number such that $x = s_{i_1} \dots s_{i_t}(\alpha_{i_0})$, $i_0 \in I_n$. Then $h(\alpha_i) = 0$.

Lemma 2.2. For $x = \sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k$, $x' = \sum_{k \in I_n} x'_k \alpha'_k =$ **Lemma 3.1.** The following formulae holds:

$$s_{\alpha'_r} \left(\sum_{k \in I_n} x_k \alpha'_k \right).$$

Proof.

$$\begin{aligned} s_{\alpha'_r} \left(\sum_{k \in I_n} x_k \alpha'_k \right) &= \sum_{k \in I_n} x_k \alpha'_k - \sum_{k \in I_n} x_k \frac{2(\alpha'_k, \alpha'_r)}{(\alpha'_r, \alpha'_r)} \alpha'_r = \\ &= \sum_{k \in I_n \setminus \{r\}} x_k \alpha'_k - \left(-x_r - \sum_{k \in I_n \setminus \{r\}} x_k A_{kr} \right) \alpha'_r. \end{aligned}$$

Lemma 2.3. Any vector $x \in \mathbb{Z}(R)$ is a root of form q if and only if the vector $x' = S_r(x) \in \mathbb{Z}(R')$ is a root of form $q' = S_r(q)$, $r \in I_n$.

Proof. Use the induction by $h(x)$ for $x \in \Delta_q$.

If $h(x) = 0$ then $x = \alpha_k$, show that $S_r(x) \in \Delta_{q'}$. By definition, $S_r(\alpha_k) = s_{\alpha'_r}(\alpha'_k) \in \Delta_{q'}$.

Assume $h(x) > 0$. There exists $k \in I_n$ such that $x = s_k(y)$, $y \in \Delta_q$ and $h(y) = h(x) - 1$. We have $x = \sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i$, $y = \sum_{i \in I_n} y_i \alpha_i$. By induction assumption, $S_r(y) = s_{\alpha'_r} \left(\sum_{i \in I_n} y_i \alpha'_i \right) \in \Delta_{q'}$. Then

$$\begin{aligned} S_r(x) &= s_{\alpha'_r} \left(\sum_{i \in I_n} x_i \alpha'_i \right) = s_{\alpha'_r} s_{\alpha'_k} \left(\sum_{i \in I_n} y_i \alpha'_i \right) = \\ &= s_{\alpha'_r} s_{\alpha'_k} s_{\alpha'_r} s_{\alpha'_r} \left(\sum_{i \in I_n} y_i \alpha'_i \right) = s_{\alpha'_r} s_{\alpha'_k} s_{\alpha'_r} (S_r(y)) \end{aligned}$$

and hence $S_r(x) \in \Delta_{q'}$ and $h(S_r(x)) \leq h(x) + 2$. $\square$

By the construction,

$$x \in \Delta_q \iff s_r(x) \in \Delta_{S_r(q)}. \quad (4)$$

3 Reduction

Given a simple root basis $R = \{\alpha_k\}_{k \in I_n}$ of $\mathbb{Z}^n$ the quadratic form $q: \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$, and $i, j \in I_n$, construct the new root base $\bar{R} = \{\bar{\alpha}_k \mid k \in I_n\}$ of $\mathbb{Z}^n$ by the following way:

$$\bar{\alpha}_k = \alpha_k, k \neq j, \quad \bar{\alpha}_j = s_i(\alpha_j) = \alpha_j - A_{ji}\alpha_i. \quad (5)$$

Then $\frac{n(n+1)}{2}$ integers

$$\{(\bar{\alpha}_k, \bar{\alpha}_l) \mid k \leq l, k, l \in I_n\}$$

uniquely define the form q' .

For any vector $x = \sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i \in \mathbb{Z}(R)$ we can calculate the vector $\bar{x} = \sum_{i \in I_n} \bar{x}_i \bar{\alpha}_i \in \mathbb{Z}(\bar{R})$ by:

$$\bar{x}_k = x_k, k \neq i, \quad \bar{x}_i = x_i + A_{ji}x_j. \quad (6)$$

$$\sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k = \sum_{k \in I_n} \bar{x}_k \bar{\alpha}_k. \quad (7)$$

Proof. We have

$$\begin{aligned} \sum_{k \in I_n} \bar{x}_k \bar{\alpha}_k &= \sum_{k \in I_n \setminus \{i, j\}} x_k \alpha_k + \underbrace{(x_i + A_{ji}x_j)}_{\bar{x}_i} \alpha_i + \\ &+ x_j \underbrace{(\alpha_j - A_{ji}\alpha_i)}_{\bar{\alpha}_j} = \sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k \end{aligned}$$

$\square$

Note that $(\bar{\alpha}_k, \bar{\alpha}_k) = (\alpha_k, \alpha_k)$ for all $k \in I_n$. For $k \neq j$, $(\alpha_k, \alpha_k) \neq 0$ and

$$\bar{A}_{jk} = \frac{2(\bar{\alpha}_k, \bar{\alpha}_j)}{(\bar{\alpha}_k, \bar{\alpha}_k)} = A_{jk} - A_{ji}A_{ik} \in \mathbb{Z},$$

$$\bar{A}_{kj} = 2 \frac{(\bar{\alpha}_k, \bar{\alpha}_j)}{(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_j)} = A_{kj} - A_{ki}A_{ij} \in \mathbb{Z}.$$

We construct the new integer reduced quadratic form $\bar{q}$ such that

$$(\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_j)_{\bar{q}} = (\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_j)_q.$$

In other words, $\bar{R}$ is a simple root system for $\bar{q}$.

The correspondence $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_{\alpha_i, \alpha_j}$, $R, q, x \xrightarrow{\mathbf{R}_{ij}} \bar{R} = \mathbf{R}_{ij}(R)$, $\bar{q} = \mathbf{R}_{ij}(q)$, $\bar{x} = \mathbf{R}_{ij}(x)$ such that

$$\bar{R} = \{\bar{\alpha}_j = s_i(\alpha_j), \alpha_k, k \neq j\}$$

and

$$\mathbf{R}_{ij} \left(\sum_{k \in I_n} x_k \alpha_k \right) = \sum_{k \in I_n} \bar{x}_k \bar{\alpha}_k. \quad (8)$$

is called the *reduction* of the form q in the direction $i \rightarrow j$. Of course, $(x, x)_q = (\bar{x}, \bar{x})_{\bar{q}}$.

The properties of reduction $\mathbf{R}_{ij}(q)$.

Lemma 3.2. For any $i, j \in I_n$, $\mathbf{R}_{ij}\mathbf{R}_{ij}(q) = q$, $\mathbf{R}_{ij}\mathbf{R}_{ij}(R) = R$ and $\mathbf{R}_{ij}\mathbf{R}_{ij}(x) = x$.

Lemma 3.3. Let q be an integer quadratic form, $R = \{\alpha_k\}_{k \in I_n}$ be its simple root basis. Then for any $i, j, r \in I_n$, the following equality hold

$$\begin{aligned} \bar{S}_{\alpha_r} R_{\alpha_i, \alpha_j} &= R'_{\alpha'_i, \alpha'_j} S_{\alpha_r}, \quad r \neq j, \\ \bar{S}_{-s_j(\alpha_i)} \bar{S}_{\alpha_j} \bar{S}_{\alpha_i} R_{\alpha_i, \alpha_j} &= R'_{\alpha'_i, \alpha'_j} S_{\alpha_j}. \end{aligned}$$

Proof. To prove following bases transformations are used

$$\begin{aligned} R &\xrightarrow{S_{\alpha_r}} \{\alpha'_k = s_r(\alpha_k), k \in I_n\} \xrightarrow{R_{\alpha'_i, \alpha'_j}} \\ &\{\hat{\alpha}_j = s_{\alpha'_i}(\alpha'_j), \alpha'_k, k \neq j\} = \hat{R}. \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} R &\xrightarrow{R_{\alpha_i, \alpha_j}} \{\bar{\alpha}_j = s_i(\alpha_j), \bar{\alpha}_k = \alpha_k, k \neq j\} \xrightarrow{S_{\bar{\alpha}_r}} \\ &\{\bar{\alpha}'_k = s_r(\bar{\alpha}_k), k \in I_n\} = R'. \end{aligned} \quad (10)$$

Lemma 3.4. Any vector $x \in Z(R)$ is a root of form q if and only if the vector $\bar{x} = R_{ij}(x) \in Z(\bar{q})$ is a root of form $\bar{q} = R_{ij}(q)$.

Proof. For any $x \in \Delta_q$, show that $\bar{x} \in \Delta_{\bar{q}}$.

Given $x = \alpha_k, k \in I_n \setminus \{j\}$ we have $R_{ij}(\alpha_k) = \bar{\alpha}_k = \alpha_k$ is a simple root of $\bar{q}$.

Consider $x = \alpha_j$. Then $\bar{\alpha}_i = R_{ij}(\alpha_i) = \alpha_i$, $\bar{\alpha}_j = R_{ij}(\alpha_j) = s_i(\alpha_j) = \alpha_j - A_{ji}\alpha_i$ are the simple roots of $\bar{q}$. Observe that

$$\begin{aligned} R_{ij}(\alpha_j) &\stackrel{(8)}{=} \bar{\alpha}_j + 2 \frac{(\alpha_i, \alpha_j)_q}{(\alpha_i, \alpha_i)_q} \alpha_i = \\ &= \bar{\alpha}_j + 2 \frac{(\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_j)_q}{(\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_i)_q} \bar{\alpha}_i = s_{\bar{\alpha}_i}(\bar{\alpha}_j). \end{aligned}$$

Therefore, $R_{ij}(\bar{\alpha}_j) \in \Delta_{\bar{q}}$ is a root of the reduced form $\bar{q} = R_{ij}(q)$ of a height $h(\bar{\alpha}_j) = 1$.

Let $x \in Z(R)$ be a root of form q with $h(x) > 1$. Assume that $\bar{y} \in \Delta_{\bar{q}}$ for any $y \in \Delta_q$ with $h(y) < r$ and prove that $\bar{x} = R_{ij}(x)$ is a root of $\bar{q}$. There are $y \in \Delta_q$ and $r \in I_n$ such that $x = s_r(y)$ and $h(y) < h(x)$. Put $q' = S_{\alpha_r}(q)$. Follow (4), $s_r(x) = y$ is a root of q' . Then we apply Lemma 3.3 to finish the proof.

Lemma 3.5. Let $q : Z(R) \rightarrow Z, z \in Z(R)$, and $\bar{q} = R_{ij}(q), \bar{z} = R_{ij}(z) \in Z(\bar{R})$ for some $i, j \in I_n$. Then $x \in \text{rad } q$ if and only if $\bar{x} \in \text{rad } \bar{q}$.

Proof. Of course, $\bar{q}(R_{ij}(z)) = 0$ whenever $q(z) = 0$. Assume $z = \sum_{k \in I_n} z_k \alpha_k \in \text{rad } q$ and $\bar{z} = \sum_{k \in I_n} \bar{z}_k \bar{\alpha}_k$. Calculate

$$(\bar{\alpha}_r, \bar{z})_{\bar{q}} = (\bar{\alpha}_r, \sum_{k \in I_n} \bar{z}_k \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}} \stackrel{(8)}{=}$$

$$= (\alpha_r, \sum_{k \in I_n} z_k \alpha_k)_q = 0, k \neq j;$$

$$(\bar{\alpha}_j, \bar{z})_{\bar{q}} = (\alpha_j - A_{ji}\alpha_i, z)_q = 0.$$

□

We denote $R_{ij} = R_{ij}^+$ if $(\alpha_i, \alpha_j) > 0$ and $R_{ij} = R_{ij}^-$ if $(\alpha_i, \alpha_j) < 0$. In the case $(\alpha_i, \alpha_j) = 0$ the transformation R_{ij} is identity. It follows from (6) that $R_{ij}^+(x) > 0$ whenever $x > 0$. Moreover, if $x \in Z(R)$ is positive and sincere then $R_{ij}^+(x)$ is positive and sincere as well.

4 Properties of reflections

Let q be an integer form. For any $x \in Z(R)$, denote $\delta_i^x = 2(x, \alpha_i)$. We have

$$2q(x) = 2(x, x) = \sum_{i \in I_n} \delta_i^x x_i. \quad (11)$$

For any $x \in Z^n, i \in I_n$ there is $s_i(x)_i = \bar{x}_i = x_i - \frac{\delta_i^x}{(\alpha_i, \alpha_i)}$ and $|\delta_i^x| = |\bar{x}_i - x_i| q_i$. Given $y \in Z^n$, we obtain

$$2(x, y) = \sum_{i \in I_n} \delta_i^x y_i. \quad (12)$$

Therefore, for any $z \in Z(R), z \in \text{rad } q$ if and only if $\delta_i^z = 0$ for all $i \in I_n$.

Lemma 4.1. If q is positive (non-negative) integer form and $x \in Z(R)$, then

$$|\delta_i^x| < 2q_i q(x) \quad (|\delta_i^x| \leq 2q_i q(x)) \quad \forall i \in I_n.$$

Proof. Denote $\bar{x} = s_i(x)$. Assume $x_i < \bar{x}_i$. Then $|\delta_i^x| = q_i(\bar{x}_i - x_i)$.

For any $c \in Z, s_i(x + c\alpha_i) = \bar{x} - c\alpha_i$ and $q(x + c\alpha_i) = q(\bar{x} - c\alpha_i)$. For any c such that $x_i < x_i + c < \bar{x}_i$, it holds $q(x + c\alpha_i) < q(x)$. If $c = \lceil \frac{\bar{x}_i - x_i}{2} \rceil > q(x)$ then we have

$$q(x) > q(x + \alpha_i) > q(x + 2\alpha_i) > \dots > q(x + c\alpha_i)$$

and then $q(x + c\alpha_i) \leq q(x) - c < 0$ where $x + c\alpha_i \in \mathbb{Z}(R)$, $q(x + c\alpha_i) \in \mathbb{Z}$. It contradicts the positivity (non-negativity) of q . Hence $|\bar{x}_i - x_i| \leq 2q(x)$ and $|\delta_i^x| \leq 2q_i q(x)$ for non-negative form q , and the inequality is strong for the positive form. $\square$

5 Critical forms

Proposition 5.1. 1) Let q be connected positive quadratic form. Then there exists a finite sequence R of reductions of a type R_{ij}^+ such that $R(q)$ is a connected classical positive form of Dynkin type.

2) Let q be critical non-negative quadratic form with the positive radical vector. Then there exists a finite sequence R of reductions of a type R_{ij}^+ such that $R(q)$ is a classical integral non-negative critical form.

Proof. Let q be critical non-negative quadratic form and $z = \sum_{i \in I_n} z_i \alpha_i \in \text{rad } q$ be the radical vector with $z_i > 0$ for all $i \in I_n$.

If $(\alpha_i, \alpha_j) \geq 0$ then $A_{ij} \geq 0$ and $R_{ij}^+(\alpha_j) = \alpha_j - A_{ji}\alpha_i$. For any $x = \sum_{i \in I_n} x_i \alpha_i \in \mathbb{Z}(R)$ denote $\bar{x} = R_{ij}^+(x) \in \mathbb{Z}(\bar{R})$. Due (6) we have

$$\bar{x}_k = x_k, \quad k \neq i, \quad \bar{x}_i = x_i + A_{ji}x_j > x_i.$$

Therefore the form $R_{ij}^+(q)$ is critical non-negative quadratic form as well. Denote by Δ_q^+ (Δ_q^-) the set of all positive roots of q ($\bar{q}$). It follows that $R_{ij}^+ : \Delta_q^+ \rightarrow \Delta_{\bar{q}}^+$, in particular, $|\Delta_q^+| \leq |\Delta_{\bar{q}}^+|$. Show that this inequality is strong. Indeed, consider a root $s_i(\alpha_j) = -A_{ji}\alpha_i + \alpha_j \in \Delta_q \setminus \Delta_q^+$. We have $R_{ij}^+(-A_{ji}\alpha_i + \alpha_j) = \alpha_j \in \Delta_{\bar{q}}^+$.

If form q is positive, then $|\delta_i^x| < 2q_i q(x)$ for all $i \in I_n$ by Lemma 4.1. If Δ_q^+ is infinity set then there are two different roots $x, y \in \Delta_q^+$ with $q(x) = q(y)$ such that $\delta_i^x \neq \delta_i^y$ for all $i \in I_n$. Then $q(x - y) = 0$ since $\delta_i^{x-y} = \delta_i^x - \delta_i^y = 0$, $i \in I_n$. Hence $|\Delta_q^+| < \infty$, and then the assertion (1) follows from above.

Consider the case of critical form. Let us fix some $i \in I_n$ and denote $J = I_n \setminus \{i\}$. The full subform q_J is positive by assumption. So we can reduce the form q by a sequence of reductions of a type R_{kl}^+ where $k, l \in J$ to the form $\bar{q}$ such that the restriction $\bar{q}_J$ is a disjoint union of classical forms of Dynkin type.

Furthermore, given any $j \in J$ such that $A_{ji} > 0$ we can fulfill the reduction R_{ji}^+ . Note that $(R_{ji}^+(z))_i = z_i$. After some number of such steps, if we obtain any classical form $\bar{q}$ then (2) is proved. Otherwise there are the infinite sequence of connected non-negative critical forms $\bar{q}, \bar{q}^2, \dots, \bar{q}^k, \dots$ such that $\bar{q}^{k+1} = R_{j_k, i_k}^+(\bar{q}^k)$ and $\bar{q}_J^k = \bar{q}_J$ for all $k = 2, \dots$. By (2), $A_{ij}A_{ji} \leq 4$ for all $j \in I_n$. It follows then there exists $k < l$ such that $R^+(\bar{q}^k) = \bar{q}^l = \bar{q}'$. Then $z' = \bar{z}^l - \bar{z}^k$ is positive vector, $z'_i = 0$ and $z' \in \text{rad } \bar{q}'$. Impossible.

6 Inflation and deflation

For $\varepsilon \in \{+, -\}$ and $i, j \in I_n, i \neq j$ we define $T_{ij}^\varepsilon : \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}^n$ as a linear $\mathbb{Z}$ -invertible transformation given by

$$T_{ij}^\varepsilon(\alpha_k) = \begin{cases} \alpha_k, & \text{if } k \neq i, \\ \alpha_i - \varepsilon\alpha_j, & \text{if } k = i. \end{cases}$$

According to [2] if $q_{ij} > 0$ we call T_{ij}^+ an inflation for q , whereas if $q_{ij} < 0$ we call T_{ij}^- a deflation for q . Inflation and deflation can be interpreted also in following way.

The linear transformation $T_{ij} : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}(\bar{R})$ is called the in-flation (resp., de-flation) in the direction $i \rightarrow j$ provided $A_{ji} > 0$ (resp., $A_{ji} < 0$).

Let $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ denotes the canonical base of $\mathbb{Z}^n$, $i, j \in I_n, i \neq j$. If subform $q|_{\{i, j\}}$ is positive and connected then either $|A_{ij}| = 1$ or $|A_{ji}| = 1$ by Lemma 1.1. Assume $|A_{ji}| = 1$. In this case

$$\bar{\alpha}_k = \alpha_k, \quad k \neq j, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_j &= s_j(\alpha_i) = \alpha_i - 2 \frac{(\alpha_i, \alpha_j)}{(\alpha_j, \alpha_j)} \alpha_j = \\ &= \alpha_i - A_{ij}\alpha_j = \alpha_i - \varepsilon\alpha_j \end{aligned}$$

with $\varepsilon = \text{sign}(q_{ij})$ form a new root base $\bar{\alpha}$ of $\mathbb{Z}$ and the linear transformation $T_{ij} : \mathbb{Z}(\alpha) \rightarrow \mathbb{Z}(\bar{\alpha})$. We obtain the new integer quadratic form $\bar{q} = T_{ij}(q)$ such that

$$1) \quad \bar{q}_j = \bar{q}_i = q_i,$$

$$\begin{aligned} 2) \quad \bar{q}_{ij} &= 2q_i - \frac{q_{ij}^2}{q_j}, \\ \bar{A}_{ij} &= \bar{A}_{ji} = 2 - A_{ij}A_{ji}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3) \quad \bar{q}_{jk} &= 2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)\bar{q} = q_{jk} - A_{ij}q_{jk}, \\ \bar{A}_{kj} &= A_{ki} - A_{kj}A_{ji}, \\ \bar{A}_{jk} &= A_{ik} - A_{ij}A_{jk}, \quad k \in I_n \setminus \{i, j\}. \end{aligned}$$

Other data stay the same as for q . Then the linear transformation $T_{ij} : \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}(\bar{R})$ is inflation (resp., deflation) in the direction $i \rightarrow j$ provided $A_{ji} > 0$ (resp., $A_{ji} < 0$).

Proof.

$$1) \bar{q}_j = (s_j(\alpha_i), s_j(\alpha_i))_q = q_i.$$

$$2) \bar{q}_{ij} = 2(\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_j)_{\bar{q}} = 2(\alpha_i, \alpha_i - A_{ij}\alpha_j)_q = 2q_i - A_{ij}q_{ij} = 2q_i - \frac{q_{ij}^2}{q_j}.$$

$$3) \bar{q}_{jk} = 2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}} = 2(\alpha_i - A_{ij}\alpha_j, \alpha_k)_q = q_{ik} - A_{ij}q_{jk}, \quad k \in I_n \setminus \{i, j\}.$$

$$\bar{A}_{kj} = \frac{2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}}}{\bar{q}_j} = \frac{q_{ik} - A_{ij}q_{jk}}{q_i} = A_{ki} - \frac{q_{ij}}{q_i} \frac{q_{jk}}{q_i} = A_{ki} - A_{ji}A_{kj}.$$

$$\bar{A}_{jk} = \frac{2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}}}{\bar{q}_k} = \frac{q_{ik} - A_{ij}q_{jk}}{q_k} = A_{ik} - A_{ij}A_{jk}.$$

Remark 1. 1) For the case $q_i = q_j = -q_{ij}$, the transformations $T_{ij}(q)$ and $R_{ij}(q)$ coincides. For the case $q_i = q_j = q_{ij}$, $R_{ij}(q) = T_j T_{ij}(q)$.

2) If $|A_{ij}| \neq 1$, then for the obtained form $\bar{q} = T_{ij}(q)$, the root set $\Delta_{\bar{q}}$ does not have simple connection with Δ_q . In particular, the roots of a type $W(\alpha_j)$ are not the roots for $\bar{q}$ (in base $\bar{\alpha}$).

3) Given a connected (reduced) form q the obtained form $\bar{q} = T_{ij}(q)$ might not be connected (reduced).

Proposition 6.1. If q is non-negative integer form, then there is a sequence of inflations and deflations with composition T such that the form $\bar{q} = T(q)$ comes to a direct sum of connected positive unit forms multiplied by some positive integer and trivial form. The form $\bar{q}$ is uniquely determined by q .

Proof. 1) $\bar{q}_j = (s_j(\alpha_i), s_j(\alpha_i))_q = q_i$.

$$2) \bar{q}_{ij} = 2(\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_j)_{\bar{q}} = 2(\alpha_i, \alpha_i - A_{ji}\alpha_j)_q = 2q_i - A_{ji}q_{ij} = 2q_i - \frac{q_{ij}^2}{q_j}.$$

$$3) \bar{q}_{jk} = 2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}} = 2(\alpha_i - A_{ji}\alpha_j, \alpha_k)_q = q_{ik} - A_{ji}q_{jk}, \quad k \in I_n \setminus \{i, j\}.$$

$$\bar{A}_{jk} = \frac{2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}}}{\bar{q}_j} = \frac{q_{ik} - A_{ji}q_{jk}}{q_i} = A_{ik} - \frac{q_{ij}}{q_i} \frac{q_{jk}}{q_i} = A_{ik} - A_{ji}A_{jk}.$$

$$\bar{A}_{kj} = \frac{2(\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_k)_{\bar{q}}}{\bar{q}_k} = \frac{q_{ik} - A_{ji}q_{jk}}{q_k} = A_{ki} - A_{ji}A_{kj}.$$

□

Remark 2. 1) For the case $q_i = q_j = -q_{ij}$, the transformations $T_{ij}(q)$ and $R_{ij}(q)$ coincides. For the case $q_i = q_j = q_{ij}$, $R_{ij}(q) = T_j T_{ij}(q)$.

2) If $|A_{ij}| \neq 1$, then for the obtained form $\bar{q} = T_{ij}(q)$, the root set $\Delta_{\bar{q}}$ does not have simple connection with Δ_q . In particular, the roots of a type $W(\alpha_j)$ are not the roots for $\bar{q}$ (in base $\bar{\alpha}$).

3) Given a connected (reduced) form q the obtained form $\bar{q} = T_{ij}(q)$ might not be connected (reduced).

The following proposition is used that the changes base keep (retain) the positivity and non-negativity conditions.

Proposition 6.2. If q is non-negative, then there is a sequence of truncations and radical extensions with composition T such that the form $\bar{q} = T(q)$ comes to a disjoint union of connected unit forms multiplied by some non-negative integer and one-point zero forms. The form $\bar{q}$ is uniquely determined by q .

Proof. First of all note that this assertion follows from [3] and [2] for the unit forms, so we can only reduce any integer form to unit and refer to this results.

Proof the existence of such reduction. Consider some connected component of q , $q' = q|_I$, $I \subset I_n$ and denote $q_I = \min_{i \in I} q_i$, $n_I = |\{i \in I \mid q_i = q_I\}|$. Use the backward induction principle to prove Proposition for q' .

If $n_I = |I|$ then $q_i = q_I$ for all $i \in I$, and $q' = q_I \cdot q''$ where the form q'' is integer, non-negative and unit. Otherwise there exist $i, j \in I$ such that $q_i = q_I$, $q_j > q_I$ and $q_{ij} \neq 0$. Due to Lemma 1.1, $|A_{ij}| = 1$. Do $T_{ij}(q)$ to obtain the integer, non-negative form $\bar{q}'$ with $\bar{q}'_j = \bar{q}'_i = q_I$. Therefore, $|n'_I| = |n_I| + 1$ and the proof is over by induction assumption.

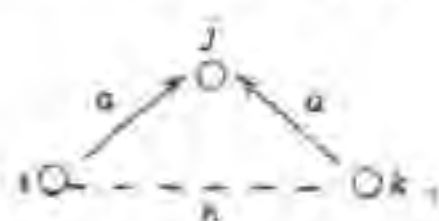
Show the uniqueness. Set $N_q = \sum_{i \in I} q_i$. Assume that for each form q with $N_q < N$ the assertion is true. Consider the form q with $N_q = N$. If $q_i = q_j$ for all $i, j \in I_n$ then q is unit forms multiplied by some integer. Otherwise there is the pair $i, j \in I_n$ such that $|A_{ij}| = 1$, $|A_{ji}| > 1$. Assume there is another pair $k, l \in I_n$ with the same properties. By the induction assumption, the forms $T_{ij}(q)$ and $T_{kl}(q)$ are satisfied the assertion of uniqueness. Therefore to prove that arbitrary two sequences of a type $T_1 T_{ij}(q)$ and $T_2 T_{kl}(q)$ give equal forms it is enough to show that there exist two such sequences $T'_1 T_{ij}(q)$ and $T'_2 T_{kl}(q)$ which lead to the same form. Then we conclude

$$T_1 T_{ij}(q) \stackrel{\text{induct.}}{=} T'_1 T_{ij}(q) = T'_2 T_{kl}(q) \stackrel{\text{induct.}}{=} T_2 T_{kl}(q).$$

If $\{i, j\} \cap \{k, l\} = \emptyset$, then $T_{kl} T_{ij}(q) = T_{ij} T_{kl}(q)$ since the associated base for the both sides is $\{s_j(\alpha_i), s_l(\alpha_k), \alpha_r, r \neq j, l\}$.

In the case $T_{ij}(q)$, $T_{kl}(q)$, $j \neq l$ we have $T_{kl} T_{ij}(q) = T_{ij} T_{kl}(q)$ since the associated base for the both sides is $\{s_j(\alpha_i), s_l(\alpha_k), \alpha_r, r \neq j, l\}$.

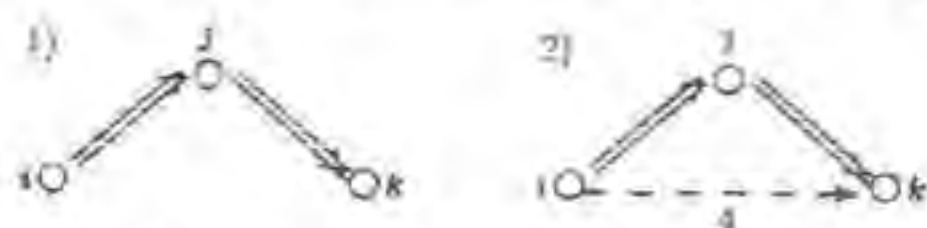
The following case to consider is $T_{ij}(q)$, $T_{kj}(q)$, $i \neq k$. We have $|A_{ji}| = |A_{jk}| = 1$, $|A_{ij}| > 1$, $|A_{kj}| > 1$. Then for non-negative form q there hold $q_i = q_k$, $A_{ij} = A_{kj}$, $A_{ki} = A_{ik}$. Denote $a = A_{ij}$, $b = A_{ki}$. Up to similarity of forms we can assume $a \leq 0$, $b \geq 0$. We obtain the following diagram of the full sub-form $q|_{i,j,k}$:



where $a = -2$, $b = 0, 1$, or $a = -3$, $b = 1, 2$.

Then for the cases $a = -2$, $b = 1$ and $a = -3$, $b = 2$ the root base for the both forms $T_{kj} T_{ij}(q)$ and $T_{ij} T_{kj}(q)$ is equal $\alpha'_i = \alpha_i$, $\alpha'_j = \alpha_i + \alpha_j + \alpha_k$, $\alpha'_k = \alpha_k$ (the rest base roots do not change). Therefore the forms $T_{kj} T_{ij}(q)$ and $T_{ij} T_{kj}(q)$ coincide, the proof follows. Similarly, for the cases $a = -2$, $b = 0$ and $a = -3$, $b = 1$ we have $T_{kj} T_{ij}(q) = T_{ij} T_{kj}(q)$ and obtain the proof.

Consider the last case of fulfilling $T_{ij}(q)$ and $T_{jk}(q)$. We have $|A_{ji}| = 1$, $|A_{ij}| > 1$, $|A_{kj}| = 1$, $|A_{jk}| > 1$. For non-negative form q there are only the following two cases (up to sign exchange).



In the first case the bases of the forms $T_{jk} T_{ij}(q)$ and $T_{ik} T_{ij} T_{jk}(q)$ coincide and equal

$\alpha'_i = \alpha_i$, $\alpha'_j = \alpha_i + \alpha_j$, $\alpha'_k = \alpha_i + \alpha_j + \alpha_k$, hence this forms coincide as well.

In the second case we obtain $T_{ik} T_{ij}(q) = T_{jk} T_{ij} T_{jk}(q)$ with the common base $\alpha'_i = \alpha_i$, $\alpha'_j = \alpha_i + \alpha_j$, $\alpha'_k = \alpha_i - \alpha_k$.

The proof is over.

The following result was shown in [3]

Proposition 6.3 (Ovsienko). Let $q : \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$ be a unit form.

- 1) If q is positive, then there is a sequence of inflations with composition T such that the bigraph of qT is a disjoint union of Dynkin diagrams.
- 2) If q is critical, then there is a sequence of inflations with composition T such that the bigraph of qT is an extended-Dynkin diagram.

Following theorem for integer forms is simple conclusion from Propositions 6.2 and 6.3.

Theorem 1. 1) If q is non-negative (positive), then there is a sequence of inflation and deflations with composition T such that the bigraph of qT is disjoint union of Dynkin diagrams multiplied by some non-negative (positive) integer.

- 2) If q is critical, then there is a sequence of inflation and deflations with composition T such that the bigraph of qT is an extended-Dynkin diagrams multiplied by positive integer.

Literature

1. Barot M., Kussin D., Lenzing H. The Lie algebra associated to a unit form // Journal of Algebra - 2006. - vol 296 - pp 1-17
2. Barot M., De la Pena J. A. The Dynkin type of a non-negative unit form // Expositiones Mathematicae. - 1999. - vol 17 - pp. 339-348
3. Ovsienko S.A. Integer weakly positive forms // Schurian Matrix problems and quadratic forms. - 1978. - pp. 3-17
4. Ройтер А.В. Корни целых квадратичных форм // Квадратичные формы и поликолычаны (препринт). - 1977. - pp. 3-15

Надійшла до редакції 28.10.2009

УДК 512.57

Анатолій В. Жучок, к. ф.-м. н., доцент

Найменша напівструктурна конгруенція дімоноїду

Описано всі напівструктурні конгруенції довільного дімоноїду та визначено його найменшу напівструктурну конгруенцію.

Ключові слова: дімоноїд, напівструктурна конгруенція.

E-mail: zhuchok_a@mail.ru

Статтю представив доктор фізико-математичних наук, професор Кириченко В.В.

Вступ. Алгебри Лейбніца і діалгебри вперше з'явилися в K -теорії і в наш час активно вивчаються. Ці поняття було введено Д.-Л. Лодесом [1] як розширення понять алгебри Лі та асоціативної алгебри, відповідно. Діалгебра є лінійним аналогом поняття дімоноїд [1], введеного Д.-Л. Лодесом для вивчення властивостей алгебр Лейбніца. Поняття дімоноїд узагальнює поняття дігрупи [2], що з'явилося в теорії алгебр Лейбніца при розв'язку задачі знаходження аналога групи Лі для алгебри Лейбніца. Одним з перших результатів про дімоноїди є описання вільного дімоноїду на заданій множині [1]. В [3] доведено, що кожний комутативний дімоноїд є напівструктурною архімедових дімоноїдів.

В даній роботі ми описуємо всі напівструктурні конгруенції довільного дімоноїду та визначаємо його найменшу напівструктурну конгруенцію. Результати, які при цьому отримано, узагальнюють результати Ямади [4] про будову всіх напівструктурних конгруенцій довільної напівгрупи.

Нагадаємо основні визначення, які використовуються в роботі.

Множина D з визначеними на ній бінарними асоціативними операціями $<$ і $>$, які задовольняють аксіомам:

$$\begin{aligned}(x < y) < z &= x < (y > z), \\ (x > y) < z &= x > (y < z), \\ (x < y) > z &= x > (y > z)\end{aligned}$$

для всіх $x, y, z \in D$, називається дімоноїдом. У випадку, коли операції дімоноїду співпадають, він перетворюється у напівгрупу.

Відображення f дімоноїду D_1 в дімоноїд D_2 називається гомоморфізмом, якщо

Anatolii V. Zhuchok, PhD, Associate Professor

The least semilattice congruence on a dimonoid

All the semilattice congruences on an arbitrary dimonoid are described and the least semilattice congruence is defined.

Key words: dimonoid, semilattice congruence.

$$\begin{aligned}(x < y)f &= xf < yf, \\ (x > y)f &= xf > yf\end{aligned}$$

для всіх $x, y \in D_1$.

Приклади дімоноїдів можна знайти в [1, 3].

1. Напівструктурні конгруенції

В цьому пункті ми опишемо всі напівструктурні конгруенції довільного дімоноїду.

Дімоноїд $(D, <, >)$, у якому обидві операції комутативні, назвемо комутативним дімоноїдом.

Лема 1. В комутативному дімоноїді $(D, <, >)$

$$\begin{aligned}(x < y) < z &= x < (y > z) = \\ &= (x > y) < z = x > (y < z) = \\ &= (x < y) > z = x > (y > z)\end{aligned}$$

для всіх $x, y, z \in D$.

Доведення. Для всіх $x, y, z \in D$ згідно аксіомам та комутативності дімоноїду маємо

$$\begin{aligned}(x < y) > z &= z > (x < y) = \\ &= (z > x) < y = (x > z) < y = \\ &= x > (z < y) = x > (y < z) = \\ &= (x > y) < z, \\ (x > y) < z &= z < (x > y) = \\ &= (z < x) < y = (x < y) < z = \\ &= x < (y > z),\end{aligned}$$

звідки

$$(x < y) > z = x < (y > z).$$

Лемі доведено.

Лема 2. В будь-якому комутативному дімоноїді $(D, <, >)$ з ідемпотентною операцією

$\prec$ операції співпадають.

Доведення. Згідно леми 1 для всіх $x, y, z \in D$ маємо

$$(x \prec y) \succ z = (x \prec y) \prec z.$$

Звідси при $x = y$ отримуємо $x \succ z = x \prec z$ для всіх $x, z \in D$.

Лему доведено.

Комутативну напівгрупу ідемпотентів називатимемо напівструктурою. Якщо ρ – така конгруенція дімоноїду $(D, \prec, \succ)$, що операції фактор-дімоноїду $(D, \prec, \succ) / \rho$ співпадають та він є напівструктурою, то будемо говорити, що ρ є напівструктурною конгруенцією.

В роботі [4] розглянуто піднапівгрупу S' довільної напівгрупи S , яка володіє наступною властивістю (P):

(P) для будь-якого числа елементів $a_1, a_2, \dots, a_n \in S$ з $a_1 a_2 \dots a_n \in S'$ впливає $\xi_1 \xi_2 \dots \xi_m \in S'$ для будь-якого числа елементів $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m \in S$, які задовольняють умові: $\{\xi_j\}_{j=1}^m = \{a_i\}_{i=1}^n$. Таку піднапівгрупу називають P-піднапівгрупою напівгрупи S .

Нехай $(D, \prec, \succ)$ – довільний дімоноїд. Через Ω (відповідно, Ω') позначимо сукупність усіх P-піднапівгруп напівгрупи $(D, \prec)$ (відповідно, $(D, \succ)$). Елементи множини Ω (відповідно, Ω') позначатимемо через $D_\alpha, D_\beta, \dots$ і т.д. (відповідно, $D'_\alpha, D'_\beta, \dots$ і т.д.).

Для кожної підмножини Γ множини Ω визначимо відношення $\Gamma_\prec$ на дімоноїді $(D, \prec, \succ)$, поклавши $a \Gamma_\prec b$ тоді й лише тоді, коли

$$\{(x, y) | x \prec a \prec y \in D_\alpha\} = \{(x, y) | x \prec b \prec y \in D_\alpha\}$$

для кожного $D_\alpha \in \Gamma$.

Аналогічно для кожної підмножини T множини Ω' визначимо відношення $T_\succ$ на дімоноїді $(D, \prec, \succ)$, поклавши $a T_\succ b$ тоді й лише тоді, коли

$$\{(x, y) | x \succ a \succ y \in D'_\alpha\} = \{(x, y) | x \succ b \succ y \in D'_\alpha\}$$

для кожного $D'_\alpha \in T$.

Теорема 1. Відношення $\Gamma_\prec$ на будь-якому дімоноїді $(D, \prec, \succ)$ є напівструктурною конгруенцією. Навпаки, будь-яка напівструктурна конгруенція дімоноїду $(D, \prec, \succ)$ отримується вказаним способом.

Доведення. Той факт, що відношення $\Gamma_\prec$ є конгруенцією напівгрупи $(D, \prec)$, доведено Ямадою [4]. Покажемо, що $\Gamma_\prec$ є стабільним відносно операції $\succ$.

Нехай $a \Gamma_\prec b$, $a, b, c \in D$. Оскільки $a \prec c \Gamma_\prec b \prec c$, то

$$\begin{aligned} \{(x, y) | x \prec (a \prec c) \prec y \in D_\alpha\} &= \\ = \{(x, y) | x \prec (b \prec c) \prec y \in D_\alpha\} \end{aligned}$$

для кожного $D_\alpha \in \Gamma$. Згідно аксіоми дімоноїду отримуємо

$$\begin{aligned} x \prec (a \prec c) \prec y &= ((x \prec a) \prec c) \prec y = \\ &= (x \prec (a \succ c)) \prec y = x \prec (a \succ c) \prec y, \\ x \prec (b \prec c) \prec y &= ((x \prec b) \prec c) \prec y = \\ &= (x \prec (b \succ c)) \prec y = x \prec (b \succ c) \prec y. \end{aligned}$$

Отже, з

$$\begin{aligned} \{(x, y) | x \prec (a \prec c) \prec y \in D_\alpha\} &= \\ = \{(x, y) | x \prec (b \prec c) \prec y \in D_\alpha\} \end{aligned}$$

для кожного $D_\alpha \in \Gamma$ впливає, що $a \succ c \Gamma_\prec b \succ c$. Аналогічно показується, що $c \succ a \Gamma_\prec c \succ b$. Таким чином, $\Gamma_\prec$ є конгруенцією $(D, \prec, \succ)$.

З [4] впливає, що $a \prec a \Gamma_\prec a$ та $a \prec b \Gamma_\prec b \prec a$ для будь-яких $a, b \in D$. Це означає, що

$$\begin{aligned} \{(x, y) | x \prec (a \prec a) \prec y \in D_\alpha\} &= \\ = \{(x, y) | x \prec a \prec y \in D_\alpha\}, \\ \{(x, y) | x \prec (a \prec b) \prec y \in D_\alpha\} &= \\ = \{(x, y) | x \prec (b \prec a) \prec y \in D_\alpha\} \end{aligned}$$

для кожного $D_\alpha \in \Gamma$. Тоді згідно аксіоми дімоноїду

$$\begin{aligned} x \prec (a \prec a) \prec y &= x \prec (a \succ a) \prec y, \\ x \prec (a \prec b) \prec y &= x \prec (a \succ b) \prec y, \\ x \prec (b \prec a) \prec y &= x \prec (b \succ a) \prec y \end{aligned}$$

і ми отримуємо, що $a \succ a \Gamma_\prec a$ та $a \succ b \Gamma_\prec b \succ a$ для будь-яких $a, b \in D$. Таким чином,

$(D, \prec, \succ) / \Gamma_\prec$ – комутативний дімоноїд з ідемпотентними операціями. З леми 2 впливає,

що операції $(D, <, >)/\Gamma_\omega$ співпадають і, отже, він є напівструктурою.

Навпаки, нехай γ – довільна напівструктурна конгруенція дімоноїду $(D, <, >)$, $\{S_i\}_{i \in X}$ – сукупність всіх класів конгруенції γ . Неважко перевірити, що кожна напівгрупа $(S_i, <), i \in X$ є P -піднапівгрупою напівгрупи $(D, <)$ та кожна напівгрупа $(S_i, >), i \in X$ є P -піднапівгрупою напівгрупи $(D, >)$. Покладемо $\Gamma = \{(S_i, <)\}_{i \in X}$, $T = \{(S_i, >)\}_{i \in X}$. Тоді $\Gamma \subseteq \Omega$, $T \subseteq \Omega$. Відзначимо, що

$$\begin{aligned} \{(x, y) | x < a < y \in (S_i, <)\} = \\ = \{(x, y) | x > a > y \in (S_i, >)\} \end{aligned} \quad (1)$$

для кожного $S_i, i \in X$, оскільки $(D, <, >)/\gamma$ – напівструктура. Нехай далі $a \gamma b$, $a, b \in D$. Тоді $a, b \in S_i$ для деякого $i \in X$. Звідси

$$x < a < y \in (S_i, <) \Leftrightarrow x < b < y \in (S_i, <)$$

для будь-якої напівгрупи $(S_i, <) \in \Gamma$ і будь-яких $x, y \in D$. Отже, за визначенням Γ_ω отримуємо, що $a \Gamma_\omega b$. Аналогічно ми можемо показати, що з $a \gamma b$ випливає $a T_\omega b$. Згідно (1) отримуємо, що $\Gamma_\omega = T_\omega$.

Нехай тепер $a \Gamma_\omega b$, $a, b \in D$. Припустимо, що $a \in S_i$, $b \in S_j$, $i, j \in X$. Тоді

$$a < b < a \in S_i, \quad b < a < b \in S_j,$$

оскільки $a < a < a \in S_i$ та $b < b < b \in S_j$, відповідно. В силу того, що $(S_i, <)$ та $(S_j, <)$ є P -піднапівгрупами напівгрупи $(D, <)$, $a < b$, $b < a$ одночасно містяться і в S_i і в S_j . Таким чином, $S_i = S_j$ і, отже, $a \gamma b$.

Теорему доведено.

У випадку, коли операції дімоноїду співпадають, з теореми 1 ми отримуємо теорему Ямади [4] про будову всіх напівструктурних конгруенцій довільної напівгрупи.

2. Найменша напівструктурна конгруенція

В цьому пункті ми покажемо, що найменша напівструктурна конгруенція

довільного дімоноїду дорівнює Ω_ω .

Дімоноїд $(D, <, >)$ назвемо s -простим, якщо його найменша напівструктурна конгруенція співпадає з універсальним відношенням.

Теорема 2. Відношення Ω_ω на будь-якому дімоноїді $(D, <, >)$ є найменшою напівструктурною конгруенцією. При цьому кожний клас конгруенції Ω_ω є s -простим дімоноїдом.

Доведення. Згідно теореми 1 Ω_ω є напівструктурною конгруенцією. Якщо $a \Omega_\omega b$, $a, b \in D$, то легко бачити, що $a \Gamma_\omega b$ для будь-якого $\Gamma \subseteq \Omega$. Отже, $\Omega_\omega \subseteq \Gamma_\omega$. З теореми Тамури [5] випливає, що кожний клас A конгруенції Ω_ω є s -простою піднапівгрупою напівгрупи $(D, <)$. Звідси отримуємо s -простоту дімоноїду $(A, <, >)$.

Теорему доведено.

У випадку, коли операції дімоноїду співпадають, з теореми 2 ми отримуємо теорему Ямади [4] про будову найменшої напівструктурної конгруенції довільної напівгрупи.

Висновки

В роботі описано всі напівструктурні конгруенції довільного дімоноїду та визначено його найменшу напівструктурну конгруенцію.

Список використаних джерел

1. J.-L. Loday, Dialgebras, In: Dialgebras and related operads, Lecture Notes in Math. 1763, Springer, Berlin, 2001, 7-66.
2. J.D. Phillips, A short basis for the variety of digroups, Semigroup Forum 70 (2005), 466-470.
3. A.V. Zhuchok, Commutative Dimonoids, Journal "Algebra and Discrete Mathematics", Number 2, (2009), 108-119.
4. M. Yamada, On the greatest semilattice decomposition of a semigroup, Kodai Math. Sem. Rep., 7 (1955), 59-62.
5. T. Tamura, Another proof of a theorem concerning the greatest semilattice decomposition of a semigroup, Proc. Japan Academy, 40 (10), 1964, 777-780.

Надійшла до редколегії 06.10.2009 р.

УДК 512.552

В. В. Кириченко, Н. А. Бровицька

Глобальна розмірність напівпервинних нетерових SPSPD-кілець

Кільце A називається SPSPD-кілцем, якщо A є напівдосконалим та напівдистрибутивним кілцем. Первинне нетерове справа SPSPD-кілце A з ненульовим радикалом Джекобсона називається черепичним порядком. Черепичний порядок A має класичне кільце часток $M_n(D)$. Ми доводимо, що існує, з точністю до ізоморфізму, скінченна кількість черепичних порядків $A \subset M_n(D)$ з $gl.dim A < \infty$.

Ключові слова: глобальна розмірність, первинне SPSPD-кілце, зведений черепичний порядок, матриця показників, A -решітка.

vkir@univ.kiev.ua, natbron@mail.ru

Статтю представив академік НАН України М. О. Перестюк

Введення.

Згідно термінології Р. Б. Тарсі [20] і В. А. Ятегаонкара [15], кільце $A \subset M_n(K)$, де K є полем часток комутативного дискретно нормованого кільця O , називається черепичним порядком над O , якщо $M_n(K)$ – класичне кільце часток A , $e_{ii} \in A$ і $e_{ii} A e_{ii} = O$, для $i = 1, \dots, n$, де $e_{11}, \dots, e_{nn}$ – матричні ідемпотенти $M_n(K)$. Незавжди перевіряти, що кільце A є нетеровим первинним напівдосконалим і напівдистрибутивним кілцем з ненульовим радикалом Джекобсона. Таким чином, визначення черепичного порядку як первинного нетерового SPSPD-кілля є узагальненням поняття черепичного порядку над дискретно нормованим кільцем у розумінні Р. Б. Тарсі і В. А. Ятегаонкара.

В. А. Ятегаонкар в [15] довів, що для кожного $n \geq 2$ існує, з точністю до ізоморфізму, скінченна кількість черепичних порядків над дискретно нормованим кільцем O , які лежать в $M_n(K)$, де K є полем дробів комутативного дискретно нормованого кільця O . Ми переносимо цей результат на випадок довільних черепичних порядків

В якості кільця O часто розглядається кільце $k[[x]]$ формальних степеневих рядів над полем k від однієї змінної x .

Бивченню глобальної розмірності черепичних порядків присвячені численні статті (див. [6], [7], [8], [9], [10], [13], [14], [15], [16], [17], [18], [19], [20], [21], [22]).

V. V. Kirichenko, N. A. Bronickaya

Global dimension of semiprime noetherian SPSPD-rings.

We write SPSPD-ring for a semiperfect semidistributive ring. A tiled order A is a prime right Noetherian SPSPD-ring with the nonzero Jacobson radical. A tiled order A has the classical ring of fractions $M_n(D)$, where $M_n(D)$ is the ring of all $n \times n$ -matrices with elements from division ring D . We prove that there are, up to isomorphism, only finitely many tiled orders in $M_n(D)$ of finite global dimension.

Key Words: global dimension, tiled order, prime SPSPD-ring, exponent matrix, A -lattices.

Зазначимо, що в [1], [14], [16], [21], розглядалась глобальна розмірність наступних класів черепичних порядків:

- (1) черепичні порядки ширини два;
- (2) трикутні черепичні порядки;
- (3) черепичні $(0, i)$ -порядки.

В усіх цих випадках, якщо A – черепичний порядок скінченної глобальної розмірності $gl.dim A < \infty$, то $gl.dim A \leq n - 1$.

Р. Б. Тарсі [20] висловив гіпотезу, що максимальною скінченною глобальною розмірністю черепичного порядку, що лежить в $M_n(K)$ є число $n - 1$. Це дійсно має місце для $n \leq 5$, але для $n = 6$ Х. Фуджита [6] побудував приклад черепичного порядку A , що лежить в $M_6(K)$ з $gl.dim A = 6$.

1. Черепичні порядки.

Виходячи з [11, гл. 14] черепичним порядком називається первинне нетерове напівдосконале і напівдистрибутивне кільце з ненульовим радикалом Джекобсона.

Ми використовуємо скорочений запис SPSPD-кілля для напівдосконого і напівдистрибутивного кільця.

Наступні дві теореми були доведені в [5] (див. також [11, теорема 14.5.1 и теорема 14.5.2]).

Має місце наступна теорема розкладу для напівпервинних нетерових справа SPSPD-кілля.

Теорема 1.1 [11, теорема 14.5.1] Для напівпервинного напівдосконого нетерового справа

кільця A наступні умови еквівалентні:

- (1) кільце A – напівдистрибутивне;
- (2) кільце A є прямим добутком напівпростого артинова кільця і скінченної кількості черепичних порядків.

Нехай A – черепичний порядок. За теоремою Голді (див. наприклад, [11, § 9.3.]) A має класичне праве кільце часток, яке є простим артиновим кільцем, тобто ізоморфне кільцю $M_n(D)$ всіх квадратних матриць з елементами з тіла D .

Позначимо через e_{ij} – матричні одиниці кільця $M_n(D)$ ($i, j = 1, \dots, n$).

Одинична матриця $E_n \in M_n(D)$ записується у вигляді суми матричних ідемпотентів

$$E_n = e_{11} + \dots + e_{nn}.$$

Лема 1.2. Для кожного черепичного порядку $A \in M_n(D)$ існує ізоморфний йому черепичний порядок B такий, що $1 \in B$ має наступний розклад

$$1 = e_{11} + \dots + e_{nn}, \text{ где } e_{11}, \dots, e_{nn} \in B.$$

Тому скрізь надалі ми будемо вважати, що $E_n \in A$ і $e_{11}, \dots, e_{nn} \in A$.

Теорема 1.3 [11, теорема 14.5.2] Кожний черепичний порядок ізоморфний первинному кільцю квадратних матриць порядку n наступного виду:

$$A = \begin{pmatrix} \mathcal{O} & \pi^{\alpha_{12}} \mathcal{O} & \dots & \pi^{\alpha_{1n}} \mathcal{O} \\ \pi^{\alpha_{21}} \mathcal{O} & \mathcal{O} & \dots & \pi^{\alpha_{2n}} \mathcal{O} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \pi^{\alpha_{n1}} \mathcal{O} & \pi^{\alpha_{n2}} \mathcal{O} & \dots & \mathcal{O} \end{pmatrix}$$

де $n \geq 1$, $\mathcal{O}$ є дискретно нормованим кільцем з простим елементом π і α_{ij} – цілі числа такі, що $\alpha_{ij} + \alpha_{jk} \geq \alpha_{ik}$ для всіх i, j, k ($\alpha_{ii} = 0$ для будь-якого i).

Дискретно нормоване кільце $\mathcal{O}$ вкладається в класичне кільце часток D , яке є тілом. Тому SPSPD-кільце A вкладається в класичне кільце часток $M_n(D)$ і $e_{ii} A e_{jj} = e_{ij} \pi^{\alpha_{ij}} \mathcal{O}$, де $e_{11}, \dots, e_{nn}$ – матричні ідемпотенти $M_n(D)$ і e_{ij} – матричні одиниці кільця $M_n(D)$.

Нехай кільце A є прямим добутком кілець $A = A_1 \times A_2$. Очевидно, $gl.dim A$ нескінченна тоді і тільки тоді, коли $gl.dim A_1$ або $gl.dim A_2$ нескінченна. Тому $gl.dim A$ скінченна тоді і тільки тоді, коли $gl.dim A_1$ і $gl.dim A_2$ скінченні.

Загальновідомо, що глобальна розмірність напівпростого артинового кільця дорівнює нулю.

Отже, для вивчення глобальної розмірності нетерових справа напівпервинних SPSPD-кілець нам достатньо обмежитися випадком черепичних порядків. Зазначимо, що будь-який черепичний порядок є нетеровим з двох сторін кільцем.

Нехай A напівдосконале кільце, R – його радикал Джекобсона. Нагадаємо, що кільце A називається зведеним, якщо факторкільце A/R є прямим добутком тіл.

Будь-яке напівдосконале кільце A еквівалентне в сенсі Моріти зведеному кільцю.

Позначимо $M_n(\mathbb{Z})$ кільце всіх квадратних $n \times n$ -матриць над кільцем цілих чисел $\mathbb{Z}$. Нехай $\mathcal{E} \in M_n(\mathbb{Z})$. Матриця $\mathcal{E} = (\alpha_{ij})$ називається матрицею показників, якщо $\alpha_{ij} + \alpha_{jk} \geq \alpha_{ik}$ для всіх $i, j, k = 1, \dots, n$ і $\alpha_{ii} = 0$ для $i = 1, \dots, n$. Якщо $\alpha_{ij} + \alpha_{ji} > 0$ для $i, j = 1, \dots, n$, то матрицю $\mathcal{E}$ називають зведеною матрицею показників.

Введемо наступне позначення: $A = \{\mathcal{O}, \mathcal{E}(A)\}$, де $\mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})$ – зведена матриця показників кільця A , тобто $A = \sum_{i,j=1}^n e_{ij} \pi^{\alpha_{ij}} \mathcal{O}$, де e_{ij} – матричні одиниці. Якщо черепичний порядок є зведеним, то $\alpha_{ij} + \alpha_{ji} > 0$, для $i, j = 1, \dots, n$, $i \neq j$, тобто $\mathcal{E}(A)$ – зведена.

Якщо кільця A і B еквівалентні в сенсі Моріти, то $gl.dim A = gl.dim B$. Отже, при вивченні глобальної розмірності черепичного порядку достатньо обмежитися випадком зведених черепичних порядків. Тому скрізь надалі ми будемо вважати, що черепичний порядок має наступний вигляд $A = \{\mathcal{O}, \mathcal{E}(A)\}$, де $\mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})$ – зведена матриця показників кільця A , тобто $A = \sum_{i,j=1}^n e_{ij} \pi^{\alpha_{ij}} \mathcal{O}$, де e_{ij} – матричні одиниці.

Означення. Дві матриці показників $\mathcal{E} = (\alpha_{ij})$ і $\Theta = (\theta_{ij})$ називаються еквівалентними, якщо вони можуть бути отримані одна з іншої одним з наступних перетворень:

- (1) відніманням цілого числа α від елементів l -того рядка з одночасним додаванням цього ж цілого числа α до елементів l -того стовпця;
- (2) одночасною перестановкою двох рядків і двох стовпців з однаковими номерами.

Твердження 1.4. Нехай $A = \{\mathcal{O}, \mathcal{E}(A)\}$ і $B = \{\mathcal{O}, \mathcal{E}(B)\}$ – черепичні порядки, причому матриці $\mathcal{E}(A)$ і $\mathcal{E}(B)$ еквівалентні. Тоді черепичні порядки A і B ізоморфні.

Доведення випливає з того, що вказані вище елементарні перетворення з матрицями показників зводяться до елементарних перетворень в кільці $M_n(D)$. При цьому матричні ідемпотенти $e_{11}, \dots, e_{nn}$ не змінюються при перетвореннях

першого типу и переставляються при перетвореннях другого типу.

Твердження 1.5. Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A)\}$ – зведений черепичний порядок. Існує ізоморфний A черепичний порядок $B = \{O, \mathcal{E}(B)\}$, де $\mathcal{E}(B) =$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \delta_{21} & 0 & \delta_{23} & \dots & \delta_{2n-1} & \delta_{2n} \\ \delta_{31} & \delta_{32} & 0 & \dots & \delta_{3n-1} & \delta_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \delta_{n-11} & \delta_{n-12} & \delta_{n-13} & \dots & 0 & \delta_{n-1n} \\ \delta_{n1} & \delta_{n2} & \delta_{n3} & \dots & \delta_{nn-1} & 0 \end{pmatrix}$$

Доведення. Нехай

$$\mathcal{E}(A) = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & 0 & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Віднімемо від другого стовпця α_{12} . Тоді α_{12} потрібно додати до елементів другого рядка. В результаті цих перетворень на місці (1, 2) отримаємо нуль. Від третього стовпця віднімемо елемент α_{13} і додамо його до елементів третього рядка. В отриманій матриці на місцях (1, 2) і (1, 3) стоять нулі. Продовжуючи цей процес, отримаємо матрицю, в якій всі елементи першого рядка дорівнюють нулю.

Без обмеження загальності, ми можемо вважати, що $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$, де $\alpha_{12} = \alpha_{13} = \dots = \alpha_{1n} = 0$.

Твердження 1.6. Нехай $\mathcal{E} = (\alpha_{ij})$ – зведена матриця показників і $\alpha_{12} = \dots = \alpha_{1n} = 0$. Тоді $\alpha_{ij} \geq 0$, при $i, j = 1, \dots, n$.

Доведення. Очевидно, $\alpha_{1i} + \alpha_{ij} \geq \alpha_{1j}$, звідки $\alpha_{ij} \geq 0$.

З того, що матриця $\mathcal{E}$ є зведеною випливає, що $\alpha_{k1} > 0$ при $k = 2, \dots, n$.

Покажемо далі, що елементи першого стовпця можна занумерувати наступним чином: $\alpha_{k1} \leq \alpha_{m1}$ при $k \leq m$.

Нехай α_{k_01} – найменший елемент першого стовпця. Якщо $k_0 = 2$, то все в порядку. Нехай $k_0 \geq 3$. Переставляючи рядки з номерами 2 і k_0 ми повинні переставити стовпці з тими ж номерами, тоді на місці (2, 1) буде стояти число α_{k_01} , а перший стовпець не зміниться. Вибираючи серед чисел $\alpha_{31}, \dots, \alpha_{n1}$ найменше, ми можемо вважати, використовуючи аналогічні перетворення, що це число стоїть на місці (3, 1). Продовжуючи цей процес, ми впорядкуємо натуральні числа, що стоять в першому стовпці за зростанням, при цьому перший рядок залишиться нульовим. 27

Наслідок 1.7. Будь-який зведений черепичний порядок $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ має незвідну матрицю показників $\mathcal{E}(A)$ з нульовим першим рядком і з першим стовпцем, що складається з натуральних чисел, які впорядковані за величиною: $\alpha_{i1} \leq \alpha_{j1}$ при $i \leq j$.

Означення. Зведену матрицю показників будемо називати канонічною матрицею показників, якщо вона задовольняє умовам наслідку 1.7.

2. Надкільця и незвідні A -решітки.

Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ – черепичний порядок, що лежить в $Q = M_n(D)$, де D – класичне тіло часток кільця O .

Означення. Нехай Q – класичне кільце часток кільця A і B , причому $A \neq Q$ і $B \neq Q$. Якщо $A \subset B$, то кільце B називається надкільцем кільця A .

Має місце наступне твердження (див. [12]).

Лема 2.1. Нехай O – дискретно нормоване кільце з єдиним максимальним ідеалом $M = \pi O = O\pi$ і класичним тілом часток D . Тоді D є ланцюговим справа і зліва O -модулем.

Будь-який правий O -підмодуль X O -модуля D ($X \neq D$) має вигляд $X = \pi^t O = O\pi^t$, де t – ціле число.

Наслідок 2.2. Якщо $\Delta \neq D$ є надкільцем кільця O , то $\Delta = O$.

Доведення. Кільце Δ є O -бімодулем. Тому $\Delta = \Delta \cdot \Delta = \pi^{2t} O = O\pi^{2t}$, де $\Delta = \pi^t O = O\pi^t$. За лемою Накаями $t = 0$.

Таким чином, O є максимальним порядком в своєму тілі часток D .

Означення. Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ – черепичний порядок. Правий (лівий) A -модуль M називається A -решіткою, якщо він є вільним O -модулем скінченного рангу.

Зокрема, будь-який вільний A -модуль скінченного рангу є A -решіткою. Зрозуміло, що будь-який підмодуль A -решітки є A -решіткою.

В той же час, фактормодуль A -решітки не завжди є A -решіткою, як показує наступний приклад.

Приклад. Нехай $A = O$, де O – дискретно нормоване кільце, $M = O_O$. Тоді фактормодуль M/N є O -решіткою тоді і тільки тоді, коли $N = 0$. Модуль O_O є ланцюговим і містить злічений ланцюг ненульових підмодулів:

$$O_O \supset \pi O_O \supset \dots \supset \pi^k O_O \supset \dots$$

причому будь-який фактормодуль $O/\pi^k O$ не є O -решіткою.

Через $Lat_r(A)$ (відп. $Lat_l(A)$) позначається категорія всіх правих (лівих) A -решіток.

Твердження 2.3. Нехай L – підмодуль модуля M і модулі $L, M/L \in Lat_r(A)$. Позначимо $p: M \rightarrow M/L$ – природний епіморфізм. Тоді $M \in Lat_r(A)$ і M має наступний O -базис

$$e_1, \dots, e_s, p^{-1}(n_1), \dots, p^{-1}(n_t),$$

де $e_1, \dots, e_s$ – O -базис L і $n_1, \dots, n_t$ – O -базис M/L .

Доведення. Позначимо $M/L = N$. Покажемо, що $M \in Lat_r(A)$. Зрозуміло, що M є скінченнопорядкованим O -модулем. Якщо ми покажемо, що в O -модулі M немає O -кручення, то він буде вільним O -модулем скінченного рангу.

Позначимо через E_n – одиничну матрицю, що лежить в A . Тоді, якщо $m \in M, m \neq 0$ і $m\pi^t E_n = 0$ для деякого натурального t , то $p(m\pi^t E_n) = 0 = p(m)\pi^t E_n \in N$. Так як $L \in Lat_r(A)$, то $p(m) = 0$. Отже, $m \in \text{Ker } p = L$, тобто $m = l$ і $l\pi^t E_n = 0$. Але $L \in Lat_r(A)$, звідки $l = m = 0$.

Позначимо через $e_1, \dots, e_s$ O -базис модуля L і через $n_1, \dots, n_t$ – O -базис модуля N . Нехай $m \in M$. Тоді $p(m) = n \in N$ і $m - p^{-1}(n) \in \text{Ker } p$. Отже, $m - p^{-1}(n) = e_1\alpha_1 + \dots + e_s\alpha_s$, де $\alpha_1, \dots, \alpha_s \in O$. Елемент n однозначно представляється у вигляді суми:

$$n = n_1\beta_1 + \dots + n_t\beta_t.$$

З рівності $m = e_1\alpha_1 + \dots + e_s\alpha_s + p^{-1}(n)$ отримуємо, що $m = e_1\alpha_1 + \dots + e_s\alpha_s + p^{-1}(n_1)\beta_1 + \dots + p^{-1}(n_t)\beta_t$. Таким чином, будь-який елемент $m \in M$ представляється у вигляді лінійної комбінації $e_1, \dots, e_s, p^{-1}(n_1), \dots, p^{-1}(n_t)$ з коефіцієнтами з O . Для завершення доведення потрібно показати, що з рівності

$$e_1\alpha_1 + \dots + e_s\alpha_s + p^{-1}(n_1)\beta_1 + \dots + p^{-1}(n_t)\beta_t = 0$$

випливає, що $\alpha_1 = \dots = \alpha_s = \beta_1 = \dots = \beta_t = 0$. Зрозуміло, що $p(e_1\alpha_1 + \dots + e_s\alpha_s + p^{-1}(n_1)\beta_1 + \dots + p^{-1}(n_t)\beta_t) = 0 = n_1\beta_1 + \dots + n_t\beta_t$, звідки $\beta_1 = \dots = \beta_t = 0$. Отже, $e_1\alpha_1 + \dots + e_s\alpha_s = 0$, звідки $\alpha_1 = \dots = \alpha_s = 0$.

Серед усіх A -решіток виділяються незвідні A -решітки. Це A -решітки, що лежать в простому правому (відп. лівому) Q -модулі U (відп. V).

Незвідні A -решітки утворюють частково впорядковану множину $S_r(A)$ (відп. $S_l(A)$) за включенням.

Нагадаємо, що $Q = M_n(D)$ і правий простий Q -модуль U має D -базис $e_1, \dots, e_n$ в $e_i e_k = \delta_{ik} e_j$ ($i, j, k = 1, \dots, n$). Точно так само лівий простий Q -модуль V має D -базис $f_1, \dots, f_n$ і $e_k f_m = \delta_{jm} e_k$, де e_{kj} – матричні одиниці кільця $M_n(D)$, ($i, j, k = 1, \dots, n$).

Будь-яка права (відп. ліва) незвідна A -решітка M (відп. N), що лежить в U (відп. у V) є A -модулем з O -базисом $\pi^{\alpha_1} e_1, \dots, \pi^{\alpha_n} e_n$ ($\pi^{\alpha_1} f_1, \dots, \pi^{\alpha_n} f_n$), причому цілі числа $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ задовольняють наступним умовам:

$$\begin{cases} \alpha_i + \alpha_{ij} \geq \alpha_j, & \text{у правому випадку;} \\ \alpha_j + \alpha_{ij} \geq \alpha_i, & \text{у лівому випадку.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Для наших цілей достатньо розглянути зведені черепичні порядки. В цьому випадку елементи $S_r(A)$ ($S_l(A)$) знаходяться у взаємно однозначній відповідності з цілочисловими векторами-рядками $\vec{a} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ (векторами-стовпцями $\vec{a}^T = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T$), T – означає транспонування, причому $\vec{a}$ і $\vec{a}^T$ задовольняють умовам (2.1). Ми будемо записувати $M = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, якщо $M \in S_r(A)$. Нехай $M_1 = (\beta_1, \dots, \beta_n) = \vec{b} \in S_r(A)$. Відношення порядку $\vec{a} \leq \vec{b}$ у $S_r(A)$ визначається наступним чином: $\vec{a} \leq \vec{b}$ тоді і тільки тоді, коли $\alpha_i \geq \beta_i$ для $i = 1, \dots, n$.

Зазначимо¹, що $S_r(A)$ і $S_l(A)$ утворюють решітки відносно суми і перетину незвідних A -решіток, які є дистрибутивними.

Зауваження. Дві незвідні A -решітки $M_1 = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ і $M_2 = (\beta_1, \dots, \beta_n)$ ізоморфні тоді і тільки тоді, коли існує ціле число z таке, що $\alpha_i = \beta_i + z$ для всіх $i = 1, \dots, n$.

Доведення наступних трьох тверджень можна знайти в [12, гл. 6].

Твердження 2.4. З точністю до ізоморфізму існує лише скінченна кількість незвідних A -решіток.

Твердження 2.5. Всі надкільця черепичного порядку A є черепичними порядками. Вони утворюють скінченну нижню напіврешітку.

Твердження 2.6. Незвідна A -решітка є проективним A -модулем тоді і тільки тоді, коли вона містить рівно один максимальний підмодуль.

Позначимо через $M_r(A)$ (відп. $M_l(A)$) частково впорядковану підмножину за включенням

¹ читач не повинен плутати поняття A -решітки і дистрибутивної решітки.

дистрибутивної решітки $S_r(A)$ (відп. $S_l(A)$), що складається з незвідних правих (лівих) проєктивних A -решіток.

Вперше ця частково впорядкована множина з'явилася у [4]. Потім Румп в [19] ввів поняття σ -частково впорядкованої множини для того, щоб дати аксіоматичну характеристику множини $M_r(A)$. Детально ці множини і пов'язані з ними черепичні порядки розглядаються в [9].

Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ – зведений черепичний порядок, що лежить в $M_n(D)$, де D – тіло часток кільця O . В цьому випадку множина $M_r(A)$ будується по матриці показників $\mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})$ наступним чином: елементами $M_r(A)$ є вектор-рядки

$$p_i^k = (\alpha_{i1} + k, \dots, \alpha_{in} + k),$$

де $i = 1, \dots, n$ і $k \in \mathbb{Z}$ – ціле число, причому $p_i^k \leq p_j^l$ тоді і тільки тоді, коли $\alpha_{ij} \leq k - l$.

Множина $M_r(A)$ є зліченною частково впорядкованою множиною, яке є об'єднанням не більш, ніж n лінійно впорядкованих множин $\{p_i^k, k \in \mathbb{Z}\}$, $\{p_2^k, k \in \mathbb{Z}\}, \dots, \{p_n^k, k \in \mathbb{Z}\}$. Нагадаємо, що елементи $s_1, \dots, s_m$ частково впорядкованої множини S утворюють антиланцюг, якщо вони попарно непорівнювані і, що максимальна кількість елементів у антиланцюгах, що лежать в S , називається шириною S і позначається $w(S)$. Це число $w(S) = m$ за теоремою Діауорса скінченне тоді і тільки тоді, коли S є об'єднанням m ланцюгів. Ланцюг – це лінійно впорядкована множина. Отже, ширина $w(M_r(A))$ зведеного черепичного порядку A , що лежить в $M_n(D)$, не перевищує n .

Нехай $X \subseteq M_n(D)$ є ненульовим A -бімодулем. Розглянемо двосторонній пірсівський розклад X :

$$X = \bigoplus_{i,j=1}^n e_{ii} X e_{jj},$$

Зрозуміло, що $e_{ii} X e_{jj} \in O$ -бімодулем, що лежить в D . Якщо для деяких k і m має місце рівність $e_{kk} X e_{mm} = D$, то $X = M_n(D)$. Тому $e_{ii} X e_{jj}$ строго міститься в D для всіх $i, j = 1, \dots, n$. Крім того, всі пірсівські компоненти $X_{ij} = e_{ii} X e_{jj}$ відмінні від нуля. За лемою 2.1, $X_{ij} = e_{ij} \pi^{\delta_{ij}} O$. Таким чином, X є правою і лівою A -решіткою і $X = \bigoplus_{i,j=1}^n e_{ij} \pi^{\delta_{ij}} O$. A -бімодуль X називається дробовим ідеалом черепичного порядку A , і матриця $\mathcal{E}(X) = (\delta_{ij})$ називається матрицею показників X . Дробовий ідеал $I \subseteq M_n(D)$ називається об'єд-

нотним, якщо існує дробовий ідеал I^{-1} такий, що $II^{-1} = I^{-1}I = A$.

Твердження 2.7. Ідеал $\pi A = A\pi$ є оборотним ідеалом черепичного порядку A .

Доведення. Розглянемо дробовий ідеал $\pi^{-1}A = A\pi^{-1}$. Очевидно, $\pi A\pi^{-1}A = A$.

3. Основні леми.

Наступна лема виконується для довільних черепичних порядків. Вона доведена в [19, лема 5.4.] для порядків в сепарабельних алгебрах. Позначимо через $hd_A M$ – гомологічну розмірність A -модуля M .

Лема 3.1. Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ довільний черепичний порядок, що лежить в $M_n(D)$, в I – оборотний двосторонній ідеал A , що лежить в радикалі Джекобсона R черепичного порядку A . Тоді $hd_A M = hd_{A/I} M/MI$ для будь-якої A -решітки M .

Доведення. Для кожної A -решітки M розглянемо проєктивне накриття

$$0 \rightarrow X \rightarrow P \rightarrow M \rightarrow 0$$

з ядром X .

Індуковане відображення $P/PI \rightarrow M/MI$ є епіморфізмом з ядром $(X+PI)/PI \cong X/X \cap PI$. Зрозуміло, що $X \cap PI \supseteq XI$. Так як $I^{-1}I = A$, то $(X \cap PI)I^{-1}I \subseteq (XI^{-1} \cap P)I$. Очевидно, що $XI^{-1} \cap P = X$ в $(XI^{-1} \cap P)I = XI$, звідки $X \cap PI = XI$ і $X/X \cap PI = X/XI$. Таким чином, ми отримуємо точну послідовність A/I -модулів:

$$0 \rightarrow X/XI \rightarrow P/PI \rightarrow M/MI \rightarrow 0.$$

Так як $X + PI \subseteq PR$, то ця послідовність є проєктивним накриттям A/I -модуля M/MI . За лемою Накаями $X/XI = 0$ тоді і тільки тоді, коли $X = 0$. Отже, будь-яка мінімальна проєктивна резольвента M дає мінімальну проєктивну резольвенту M/MI однакової довжини, тобто $hd_A M = hd_{A/I} M/MI$.

Таким чином, вивчення гомологічної розмірності A -решіток M зводиться до вивчення гомологічної розмірності A/I -модулів M/MI .

Ми будемо розглядати частковий випадок, коли $I = \pi A = A\pi$.

Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ є зведеним черепичним порядком. Розглянемо факторкільце $B = A/\pi A$. Якщо $A_A = P_1 \oplus \dots \oplus P_n$ і $P_i = e_{ii} A$ ($i = 1, \dots, n$), то $B_B = \overline{P}_1 \oplus \dots \oplus \overline{P}_n$, де $\overline{P}_i = \overline{e_{ii}} B$ і $\overline{e_{ii}} = e_{ii} + \pi A$ ($i = 1, \dots, n$). Очевидно, що факторкільце B є n^2 -вимірним векторним простором над тілом $T = O/\pi O$, причому розмірності всіх B -модулів $\overline{P}_i$ над тілом T однакові і рівні n .

Наступне твердження доведено в [15] для скінченновимірних алгебр C над полем k . Через $\dim_k M$ позначається розмірність векторного простору M над полем k .

Нехай $C_C = P_1^{n_1} \oplus \dots \oplus P_s^{n_s}$ – розклад правого регулярного представлення C в пряму суму головних C -модулів (тобто нерозкладних циклічних проєктивних C -модулів), $d_i = \dim_k P_i$ ($i = 1, \dots, s$), $d = (d_1, \dots, d_s)$ – найбільший спільний дільник чисел $d_1, \dots, d_s$.

Твердження 3.2. Нехай $d \neq 1$ і M – скінченнопороджений C -модуль, такий, що $\dim_k M$ не ділиться на d . Тоді $hd_C M = \infty$.

Доведення. Якщо $d \neq 1$, то $\dim_k P$ ділиться на d для будь-якого скінченнопородженого проєктивного C -модуля $P = \bigoplus_{j=1}^s P_j^{m_j}$. Припустимо, що C -модуль M задовольняє умовам лема і $hd_C M = t$. Тоді існує точна послідовність:

$$0 \longrightarrow P(t) \xrightarrow{\delta_t} P(t-1) \xrightarrow{\delta_{t-1}} \dots \longrightarrow$$

$$\longrightarrow P(1) \xrightarrow{\delta_1} P(0) \xrightarrow{\delta_0} M \longrightarrow 0$$

де всі проєктивні C -модулі $P^{(0)}, P^{(1)}, \dots, P^{(t)}$ є скінченнопородженими проєктивними C -модулями. Справедлива рівність $\dim_k M = \sum_{i=0}^t (-1)^i \dim_k P^{(i)}$, звідки випливає, що права частина цієї рівності ділиться на d , що суперечить тому, що d не ділить $\dim_k M$. Таким чином, $hd_C M = \infty$.

Зазначимо, що це твердження можна використати для вивчення гомологічної розмірності A -решіток над черепичними порядками.

Нехай M є A -решіткою над зведеним черепичним порядком $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$. Тоді $M/M\pi$ є скінченновимірним векторним простором над тілом $T = O/\pi O$, а $\dim_T \bar{P}_i = n$ для всіх нерозкладних циклічних проєктивних B -модулів $\bar{P}_i$ ($i = 1, \dots, n$). Тому, якщо $\dim_T M/M\pi$ не ділиться на n , то за попереднім твердженням $hd_{A/A\pi} M/M\pi = \infty$ і за лемою 3.1. $hd_A M = \infty$.

Наслідок 3.3. Нехай M – незвідна A -решітка. Якщо B -модуль $\bar{M} = M/M\pi$ розкладається, то $gl.\dim A = \infty$.

Доведення. Зазначимо, що $\dim_T \bar{M} = n$. Тому, якщо $\bar{M} = \bar{M}_1 \oplus \bar{M}_2$ – розклад $\bar{M}$ в пряму суму B -модулів, то $\dim_T \bar{M}_1 < n$ і $\dim_T \bar{M}_2 < n$, звідки $hd_B \bar{M}_1 = \infty$ і $hd_B \bar{M}_2 = \infty$, тобто $hd_B \bar{M} = \infty$. Отже, $hd_A M = \infty$ за лемою 3.1, звідки випливає, що $gl.\dim A = \infty$.

4. Основна теорема.

Позначимо через $U_{k,m}$ прямокутну $k \times m$ -матрицю, елементами якої є одиниці:

$$U = \left[\begin{array}{ccc} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{array} \right]_m^k.$$

Твердження 4.1. Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ є зведеним черепичним порядком з канонічною матрицею показників $\mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})$. Припустимо, що матриця $\mathcal{E}(A)$ має наступний блочний вигляд:

$$\mathcal{E}(A) = \left(\begin{array}{c|c} \mathcal{E}_{11} & \mathcal{E}_{12} \\ \hline \mathcal{E}_{21} & \mathcal{E}_{22} \end{array} \right)_{n-k}^k$$

де $\mathcal{E}_{21} \geq 2U_{n-k,k}$. Тоді $gl.\dim A = \infty$.

Доведення. Розглянемо незвідну A -решітку M з O -базисом $\pi e_1, \dots, \pi e_k, e_{k+1}, \dots, e_n$. Тоді B -модуль $\bar{M} = M/M\pi$ розкладається в пряму суму двох B -підмодулів з T -базисами $\bar{\pi}e_1, \dots, \bar{\pi}e_k$ і $\bar{e}_{k+1}, \dots, \bar{e}_n$, де $\bar{\pi}e_1 = \pi e_1 + \pi M, \dots, \bar{\pi}e_k = \pi e_k + \pi M$ і $\bar{e}_{k+1} = e_{k+1} + \pi M, \dots, \bar{e}_n = e_n + \pi M$. За наслідком 3.3. $gl.\dim A = \infty$.

Для зручності твердження 4.1. будемо називати лемою про прямокутник.

Лема 4.2. Якщо $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ є зведеним черепичним порядком з канонічною матрицею показників $\mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})$ скінченної глобальної розмірності, то $\alpha_{21} = 1$.

Доведення. В силу зведених черепичного порядку A всі числа $\alpha_{21} \leq \alpha_{31} \leq \dots \leq \alpha_{n1}$ є натуральними. Якщо $\alpha_{21} \geq 2$, то за лемою про прямокутник при $k = 1$ отримуємо, що $gl.\dim A = \infty$. Отже, $\alpha_{21} = 1$.

Тепер перейдемо до доведення основної теореми про черепичні порядки скінченної глобальної розмірності.

Теорема. Нехай $A = \{O, \mathcal{E}(A) = (\alpha_{ij})\}$ зведений черепичний порядок з канонічною матрицею показників і скінченною глобальною розмірністю. Тоді $0 \leq \alpha_{ij} \leq i - 1$ для всіх $i, j = 1, \dots, n$, тобто існує лише скінченна кількість, з точністю до ізоморфізму, черепичних порядків скінченної глобальної розмірності, що лежать в $M_n(D)$.

Доведення. Нехай $1 \leq k \leq n - 1$. Розгляне-

$$\mathcal{E}(A) = \left(\begin{array}{c|c} \mathcal{E}_{11} & \mathcal{E}_{12} \\ \hline \mathcal{E}_{21} & \mathcal{E}_{22} \end{array} \right) \begin{matrix} k \\ n-k \end{matrix}$$

За лемою про прямокутник, в матриці $\mathcal{E}_{21}$ є елемент $\alpha_{sj} \leq 1$, де $s \geq k+1$ і $j \leq k$. З того, що матриця $\mathcal{E}(A)$ є канонічною, отримуємо:

$$\alpha_{k1} \leq \alpha_{k+1,1} \leq \alpha_{s1} \leq \alpha_{sj} + \alpha_{j1} \leq 1 + \alpha_{k1}.$$

Таким чином, $0 \leq \alpha_{k+1,1} - \alpha_{k1} \leq 1$. За лемою 4.2. $\alpha_{21} = 1$ і $\alpha_{k1} \leq k-1$ для всіх k і $\alpha_{n1} \leq n-1$. З нерівності $\alpha_{ij} \leq \alpha_{i1} + \alpha_{1j}$ випливає, що $\alpha_{ij} \leq \alpha_{i1} \leq i-1$ для всіх $i, j = 1, \dots, n$. Теорему доведено.

Наша робота була частково підтримана фондами ДФФД і РФФІ, проект №Ф28.1/026.

Список використаних джерел

1. Данлыев Х.М. Гомологическая размерность полумаксимальных колец. - Известия академии наук Туркменской ССР, серия физ-тех, хем., геол. наук - 1989. - №4. - С. 83-86.
2. Завадский А.Г. Строение порядков, над которыми все представления вполне разложимы. - Математические заметки. - 1973. - 13. - С. 325-335.
3. Завадский А.Г., Кириченко В.В. Модули без кручения над первичными кольцами. - Зап. науч. семинара ЛОМИ. - 1976. - т.57. - С. 100-116.
4. Завадский А.Г., Кириченко В.В. Полумаксимальные кольца конечного типа. - Мат. сборник. - 1977. - т.103. - С. 323-345.
5. Кириченко В.В., Хибица М.А. Полусовершенные полудистрибутивные кольца. // Бесконечные группы и примыкающие алгебраические структуры. - Киев: Ин-т математики - 1993. - С. 457-480.
6. Fujita H. Tiled orders of finite global dimension. - Trans. Amer. Math. Soc. - 1990. - vol.322. - P. 329-342.
7. Fujita H. Erratum to "Tiled orders of finite global dimension". - Trans. Amer. Math. Soc. - 1991. - vol.327, No.2. - P. 919-920.
8. Fujita H. Neat idempotents and tiled orders having large global dimension. - J. Algebra. - 2002. - vol.256. - P. 194-210.
9. Fujita H., Oshima A. Tiled order of finite global dimension with no neat primitive idempotent. - Communications in algebra. - 2009. - vol.37, No.2. - P. 575-593.
10. Gustafson W.H. Global dimension in serial rings. - J. Algebra. - 1985. - №97. - P. 14-16.
11. Hazewinkel M., Gubareni N., Kirichenko V.V. Algebras, Rings and Modules, Vol 1. - Kluwer Academic Publishers, 2004. - 380 c.
12. Hazewinkel M., Gubareni N., Kirichenko V.V. Algebras, Rings and Modules, Vol 2. - Kluwer Academic Publishers, 2007. - 400 c.
13. Jansen W.S., Odental C.J. A tiled order having large global dimension. - J. Algebra. - 1997. - vol.192. - P. 572-591.
14. Jategaonkar V.A. Global dimension of triangular orders over a discrete valuation ring. - Proc. Amer. Math. Soc. - 1973. - vol.38. - P. 8-14.
15. Jategaonkar V.A. Global dimension of tiled orders over a discrete valuation ring. - Trans. Amer. Math. Soc. - 1974. - vol.196. - P. 313-330.
16. Kirkman E. and Kuzmanovich J. Global dimensions of a class of tiled orders. - J. Algebra. - 1989. - №127. - P. 57-92.
17. Roggenkamp K.W. Some examples of orders of global dimension two. - Math. Z. - 1977. - vol.154. - P. 225-238.
18. Roggenkamp K.W. Orders of global dimension two. - Math. Z. - 1978. - vol.160. - P. 63-67.
19. Rump W. Discrete posets, cell complexes, and the global dimension of tiled orders. - Communications in algebra - 1996. - 24(1). - P. 55-107.
20. Tarsy R.B. Global dimension of orders. - Trans. Amer. Math. Soc. - 1970. - vol.151. - P. 335-340.
21. Tarsy R.B. Global dimension of triangular orders. - Proc. Amer. Math. Soc. - 1971. - vol.28(2). - P. 423-426.
22. Wiedemann A., Roggenkamp K.W. Path orders of global dimension two. - J. Algebra. - 1983. - vol.80. - P. 113-133.

Надійшла до редколегії 14.08.2009

УДК 512.54

В.В. Ковдриш

Вербальні підгрупи груп унітрикутних
матриць над кільцями лишків

У даній статті розглядаються деякі вербальні підгрупи груп унітрикутних матриць над кільцями лишків, а також встановлюється ширина цих підгруп.

Ключові слова: група, вербальна підгрупа, кільце, ряд, ширина.

E-mail: volodymyrkovdrysh@yandex.ua

Статтю представив доктор фіз.-мат. наук В.В.Кириченко.

1 Вступ

Дослідження будови і властивостей вербальних підгруп в різних групах складає важливий напрямок сучасної теорії груп. Це пов'язано, зокрема, з тим, що за допомогою вербальних підгруп можна оцінювати тотожності в факторгрупах даної групи, а також з тим, що вербальні підгрупи "добре себе поведуть" при переході до індуктивних та проєктивних границь групи, що використовується в сучасній K -теорії і теорії проскінченних груп. Всі вербальні підгрупи деякої групи утворюють ґратку відносно включення, яка містить найбільший (сама група) і найменший (одичина підгрупа) елементи. Більш-менш повний опис таких ґраток відомий лише для порівняно небагатьох груп. Серед них — унітрикутні групи над полем нульової характеристики, для яких ця ґратка охарактеризована повністю [4]. В наших попередніх працях [2]–[3] досліджувались вербальні підгрупи групи унітрикутних матриць над кільцем цілих чисел $\mathbb{Z}$. Метою даної роботи є вивчення будови вербальних підгруп групи унітрикутних матриць над кільцем лишків за фіксованим модулем. Ми знаходимо ширину членів нижнього центрального ряду, ряду комутантів і енгелевого ряду цієї групи та характеризуємо вербальні підгрупи, що породжені словами вигляду x^k , $k \geq 2$.

V.V. Kovdrysh

Verbal subgroups in the group of
unitriangular matrices over rings of
congruence

In this paper, we describe the verbal subgroups of group of unitriangular matrices and find the width of these subgroups.

Key Words: group, verbal subgroup, ring, series, width.

2 Визначення та найпростіші властивості вербальних підгруп

Нехай $X = \{x_1, x_2, x_3, \dots\}$ — нескінченний алфавіт, а G — деяка група. Під словом в алфавіті X розуміється порожня або скінченна послідовність символів з множини $X \cup X^{-1}$, де $X^{-1} = \{x_i^{-1} | x_i \in X\}$. Значення слів з V в групі G породжують підгрупу

$$V(G) = \langle v(g_1, \dots, g_{n(v)}) | v \in V, g \in G \rangle$$

яка називається вербальною підгрупою групи G , що задається множиною слів V .

Прикладами вербальних підгруп в групах є:

- члени нижнього центрального ряду $\gamma_i(G)$: вербальна підгрупа $\gamma_i(G)$ задається словом $[x_1, x_2, \dots, x_{i+1}]$, яке називається простим лівонормованим комутатором довжини $i+1$;
- члени ряду комутантів $G^{(i)}$: вербальна підгрупа $G^{(i)}$ — i -та похідна групи G визначається груповим словом $w_i(x_1, x_2, \dots, x_{2^i})$, причому, слова w_i ($i \in \mathbb{N}$) задаються рекурентно рівностями

$$w_1(x_1, x_2) = [x_1, x_2],$$

$$\begin{aligned} w_{i+1}(x_1, x_2, \dots, x_{2^{i+1}}) = \\ = [w_i(x_1, x_2, \dots, x_{2^i}), \\ w_i(x_{2^i+1}, x_{2^i+2}, \dots, x_{2^{i+1}})] \end{aligned}$$

с) члени енгелевого ряду $\varepsilon_i(G)$: вербальна підгрупа $\varepsilon_i(G)$ задається словом вигляду $[x, \underbrace{y, \dots, y}_i] = [x, y]$;

d) підгрупи k -тих степенів: вербальна підгрупа G^k породжується словом x^k .

Лема 1. Нехай G – довільна група, A і B – вербальні підгрупи групи G , тоді підгрупа $A \cap B$ також є вербальною в групі G .

Справді, якщо підгрупа A задається множиною слів V , а підгрупа B – множиною слів W , то підгрупа $A \cap B$ задається їх перетином $V \cap W$.

Для довільних вербальних підгруп A, B групи G підгрупа $\langle A, B \rangle$, взагалі кажучи, не буде вербальною. Але вона міститься [6] в єдиній мінімальній, за виключенням вербальних підгруп групи G , яку називають об'єднанням A та B і позначають $A \cup B$.

Теорема 2.1. Всі вербальні підгрупи групи G відносно так визначених операцій об'єднання $\cup$ і перетину $\cap$ утворюють ґратку.

Ґратка вербальних підгруп даної групи містить найбільший (вся група) і найменший (одична підгрупа) елементи.

Нехай φ – епіморфізм групи G на групу H , $v(x_1, \dots, x_n)$ – деяке групове слово. Тоді для довільних елементів $g_1, g_2, \dots, g_n \in G$ має місце рівність

$$\begin{aligned} \varphi(v(g_1, g_2, \dots, g_n)) &= \\ &= v(\varphi(g_1), \varphi(g_2), \dots, \varphi(g_n)). \end{aligned} \quad (1)$$

З даної рівності дістаємо таке твердження

Лема 2. Нехай $\varphi: G \rightarrow H$ – епіморфізм, V – довільна множина групових слів. Має місце рівність

$$\varphi(V(G)) = V(H).$$

Нагадаємо, що відображення φ ґратки Γ на ґратку Γ' називається гомоморфізмом ґраток, якщо для довільних елементів $x, y \in \Gamma$ мають місце рівності:

$$\begin{aligned} \varphi(x \cup y) &= \varphi(x) \cup \varphi(y) \\ \varphi(x \cap y) &= \varphi(x) \cap \varphi(y) \end{aligned}$$

З леми 2 дістаємо таке важливе твердження для ґраток вербальних підгруп в групах.

Теорема 2.2. Якщо група H є гомоморфним образом групи G , то ґратка вербальних підгруп групи H є гомоморфним образом ґратки вербальних підгруп групи G .

Доведення. Нехай $\Gamma_V(G)$ – ґратка вербальних підгруп групи G , а $\Gamma_V(H)$ – ґратка вербальних підгруп групи H і нехай φ – гомоморфізм групи G на групу H . Задамо відображення f ґратки $\Gamma_V(G)$ на ґратку $\Gamma_V(H)$ таким чином: для довільної вербальної підгрупи $A \in \Gamma_V(G)$ покладемо

$$f(A) = \varphi(A).$$

Оскільки φ – гомоморфізм на групу H , то f є відображенням "на". Властивості ґраткового гомоморфізму перевіряються безпосередньо. $\square$

3 Група унітрикутних матриць над $\mathbb{Z}_m$

Нехай $m \geq 2$ – фіксоване натуральне число, $\mathbb{Z}_m$ – кільце лишків за модулем m , $GL_n(\mathbb{Z}_m)$ – повна лінійна група порядку n над $\mathbb{Z}_m$. Добре відомо, що порядок цієї групи визначається таким чином

Лема 3. Нехай, $[m, k]$ – означає число різних способів вибрати k чисел менших за m , чий найбільший спільний дільник буде взаємно простий з m . Має місце рівність

$$\begin{aligned} |GL_n(\mathbb{Z}_m)| &= [m, n]m^{n-1}[m, n-1]m^{n-2} \times \\ &\times \dots [m, 2]m[m, 1] = \\ &= \prod_{k=1}^n [m, k]m^{k-1} \end{aligned} \quad (2)$$

Доведення дав., наприклад [5]

Зокрема, якщо $m = p^s$, то формула (2) спроститься таким чином (див. [1], ст. 105):

$$|GL_n(\mathbb{Z}_{p^s})| = \prod_{i=0}^{n-1} ((p^s)^n - p^{s(n-i)})$$

Символом $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ позначатимемо групу (верхів) унітрикутних матриць над кільцем $\mathbb{Z}_m$, тобто, матриць вигляду

$$\begin{pmatrix} 1 & * & \dots & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & * \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

де на місцях заповнених знаком $*$ можуть стояти довільні елементи з кільця $\mathbb{Z}_m$. З самого визначення випливає таке твердження

Лема 4. Для довільних m і n має місце рівність

$$|UT_n(\mathbb{Z}_m)| = m^{\frac{(n-1)n}{2}}.$$

Символом $UT_n^k(\mathbb{Z}_m)$, ($k = 0, 1, 2, \dots$) позначимо підгрупу групи $UT_n(\mathbb{Z}_m)$, яка складається з матриць вигляду

$$\begin{pmatrix} 1 & \overbrace{0 \ 0 \ \dots \ 0}^k & * & * & \dots & * & * \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & * & \dots & * & * \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & * & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Лема 5. k -й член нижнього центрального ряду групи $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ збігається з підгрупою $UT_n^k(\mathbb{Z}_m)$.

Звідси дістаємо, що $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ є нільпотентною групою класу n .

Лема 6. k -й комутант $UT_n^k(\mathbb{Z}_m)$ групи $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ збігається з $2^k - 1$ -м членом нижнього центрального ряду групи $UT_n(\mathbb{Z}_m)$. Зокрема група $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ є розв'язною довжини $\lceil \log_2 n \rceil + 1$.

Лема 5 і 6 доводяться стандартними підрахунками з комутаторами індукцією за числом k .

4 Ширина основних вербальних підгруп в унітрикутній групі

Як відомо, шириною вербальної підгрупи $V(G)$ групи G називається таке найменше натуральне число k , що кожен елемент із $V(G)$ записується у вигляді добутку не більше ніж k значень слів із V в групі G . Якщо такого числа не існує, то ширина підгрупи $V(G)$ вважається рівною ∞ .

Будемо говорити, що натуральне число k називається допустимим для групи $UT_n(\mathbb{Z})$, якщо воно задовольняє систему конгруенцій

$$\begin{cases} k \equiv 1 \pmod{2}, \\ k \equiv 1, 2 \pmod{3}, \\ \dots \\ k \equiv 1, 2, \dots, (n-2) \pmod{(n-1)}, \end{cases}$$

де запис $x \equiv y_1, y_2, \dots, y_i \pmod{z}$ рівносильний сукупності

$$\begin{cases} x \equiv y_1 \pmod{z}, \\ x \equiv y_2 \pmod{z}, \\ \dots \\ x \equiv y_i \pmod{z}. \end{cases}$$

В роботах [2]-[3] нами доведено такі твердження.

Теорема 4.1. Нехай $UT_n(\mathbb{Z})$ — група унітрикутних матриць розмірності n над кільцем цілих чисел. Тоді:

- 1) кожен член нижнього центрального ряду групи $UT_n(\mathbb{Z})$ має ширину 1;
- 2) кожна потідна цієї групи (член ряду комутантів) має ширину 1;
- 3) вербальна підгрупа групи $UT_n(\mathbb{Z})$, що породжена словом x^k , де k — допустиме число, має ширину 1.

Лема 7. Нехай $\varphi: G \rightarrow H$ — епіморфізм групи G на групу H , $V(G)$ — вербальна підгрупа групи G . Якщо ширина вербальної підгрупи $V(G)$ дорівнює k , то ширина вербальної підгрупи $V(H)$ не перевищує k .

Доведення. За лемою 2 маємо

$$\varphi(V(G)) = V(H).$$

нехай a — довільний елемент із $V(H)$, тоді існує елемент $b \in V(G)$ такий, що $b = \varphi(a)$. Елемент b є добутком не більше ніж k значень слів із V в групі G : $b = v_1 v_2 \dots v_l$, $l \leq k$, де v_i — значення слів із V в групі G ($1 \leq i \leq l$). З рівності (1) дістаємо, що образи $\varphi(v_i)$ ($1 \leq i \leq l$) також будуть значеннями слів із V в G . А тому, елемент $a \in V(H)$ розкладається не більше ніж на l множників такого типу. Оскільки $l \leq k$ і елемент a вибрано довільно, то звідси маємо, що ширина $V(H)$ не перевищує k . $\square$

Теорема 4.2. При довільному натуральному $n \geq 2$ для групи $UT_n(\mathbb{Z}_m)$, $m \geq 2$, мають місце такі твердження

- 1) ширина кожного члена нижнього центрального ряду дорівнює 1.
- 2) ширина членів ряду комутантів дорівнює 1.

3) ширина вербальних підгруп, що задаються словами вигляду x^s , де s — допустиме число, дорівнює 1.

Доведення. Нехай φ — природний гомоморфізм $\mathbb{Z}$ на $\mathbb{Z}_m$, тобто, для довільного числа $z \in \mathbb{Z}$ $\varphi(z) = \bar{z}$ є лишком z за модулем m . Гомоморфізм φ визначає природний епіморфізм $\bar{\varphi}$ групи $GL_n(\mathbb{Z})$ на групу $GL_n(\mathbb{Z}_m)$, який задається рівністю

$$\bar{\varphi}(\|a_{ij}\|_{i,j=1}^n) = \|\bar{a}_{ij}\|_{i,j=1}^n$$

для довільної матриці $\|a_{ij}\|_{i,j=1}^n$ із $GL_n(\mathbb{Z})$. При гомоморфізмі $\bar{\varphi}$ підгрупа $UT_n(\mathbb{Z})$ відображається на підгрупу $UT_n(\mathbb{Z}_m)$. Згідно з лемою 7 ширина кожної вербальної підгрупи в групі $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ не перевищує ширини відповідної вербальної підгрупи (яка визначається тим же набором слів) в групі $UT_n(\mathbb{Z})$. Оскільки згідно з теоремою 4.1 ширина вербальних підгруп 1), 2), 3) в групі $UT_n(\mathbb{Z})$ дорівнює 1, то за лемою 7 в групі $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ ширина відповідної вербальної підгрупи також не перевищує 1, а отже, дорівнює 1. $\square$

Лема 8. Нехай $\varphi: G \rightarrow H$ — епіморфізм групи G на групу H . Якщо для деяких множин слів V_1, V_2 має місце рівність $V_1(G) = V_2(G)$, то справджується рівність $V_1(H) = V_2(H)$.

Доведення. Оскільки φ — гомоморфізм, то $\varphi(V_1(G)) = V_1(\varphi(G)) = V_1(H)$, а $\varphi(V_2(G)) = V_2(\varphi(G)) = V_2(H)$. З рівності $V_1(G) = V_2(G)$ дістаємо $\varphi(V_1(G)) = \varphi(V_2(G))$, тобто $V_1(H) = V_2(H)$. $\square$

Лема 9. При довільному натуральному $k = 1, 2, \dots, n$ k -тий член енгелевого ряду збігається з k -тим членом n -го нижнього центрального ряду.

Доведення див. [3].

Теорема 4.3. Нехай $m \geq 2$ — довільне натуральне число. Тоді

1) при довільному натуральному k k -ий член енгелевого ряду групи $UT_n(\mathbb{Z}_m)$ збігається з k -м членом n -го нижнього центрального ряду;

2) ширина вербальних підгруп $e_k(UT_n(\mathbb{Z}_m))$ дорівнює 1.

Доведення. 1) випливає з лем 8 і 9. 2) випливає з лем 7. $\square$

5 Висновки

Отже, в роботі вивчено будови вербальних підгруп групи унітрикутних матриць над кільцем лишків за фіксованим модулем. Знайдено ширину членів нижнього центрального ряду, ряду комутантів і енгелевого ряду цієї групи та охарактеризовано вербальні підгрупи, що породжені словами вигляду x^k , $k \geq 2$.

Список використаних джерел

1. Каргаполов М.И., Мерзляков Ю.И. Основы теории групп. — М.: Наука, 1982. — 288с
2. Ковдриш В.В. Ширини членів нижнього центрального ряду групи верхніх унітрикутних матриць над комутативним кільцем з одиницею // Науковий вісник Чернівецького університету. — 2006. — Випуск 314-315. — С. 91-93.
3. Ковдриш В.В. Ширини членів ряду комутантів та членів енгелевого ряду групи $UT_n(\mathbb{Z})$, $n \geq 3$ // Науковий вісник Чернівецького університету. — 2008. — Випуск 421. — С. 41-45.
4. Bier A. Verbal subgroups in the group of triangular matrices over field of characteristic 0 // Journal of Algebra. — 2009. — v. 321(2). — p. 483-494.
5. Jordan C. Traité des substitutions et des équations algébriques. — Paris, 1870. — 667p.
6. Нейман Х. Многообразия групп. — М.: Мир, 1969. — 264с.

Надійшла до редколегії .0.2009

УДК 519.21

О.В.Полосьмак, аспірант

Умови та швидкість рівномірної
збіжності розкладів процесів з $L_2(\Omega)$ по
вейвлетам Баттл-Лемарі

Досліджено умови та знайдено швидкість
рівномірної збіжності за ймовірністю на
 $[0, T]$ розкладів по вейвлетам Баттл-Лемарі
випадкових процесів $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$, з
 $EX(t) = 0$, $E|X(t)|^2 < \infty$.

Ключові слова: випадковий процес,
вейвлет-розклад, збіжність за ймовірністю,
вейвлети Баттл-Лемарі.

E-mails: olgapolosmak@yandex.ru

Статтю представив доктор фіз.-мат. наук Козаченко Ю.В.

1 Вступ

Вейвлет аналіз почав бурхливо розвиватись на
початку 90-х років 20-го сторіччя. Це нова га-
лузь математики з цікавими проблемами та за-
дачами, багато з яких до цього часу не ви-
рішені. Вейвлет аналіз застосовується в бага-
тьох областях математики, зокрема, математи-
чній статистиці та теорії випадкових процесів.
Таким чином, методи, основані на вейвлетах,
розвиваються в таких статистичних напрямках,
як регресійний аналіз, оцінювання щільностей
та функцій, факторний аналіз, моделювання та
прогнозування, у просторовій статистиці. Та-
кож при розв'язуванні багатьох задач виявило-
ся, що деякі методи, основані на теорії вейвле-
тів є більш ефективними, ніж інші засоби теорії
ймовірностей.

У даній роботі розглянуто випадковий про-
цес $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ з $L_2(\Omega)$, досліджено його
розклад по вейвлетам Баттл-Лемарі, тобто:

$$X(t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \xi_{0k} \phi_{0k}(t) + \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \eta_{jk} \psi_{jk}(t), \quad (1)$$

де ϕ, ψ – вейвлети Баттл-Лемарі.

Отримано умови, за яких це зображення
збігається рівномірно за ймовірністю до випад-
кового процесу $\tilde{X}(t)$.

O.V. Polosmak, PhD student.

Rate of uniform convergence for
expansions of random processes from
 $L_2(\Omega)$ on Battle-Lemarie wavelets

New results on the rate of uniform con-
vergence in probability on $[0, T]$ for Battle-
Lemarie wavelet decomposition of random pro-
cess $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$, with $EX(t) = 0$,
 $E|X(t)|^2 < \infty$ are given.

Key Words: random process; wavelet rep-
resentation; convergence in probability, Battle-
Lemarie wavelets.

Робота складається з чотирьох розділів.
Другий розділ містить необхідні відомості з
вейвлет аналізу та теорему, яка дає умови рів-
номірної збіжності розкладу (1) у загальному
випадку. У третьому розділі отримано умови
для рівномірної збіжності за ймовірністю вейв-
лет розкладів по вейвлетах Баттл-Лемарі ви-
падкових процесів з $L_2(\Omega)$. У четвертому роз-
ділі підраховано швидкість збіжності вейвлет
розкладів по вейвлетах Баттл-Лемарі порядку
4.

2 Вейвлет-зображення випадкових про- цесів

Нехай $\phi = \{\phi(x), x \in \mathbb{R}\}$ – функції з простору
 $L_2(\mathbb{R})$ та $\hat{\phi}(y)$ – перетворення Фур'є ϕ :

$$\hat{\phi}(y) = \int_{\mathbb{R}} e^{-iyx} \phi(x) dx. \quad (2)$$

Припустимо, що виконуються наступні умови:

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} |\hat{\phi}(y + 2\pi k)|^2 = 1$$

майже скрізь.

Нехай існує така 2π -періодична функція
 $m_0(x) \in L_2([0, 2\pi])$, що

$$\hat{\phi}(y) = m_0[y/2] \hat{\phi}[y/2],$$

$\hat{\phi}(0) \neq 0$ та функція $\hat{\phi}(y)$ неперервні в 0. У цьому випадку функція $\phi(x)$ називається f -вейвлетом.

Нехай $\psi(x)$ - обернене перетворення Фур'є до функції:

$$\hat{\psi}(y) = m_0 \left(\frac{y}{2} + \pi \right) \cdot \exp \left\{ -i \frac{y}{2} \right\} \cdot \hat{\phi} \left(\frac{y}{2} \right).$$

Функція

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{ixy} \hat{\psi}(y) dy.$$

називається m -вейвлетом.

Позначимо:

$$\phi_{jk}(x) = 2^{j/2} \phi(2^j x - k);$$

$$\psi_{jk}(x) = 2^{j/2} \psi(2^j x - k), j \in \mathbb{Z}, k \in \mathbb{Z}.$$

Означення 2.1. [3] Нехай ϕ - це f -вейвлет. Кажуть, що для ϕ виконується припущення S , якщо існує функція $\Phi = \{\Phi(x), x \geq 0\}$ така, що $\Phi(0) < \infty$, $\Phi(x)$ спадає при $x \geq 0$, $|\phi(x)| \leq \Phi(|x|)$ майже скрізь та

$$\int_{\mathbb{R}} \Phi(|x|) dx < \infty.$$

Нехай $\{\Omega, \mathcal{B}, P\}$ - стандартний ймовірнісний простір, $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ - випадковий процес, $EX(t) = 0$. Розглянемо вейвлет зображення випадкового процесу $X(t)$, тобто:

$$X(t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \xi_{0k} \phi_{0k}(t) + \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \eta_{jk} \psi_{jk}(t). \quad (3)$$

де інтеграли

$$\xi_{0k} = \int_{\mathbb{R}} X(t) \overline{\phi_{0k}(t)} dt, \eta_{jk} = \int_{\mathbb{R}} X(t) \overline{\psi_{jk}(t)} dt$$

будуть визначені як інтеграли в середньому квадратичному.

При доведенні рівномірної збіжності вейвлет розкладу (3) будемо розглядати таке наближення:

$$X_{n,k_j}(t) = \sum_{|k| \leq k_0} \xi_{0k} \phi_{0k}(t) + \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{|k| \leq k_j} \eta_{jk} \psi_{jk}(t), \quad (4)$$

У роботі [4] доведено Теорему 2.1, в якій одержано умови, за яких має місце рівномірна збіжність за ймовірністю вейвлет зображення для довільної системи вейвлетів. Наведемо її.

Теорема 2.1. Нехай $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ - центрований випадковий процес з неперервною коваріаційною функцією, такою, що існує $f(t, \cdot) \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ і

$$R(t, s) = \int_{\mathbb{R}} f(t, \lambda) \overline{f(s, \lambda)} d\lambda.$$

Нехай

$$\int_{\mathbb{R}} E|X(t)|^2 dt < \infty.$$

Нехай для f -вейвлету ϕ та m -вейвлету ψ , виконуються наступні умови:

- 1) $\exists \hat{\psi}^{(k+1)}(u), \hat{\psi}^{(k)}(0) = 0, k = \overline{0, 2};$
- 2) $\exists c_{\phi} := \sup_u |\hat{\phi}(u)| < \infty, c_{\phi'}, c_{\psi(x)} < \infty;$
- 3) $\hat{\phi}(u) \rightarrow 0, u \rightarrow \pm\infty, \hat{\psi}(u) \rightarrow 0, u \rightarrow \pm\infty;$
- 4) $\forall 1/2 < \beta < 1:$

$$\exists \int_{\mathbb{R}} |\hat{\phi}(u)| |u|^{\beta} du < \infty, \int_{\mathbb{R}} |\hat{\phi}'(u)| |u|^{\beta} du < \infty;$$

$$\exists \int_{\mathbb{R}} |\hat{\psi}(u)| |u|^{\beta} du < \infty, \int_{\mathbb{R}} |\hat{\psi}'(u)| |u|^{\beta} du < \infty,$$

$$5) \exists \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\partial^k \hat{f}(z, \lambda)}{\partial z^k} \right|^2 d\lambda \right)^{1/2} |z|^p dz < \infty,$$

$$k = 0, 1, p = 0, 2, 3;$$

$$6) |\hat{f}(z, \lambda)| < a < \infty.$$

Тоді $X_{n,k_j}(t) \rightarrow X(t)$ при $n \rightarrow \infty, k_j \rightarrow \infty, \forall j = 0, 1, \dots$ рівномірно за ймовірністю на кожному інтервалі $[0, T]$.

3 Умови рівномірної збіжності розкладів процесів з $L_2(\Omega)$ по вейвлетам Баттл-Лемарі.

Вейвлети, що породжуються В-сплайнами $\psi_m(x)$, називаються вейвлетами Баттл-Лемарі (Battle-Lemarie) порядку m [9]. Нехай $\hat{\phi}_m(y), \hat{\psi}_m(y)$ - перетворення Фур'є для функцій $\phi_m(y), \psi_m(y)$ відповідно. Тоді вирази для $\hat{\phi}_m(y), \hat{\psi}_m(y)$ задаються такими формулами:

$$\hat{\phi}_m(y) = \frac{e^{-i \frac{y}{2}}}{y^{m+1} \sqrt{S_{2m+2}(y)}}, \quad (5)$$

де

$$S_n(y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(y + 2k\pi)^n}, \quad (6)$$

і $\varepsilon = 1$, якщо m парне, та $\varepsilon = 0$, якщо m непарне.

$$\hat{\psi}_m(y) = \frac{e^{-i \frac{y}{2}}}{y^{m+1}} \sqrt{\frac{S_{2m+2}(\frac{y}{2} + \pi)}{S_{2m+2}(y) S_{2m+2}(\frac{y}{2})}}, \quad (7)$$

Для сплайнів степеня m $\psi(x)$ має $m+1$ нульових моментів [9], а отже, $\hat{\psi}^{(k)}(0) = 0$, $0 \leq k \leq m+1$. Вейвлет $\psi(x)$ є $m-1$ раз неперервно диференційовний [9].

Для перевірки виконання умови 4) Теорема 2.1 доведемо наступну лему.

Лема 1. Нехай $\phi(x)$ - така функція, що

$$\int_{\mathbb{R}} |\phi(x)| dx < \infty, \quad \phi(x) \rightarrow 0, x \rightarrow \pm\infty, \quad (8)$$

нехай існує похідна $\phi'(x)$, така що

$$\int_{\mathbb{R}} |\phi'(x)|^\gamma dx < \infty \quad (9)$$

для деякого $0 < \gamma < 1$.

$$|\phi'(x) - \phi'(y)| \leq \sigma(|x - y|), \quad (10)$$

де $\sigma = \{\sigma(u), u > 0\}$ - така монотонно зростаюча функція, що $\sigma(0) = 0$.

Тоді

$$\int_{\mathbb{R}} |\hat{\phi}(y)| c(y) dy < \infty, \quad (11)$$

де $\hat{\phi}(y) = \int_{\mathbb{R}} e^{-iyx} \phi(x) dx$, а $c = \{c(y), y \in \mathbb{R}\}$, $c(y) > 0$ така функція, що

$$\int_1^\infty \frac{1}{|y|} \left(\sigma\left(\frac{\pi}{y}\right) \right)^{1-\gamma} c(y) dy < \infty. \quad (12)$$

Доведення. $|\hat{\phi}(y)| \leq \int_{\mathbb{R}} |\phi(x)| dx < \infty$.

При $|y| > 0$, інтегруючи по частинам, маємо:

$$\hat{\phi}(y) = \frac{1}{iy} \int_{\mathbb{R}} e^{-iyx} \phi'(x) dx,$$

крім того

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(y) &= \frac{1}{iy} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\left(x+\frac{\pi}{y}\right)y} \phi'\left(x+\frac{\pi}{y}\right) dx = \\ &= -\frac{1}{iy} \int_{\mathbb{R}} e^{-ixy} \phi'\left(x+\frac{\pi}{y}\right) dx. \end{aligned}$$

Отже,

$$|\hat{\phi}(y)| = \frac{1}{|y|} \left| \int_{\mathbb{R}} e^{-ixy} \left(\phi'(x) - \phi'\left(x+\frac{\pi}{y}\right) \right) dx \right|$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{|y|} \int_{\mathbb{R}} \left| \phi'(x) - \phi'\left(x+\frac{\pi}{y}\right) \right|^{1-\gamma} \times \\ &\quad \times \left| \phi'(x) - \phi'\left(x+\frac{\pi}{y}\right) \right|^\gamma dx \\ &\leq \frac{1}{|y|} \left(\sigma\left(\frac{\pi}{y}\right) \right)^{1-\gamma} 2 \int_{\mathbb{R}} |\phi'(x)|^\gamma dx, \end{aligned}$$

$$\text{тобто: } \int_1^\infty |\hat{\phi}(y)| c(y) dy \leq$$

$$\leq \int_1^\infty \frac{1}{|y|} \left(\sigma\left(\frac{\pi}{y}\right) \right)^{1-\gamma} c(y) dy \cdot 2 \int_{\mathbb{R}} |\phi'(x)|^\gamma dx.$$

□

Приклад 1. Якщо $\sigma(u) = c|u|^\alpha$, $0 < \alpha \leq 1$, тоді $c(y) = |y|^\delta$, де $0 < \delta < \alpha(1-\gamma)$.

Отже, для вейвлет розкладу процесу, заданого формулою (3), де ϕ, ψ - вейвлети Баттл-Лемарі, має місце наступна теорема.

Теорема 3.1. Нехай $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ - центрований випадковий процес з неперервною коваріаційною функцією такою, що існує $f(t, \cdot) \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ та

$$R(t, s) = \int_{\mathbb{R}} f(t, \lambda) \overline{f(s, \lambda)} d\lambda.$$

Нехай

$$\int_{\mathbb{R}} E|X(t)|^2 dt < \infty.$$

Нехай ϕ, ψ - вейвлети Баттл-Лемарі та виконуються наступні умови:

- 1) $\exists \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\partial^k \hat{f}(z, \lambda)}{\partial z^k} \right|^2 d\lambda \right)^{1/2} |z|^p dz < \infty$,
 $k = 0, 1; p = 0, 2, 3;$
- 2) $|\hat{f}(z, \lambda)| < a < \infty$.

Тоді $X_{n,k_j}(t) \rightarrow X(t)$ при $n \rightarrow \infty, k_j \rightarrow \infty, \forall j = 0, 1, \dots$ рівномірно за ймовірністю на кожному інтервалі $[0, T]$.

Доведення. Твердження теореми випливає з Теорема 2.1, враховуючи, що для вейвлетів Баттл-Лемарі виконуються умови 1)-4) Теорема 2.1. Дійсно, для ψ -вейвлету Баттл-Лемарі порядку m , існує $m+1$ нульових моментів [9], а отже, $\hat{\psi}^{(k)}(0) = 0$, $0 \leq k \leq m+1$. Так як вейвлет $\psi(x)$ є $m-1$ раз неперервно диференційовний та, враховуючи формули (5), (7), маємо виконання умов 1)-3) Теорема 2.1. А з леми 1, диференційовності вейвлетів Баттл-Лемарі та

прикладу 1 впливає умова 4) для вейвлетів Баттл-Лемарі порядку $m \geq 3$. Але у випадку $m = 2$ можна записати явний вигляд вейвлетів Баттл-Лемарі і безпосередньо перевірити виконання умов Теорема 2.1, а саме:

$$\widehat{\phi}_2(y) = \left(\frac{\sin y/2}{y/2} \right)^2 \frac{e^{-iy} \sqrt{3}}{\sqrt{2 + \cos y}},$$

$$\widehat{\psi}_2(y) = \frac{(\sin y/4)^4}{(y/4)^2} \frac{-e^{-iy/2} \sqrt{3}}{\sqrt{2 + \cos y/2}} \sqrt{\frac{2 - \cos y/2}{2 + \cos y}},$$

$$\widehat{\psi}_2(0) = 0, \quad \widehat{\psi}'_2(0) = 0.$$

Для $|y| > 1$ можна оцінити таким чином:

$$|\widehat{\phi}_2(y)| \leq \frac{4\sqrt{3}}{|y|^2}, \quad |\widehat{\psi}_2(y)| \leq \frac{16 \cdot 3}{|y|^2}$$

Для $|y| < 1$, враховуючи, що $\frac{\sin x}{x} \leq 1$, можна оцінити:

$$|\widehat{\phi}_2(y)| \leq \sqrt{3}, \quad |\widehat{\psi}_2(y)| \leq 3 \left(\frac{|y|}{4} \right)^2$$

Тоді

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}} |u|^\beta |\widehat{\psi}(u)| du < \\ & < c_1 \int_{|u|>1} \frac{|u|^\beta}{|u|^2} du + c_2 \int_{|u|<1} |u|^\beta |u|^2 du < \infty \end{aligned}$$

для довільних $1/2 < \beta < 1$.

Для $\widehat{\phi}$ доведення проводиться аналогічно. $\square$

4 Швидкість рівномірної збіжності розкладів процесів з $L_2(\Omega)$ по вейвлетам Баттл-Лемарі

У роботі [4] доведено Теорему 4.1, в якій одержано швидкість рівномірної збіжності за ймовірністю зображення (3) до процесу $X(t)$:

Теорема 4.1. Нехай $X = \{X(t), t \in \mathbb{R}\}$ – центрований випадковий процес з коваріаційною функцією $R(t, s)$. Нехай виконуються умови Теорема 2.1.

Тоді

$$E \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |X(t) - X_{n,k_j}(t)| \right)^2 \leq (\widehat{D}_2(t_0))^2$$

та

$$P \left\{ \sup_{0 \leq t \leq T} |X(t) - X_{n,k_j}(t)| > \varepsilon \right\} \leq \frac{(\widehat{D}_2(t_0))^2}{\varepsilon^2},$$

де

$$\widehat{D}_2(t_0) = B_{n,k_j} + \frac{\left[\frac{3}{2}\right]^{1/2} c_{n,k_j} (1 + 2\beta)^{1+\frac{1}{2\beta}} T^\beta}{2\beta - 1},$$

Вирази B_{n,k_j} та c_{n,k_j} будуть наведені далі.

Отже, підрахуємо вираз $\widehat{D}_2(t_0)$ для випадку вейвлетів Баттл-Лемарі порядку 4.

З роботи [4] B_{n,k_j} має вигляд:

$$B_{n,k_j} = (A^\phi)^{1/2} B_1^\phi \frac{2}{k_0} + (A^\psi)^{1/2} B_1^\psi \left(\frac{2}{k_j} + \frac{2\bar{q}}{2^n} \right),$$

де

$$\bar{q} = \sum_{\substack{k \in \mathbb{Z} \\ k \neq 0}} \frac{1}{|k|^2} = \frac{\pi^2}{3},$$

$$B_1^\phi = \frac{1}{(2\pi)} \left(\int_{\mathbb{R}} |\widehat{\phi}'(u)| du + T \int_{\mathbb{R}} |\widehat{\phi}(u)| du \right) \approx 0.9224,$$

$$B_1^\psi = \frac{1}{(2\pi)} \left(\int_{\mathbb{R}} |\widehat{\psi}'(u)| du + T \int_{\mathbb{R}} |\widehat{\psi}(u)| du \right) \approx 0.4261,$$

$$c_{n,k_j} = (A^\phi)^{1/2} c^\phi \frac{2}{k_0} + (A^\psi)^{1/2} c^\psi \frac{8}{k_j} + (A^\psi)^{1/2} c^\psi \frac{2\bar{q}}{2^n}$$

Якщо взяти функцію $f(t, \lambda) = \exp\{-t^2 - \lambda^2\}$, а $\beta = 3/4$, то:

$$\begin{aligned} A^\phi &= \frac{1}{(2\pi)} \cdot \int_{\mathbb{R}} \left(c_\phi \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\partial \widehat{f}(z, \lambda)}{\partial z} \right| dz + \right. \\ & \quad \left. + c'_\phi \int_{\mathbb{R}} |\widehat{f}(z, \lambda)| dz \right)^2 d\lambda \approx 0.1129, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c^\phi &= \frac{1}{(2\pi)} \left(T^{1-\beta} \int_{\mathbb{R}} |\widehat{\phi}(u)| du + 2T \int_{\mathbb{R}} u^\beta |\widehat{\phi}(u)| du \right. \\ & \quad \left. + 2 \int_{\mathbb{R}} u^\beta |\widehat{\phi}'(u)| du \right) \approx 3.6488, \end{aligned}$$

$$c_\phi = \sup_u |\widehat{\phi}(u)| = 1, \quad c'_\phi = \sup_u |\widehat{\phi}'(u)| = 1,$$

$$c^{\psi} = \frac{1}{(2\pi)} \left(T^{1-\beta} \int_{\mathbb{R}} |\hat{\psi}(u)| du + 2T \int_{\mathbb{R}} u^{\beta} |\hat{\psi}(u)| du + 2 \int_{\mathbb{R}} u^{\beta} |\hat{\psi}'(u)| du \right) \approx 2.7914,$$

$$A^{\psi} = \frac{c_{\psi(3)}^2}{(2\pi)^2} \cdot \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} \left(\left| \frac{\partial \hat{f}(z, \lambda)}{\partial z} \right| |z|^3 + |\hat{f}(z, \lambda)| |z|^2 \right) dz \right)^2 d\lambda \approx 94.1548.$$

$X_{n,k_j}(t)$ наближує процес $X(t)$ з надійністю $1-\delta$ та точністю ε , якщо

$$P \left\{ \sup_{0 \leq t \leq T} |X(t) - X_{n,k_j}(t)| > \varepsilon \right\} \leq \delta.$$

Розглянемо $\delta = 0.01$, тоді $\widehat{D}_2(t_0) = 0.1\varepsilon$, і, враховуючи правило трьох σ , можна вважати $\varepsilon = 0.1 \cdot 6\sigma$. У нашому випадку, тобто для функції

$$f(t, \lambda) = \exp\{-t^2 - \lambda^2\},$$

підррахуємо $\sigma \approx 1.11667$, а отже, $\varepsilon = 0.67$. При такому ε маємо $\widehat{D}_2(t_0) = 0.067$. Тоді, у випадку вейвлетів Баттл-Лемарі порядку 4, за допомогою обчислювальних методів можемо отримати таке: $\widehat{D}_2(t_0)$ при $k_0 = 1000$, $k_j = 7000$, $n = 100$, або при $k_0 = 2500$, $k_j = 6000$, $n = 100$.

5 Висновки

Отже, в роботі отримано умови, при яких має місце рівномірна збіжність за ймовірністю вейвлет розкладів по вейвлетам Баттл-Лемарі випадкових процесів з $L_2(\Omega)$. Також підрховано швидкість цієї збіжності вейвлет розкладів по вейвлетам Баттл-Лемарі. Конкретні значення отримані для випадку вейвлетів Баттл-Лемарі порядку 4.

Список використаних джерел

1. V. V. Buldygin, Yu. V. Kozachenko. *Metric characterization of random variables and random processes*, American Mathematical Society, Providence RI, 2000.
2. I. Daubechies. *Ten lectures on wavelets*, Society for industrial and applied mathematics, Philadelphia, 1992.
3. W. Hardle, G. Kerkyacharian, D. Picard, A. Tsybakov. *Wavelet. Approximation and statistical applications*, Springer, New York, 1998.
4. Yu. V. Kozachenko, O. V. Polosmak. *Uniform convergence in probability of wavelet expansions of random processes from $L_2(\Omega)$* , Random operators and stochastic equations. 16 (2008), №4, 12-37.
5. Ю.В. Козаченко. *Лекції з вейвлет аналізу*, Київ, ТВіМС, 2004.
6. Ю.В. Козаченко, М.М. Перестюк. *Про рівномірну збіжність вейвлет-розкладів випадкових процесів із просторів Орліча випадкових величин. I*, Укр. мат. журн., 12 (2007), №59, 1647-1660.
7. Ю.В. Козаченко, М.М. Перестюк. *Про рівномірну збіжність вейвлет-розкладів випадкових процесів із просторів Орліча випадкових величин. II*, Укр. мат. журн., 6 (2008), №60, 759-775.
8. Ю.В. Козаченко, Є.В. Турчин. *Умови рівномірної збіжності ϕ -субгауссових випадкових процесів по системам функцій, породжених вейвлетами*, Теорія ймовірн. і мат. статистика, (2008), №78, 74-85.
9. Stephane Mallat. *A wavelet tour of signal processing*, Academic Press, New York, 1998.

Надійшла до редколегії 03.04.2009

УДК 517.98

Вікторія М. Романенко

Victoria N. Romanenko

Наближення обмежених розв'язків різницевих рівнянь на півосі розв'язками відповідних задач Коші

Approximation of a bounded solutions of difference equations on the half-axis by solutions of the corresponding Cauchy's problems

Досліджено питання про апроксимацію обмежених розв'язків різницевого рівняння, яке відповідає лінійному диференціальному рівнянню на півосі відносно абстрактних функцій, розв'язками відповідних задач Коші. Розглянуто випадок замкненого операторного коефіцієнта.

We investigate a problem of approximation of bounded solutions for a difference equation, which is corresponding to linear differential equation on the half-axis relative to abstract functions, by solutions of the corresponding Cauchy's problems. The case of a closed operator coefficient is considered.

Ключові слова: різницеве рівняння, диференціальне рівняння, замкнений оператор, апроксимація.

Key Words: difference equation, differential equation, closed operator, approximation.

Romser1@bigmir.net

Статтю представив доктор ф.-м. наук, професор, академік НАН України Перестюк М.О.

Наближення обмежених розв'язків різницевих рівнянь на півосі розв'язками відповідних задач Коші

такі, що

$$\|x_0(-p+k) - u(-p+k)\| \leq M \left(\frac{\|x_0(q) - b\|}{R^{p+q-k}} + \frac{\|x_0(-p) - a\|}{R^k} \right), \quad 1 \leq k \leq p+q-1. \quad (3)$$

Аналогічне (1) рівняння також розглядається на півосі:

$$x(n+1) + x(n-1) = Ax(n) + y(n), \quad n \geq 0. \quad (4)$$

Вступ. Нехай B – комплексний банахів простір з нормою $\|\cdot\|$ і нульовим елементом $\bar{0}$; I – одиничний оператор в B ; $L(B)$ – клас усіх лінійних неперервних операторів в B ; $A: D(A) \subset B \rightarrow B$ – замкнений оператор. В роботі [1] показано, що умова $\sigma(A) \cap [-2, 2] = \emptyset$ є необхідною і достатньою для того, щоб рівняння $x_0(n+1) + x_0(n-1) = Ax_0(n) + y(n)$, $n \in \mathbb{Z}$, (1) мало для кожної обмеженої послідовності $\{y(n): n \in \mathbb{Z}\} \subset B$ єдиний обмежений розв'язок $\{x_0(n): n \in \mathbb{Z}\} \subset D(A)$. В роботах [2], [3] доведено, що за умови $\sigma(A) \cap [-2, 2] = \emptyset$ для довільних $p, q \in \mathbb{N}$ і довільних $a, b \in B$ крайова задача

$$\begin{cases} u(n+1) + u(n-1) = Au(n) + y(n), \\ 1-p \leq n \leq q-1, \\ u(-p) = a, \quad u(q) = b, \end{cases} \quad (2)$$

має єдиний розв'язок, причому існують сталі $M > 0, R > 1$, залежні лише від оператора A

В роботі [4] наведені необхідні і достатні умови розв'язності рівнянь на півосі з обмеженим операторним коефіцієнтом у двох ситуаціях.

По-перше, можна розглядати рівняння (4), вважаючи значення $x(-1), x(0) \in B$ фіксованими (задача з початковими умовами). Тоді значення $\{x(n): n \geq 1\}$ визначаються з рівняння (4) однозначно і потрібно перевіряти обмеженість розв'язку.

По-друге, можна розглядати рівняння (4), вважаючи всі значення $\{x(n): n \geq -1\}$ невідомими (задача без початкових умов). В цьому разі потрібно додатково доводити існування розв'язку.

В обох ситуаціях для обмежених операторних коефіцієнтів з тверджень в [4] випливає необхідна й достатня умова існування та єдиності обмеженого розв'язку $\{x(n): n \geq -1\}$ рівняння (4) для довільної обмеженої послідовності $\{y(n): n \geq 0\}$ (а в першому випадку ще й для

$$\forall z \in \mathbb{C}, |z| \leq 1 \quad \exists (I + z^2 I - Az)^{-1} \in L(B).$$

При $z = 0$ ця умова завжди виконується, при інших z вона еквівалентна такій:

$$\forall z \in \mathbb{C}, |z| \geq 1 \quad \exists (A - (z^{-1} + z)I)^{-1} \in L(B),$$

або, що те саме,

$$\sigma(A) \subset \mathbb{C} \setminus \{z + z^{-1} : |z| \geq 1\} = \emptyset.$$

де остання рівність впливає з властивостей функції Жуковського $f(z) = \frac{1}{2}(z + \frac{1}{z})$, $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ (див. [5]).

Отже, для обох розглянутих випадків рівняння (4) з будь-яким обмеженим операторним коефіцієнтом не завжди має єдиний обмежений розв'язок.

У даній статті розглядається рівняння (4) за умови, що відомим є лише значення $x(-1)$ (задача з частиною початкових умов) і отримуються умови існування і єдності обмеженого розв'язку цього рівняння. Крім того, буде показано, що розв'язок цього рівняння можна наблизити розв'язками крайових задач і справджується аналог оцінки (3).

Аналогічні результати отримані для рівнянь старших порядків.

Існування та апроксимація обмеженого розв'язку.

В першій теоремі наведемо достатні умови існування і єдності розв'язку рівняння (4) з заданим значенням $x(-1)$.

$$\text{Позначимо } S := \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}.$$

Теорема 1. Нехай $\sigma(A) \cap S = \emptyset$. Тоді для довільної обмеженої послідовності $\{y(n) : n \geq 0\}$ і для довільного значення $c \in B$ існує єдиний обмежений розв'язок рівняння (4) $\{x(n) : n \geq -1\}$ такий, що $x(-1) = c$.

Доведення. Розглянемо для кожного $q \geq 2$ крайову задачу

$$\begin{cases} u_q(n+1) + u_q(n-1) = Au_q(n) + y(n), \\ 0 \leq n \leq q-1, \\ u_q(-1) = c, \quad u_q(q) = \bar{0}. \end{cases}$$

Вона є частинним випадком задачі (2), тому має

єдиний розв'язок $\{u_q(n) : -1 \leq n \leq q\}$, причому цей розв'язок задовольняє нерівності (3), тобто

$$\|x_0(n) - u_q(n)\| \leq M \left(\frac{\|x_0(q)\|}{R^{q-n}} + \frac{\|x_0(-1) - c\|}{R^{n+1}} \right),$$

$$0 \leq n \leq q-1.$$

З цих нерівностей і обмеженості розв'язку x_n випливає, що всі розв'язки крайових задач рівномірно обмежені:

$$\exists L > 0 \quad \forall q \in \mathbb{N} \quad \forall n \in \mathbb{Z}, 0 \leq n \leq q-1 : \|u_q(n)\| \leq L,$$

де стала L залежить від оператора A , елемента $c \in B$ і послідовності $y := \{y(n) : n \geq 0\}$.

Тоді для довільних $q, r \in \mathbb{N}$, $q < r$, набір $\{w_{qr}(n) = u_q(n) - u_r(n) : -1 \leq n \leq q\}$ є розв'язком крайової задачі

$$\begin{cases} w_{qr}(n+1) + w_{qr}(n-1) = Aw_{qr}(n), & 0 \leq n \leq q-1, \\ w_{qr}(-1) = \bar{0}, \quad w_{qr}(q) = -u_r(q). \end{cases}$$

Ця задача теж є частинним випадком (2), тому для неї правильні оцінки (3), де обмежений на осі розв'язок є нульовим:

$$\|w_{qr}(n)\| \leq \frac{M \|u_r(q)\|}{R^{q-n}} \leq \frac{ML}{R^{q-n}}, \quad 0 \leq n \leq q-1.$$

Зафіксуємо тепер $n \geq 0$. Тоді остання нерівність гарантує, що послідовність $\{u_q(n) : q \geq n+1\}$ є фундаментальною в B , а тому збігається до деякого елемента $x(n)$, причому

$$\|u_q(n) - x(n)\| \leq \frac{ML}{R^{q-n}}, \quad q \geq n+1.$$

Покажемо, що отримана послідовність $\{x(n) : n \geq -1\}$ є розв'язком задачі (4), якщо вважати, що $x(-1) = c$. Дійсно, при довільному $n \geq 0$ правильна рівність

$$u_q(n+1) + u_q(n-1) = Au_q(n) + y(n), \quad q \geq n+1.$$

Перший, другий та четвертий члени рівності мають границю при $q \rightarrow \infty$, тому її має і третій член. За означенням замкненого оператора $x(n) \in D(A)$ і права частина прямує до $Ax(n) + y(n)$. Отже, маємо рівність (4).

Покажемо, що знайдений розв'язок єдиний. Дійсно, якщо припустити, що існує інший обмежений розв'язок (4) $\{z(n) : n \geq -1\}$ такий, що $z(-1) = c$, то для кожного $q \in \mathbb{N}$ різниця

$\{w(n) = z(n) - x(n); -1 \leq n \leq q\}$ є розв'язком задачі Коші

$$\begin{cases} w(n+1) + w(n-1) = Aw(n), & 0 \leq n \leq q-1, \\ w(-1) = \bar{0}, & w(q) = z(q) - x(q). \end{cases}$$

Для неї нерівності (3) мають вигляд

$$\|w(n)\| \leq \frac{M \|x(q) - z(q)\|}{R^{q-n}} \leq \frac{M (\|x\|_\infty + \|z\|_\infty)}{R^{q-n}},$$

$$q \geq n+1.$$

Але спрямувавши тут $q \rightarrow \infty$, отримаємо $w(n) = 0$. Враховуючи довільність n , отримуємо суперечність з припущенням про існування іншого розв'язку.

Теорему 1 доведено.

Теорема 2. Нехай $\sigma(A) \cap S = \emptyset$ і $\{x(n): n \geq -1\}$ – розв'язок рівняння (4). Тоді для кожних $a, b \in B$ і кожного $q \in \mathbb{N}$ єдиний розв'язок крайової задачі

$$\begin{cases} u(n+1) + u(n-1) = Au(n) + y(n), & 0 \leq n \leq q-1, \\ u(-1) = a, & u(q) = b, \end{cases}$$

задовольняє нерівності

$$\|x(n) - u(n)\| \leq M \left(\frac{\|x(q) - b\|}{R^{q-n}} + \frac{\|x(-1) - a\|}{R^{n+1}} \right),$$

$$0 \leq n \leq q-1.$$

Доведення. За умов теореми різниця $\{w_q(n) = u(n) - x(n); -1 \leq n \leq q\}$ є розв'язком задачі Коші

$$\begin{cases} w_q(n+1) + w_q(n-1) = Aw_q(n), & 0 \leq n \leq q-1, \\ w_q(-1) = a - x(-1), & w_q(q) = b - x(q). \end{cases}$$

Ця задача є частинним випадком задачі (2). Записавши для цієї задачі нерівності (3), отримаємо

$$\|w_q(n)\| \leq M \left(\frac{\|b - x(q)\|}{R^{q-n}} + \frac{\|a - x(-1)\|}{R^{n+1}} \right), \quad 0 \leq n \leq q-1.$$

Підставивши означення w_q , отримаємо потрібні нерівності.

Теорему 2 доведено.

Існування та апроксимація обмеженого розв'язку для рівнянь довільного порядку.

Розглянемо рівняння на півосі, яке є узагальненням рівняння (4):

$$\Delta^{(m)} x(n) + A_1 \Delta^{(m-1)} x(n) + \dots + A_{m-1} \Delta^{(1)} x(n) = Ax(n) + y(n), \quad n \geq 0, \quad (5)$$

де $\{A_1, \dots, A_{m-1}\} \subset L(B)$,

$$\Delta^{(1)} x(n) := x(n+1) - x(n-1),$$

$$\Delta^{(k+1)} x(n) := \Delta^{(k)} x(n+1) - \Delta^{(k)} x(n-1), \quad k \geq 1,$$

$\{y(n): n \geq 0\}$ – відома обмежена послідовність,

$\{x(n): n \geq -m\}$ – шукана послідовність, що задовольняє початкові умови

$$x(-1) = c_0, \quad \Delta^{(1)} x(-1) = c_1, \quad \Delta^{(2)} x(-1) = c_2, \quad (6)$$

$$\dots, \Delta^{(m-1)} x(-1) = c_{m-1},$$

де $\{c_0, \dots, c_{m-1}\} \subset B$ – фіксований набір елементів.

Рівняння, аналогічне (5), на всій осі досліджувалося в роботі [3]. Там наведені умови його розв'язності та наближення крайовими задачами. Аналогічні результати отримаємо для рівняння (5).

Нехай надалі виконується

Припущення. 1. Для довільного $z \in C, |z| = 1$, обернений оператор до оператора

$$\Phi(z) := (z - z^{-1})^m I + A_1 (z - z^{-1})^{m-1} + \dots + A_{m-1} (z - z^{-1}) - A$$

існує та належить $L(B)$.

2. Оператори $A_1, \dots, A_{m-1}$ попарно комутують, а також

$$\forall k = \overline{1, m-1}: A_k: B \rightarrow D(A), \quad AA_k = A_k A \text{ на } D(A).$$

Теорема 3. Нехай виконується Припущення. Тоді для довільної обмеженої послідовності $\{y(n): n \geq 0\}$ і для довільних значень $c_0, \dots, c_{m-1} \in B$ існує єдиний обмежений розв'язок рівняння (5), який задовольняє початкову умову (6).

Доведення. Помітимо, що рівняння (5) з початковими умовами (6) еквівалентне системі

$$\begin{cases} x(n+1) - x(n-1) = v_1(n), \\ v_1(n+1) - v_1(n-1) = v_2(n), \\ \dots \\ v_{m-2}(n+1) - v_{m-2}(n-1) = v_{m-1}(n), \\ v_{m-1}(n+1) - v_{m-1}(n-1) = \\ Ax(n) - A_1 v_{m-1}(n) - \dots - A_{m-1} v_1(n) + y(n), \quad n \geq 0, \end{cases}$$

з початковими умовами

$$x(-1) = c_0, v_1(-1) = c_1, v_2(-1) = c_2, \dots, v_{m-1}(-1) = c_{m-1}.$$

Введемо простір B^m з нормою $\|(z_1, \dots, z_m)\|_m = \max_{1 \leq k \leq m} \|z_k\|$, $(z_1, z_2, \dots, z_m) \in B^m$, і визначимо послідовності $\{w(n) : n \geq -1\} \subset B^m$, $\{z(n) : n \geq 0\} \subset B^m$ і оператор $H \in L(B^m)$:

$$w(n) := i^n \begin{pmatrix} x(n) \\ v_1(n) \\ \vdots \\ v_{m-1}(n) \end{pmatrix}, \quad z(n) := i^{n+1} \begin{pmatrix} \bar{0} \\ \vdots \\ \bar{0} \\ y(n) \end{pmatrix},$$

$$H = i \begin{pmatrix} 0 & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & I \\ A & -A_{m-1} & \dots & -A_2 & -A_1 \end{pmatrix}.$$

Тоді рівняння (5) з умовами (6) зводиться до рівняння

$$w(n+1) + w(n-1) = Hw(n) + z(n), \quad n \geq 0, \quad (7)$$

з початковою умовою $w(-1) := -i(c_0, \dots, c_{m-1})^T$.

Оскільки, як показано в [3], враховуючи Припущення, $\sigma(H) \cap [-2, 2] = \emptyset$, то за теоремою 1 рівняння (7) має єдиний розв'язок.

Теорему 3 доведено.

Теорема 4. Нехай виконується Припущення і $\{x(n) : n \geq -m\}$ – розв'язок рівняння (5) з початковими умовами (6). При цьому для кожних $a_0, b_0, \dots, a_{m-1}, b_{m-1} \in B$ і кожного $q \in \mathbb{N}$ єдиний розв'язок крайової задачі

$$\begin{cases} \Delta^{(m)} u(n) + A_1 \Delta^{(m-1)} u(n) + \dots + A_{m-1} \Delta^{(1)} u(n) = \\ Au(n) + y(n), \quad 0 \leq n \leq q-1, \\ u(-1) = a_0, \Delta^{(1)} u(-1) = a_1, \dots, \Delta^{(m-1)} u(-1) = a_{m-1}, \\ u(q) = b_0, \Delta^{(1)} u(q) = b_1, \dots, \Delta^{(m-1)} u(q) = b_{m-1}, \end{cases}$$

задовольняє нерівність

$$\begin{aligned} & \max_{0 \leq k \leq m-1} \|\Delta^{(k)} x(n) - \Delta^{(k)} u(n)\| \leq \\ & \leq M \left(\frac{\max_{0 \leq k \leq m-1} \|\Delta^{(k)} x(q) - b_k\|}{R^{q-m}} + \frac{\max_{0 \leq k \leq m-1} \|\Delta^{(k)} x(-1) - a_k\|}{R^{m-1}} \right), \end{aligned}$$

$$0 \leq n \leq q-1.$$

Доведення. Існування і єдиність розв'язку цієї задачі Коші доведені в [3]. Якщо переписати її аналогічно (7), то вона матиме вигляд

$$\begin{cases} v(n+1) + v(n-1) = Hv(n) + z(n), \quad 0 \leq n \leq q-1, \\ v(-1) = (a_0, a_1, \dots, a_{m-1})^T, \quad v(q) = (b_0, b_1, \dots, b_{m-1})^T. \end{cases}$$

Застосувавши до цієї задачі Коші і рівняння (7) теорему 2, отримаємо потрібну нерівність.

Теорему 4 доведено.

Висновки.

В цій роботі для рівняння (4) з одною початковою умовою отримано достатні умови існування і єдності обмеженого розв'язку. Крім того, показано, що розв'язок цього рівняння можна наблизити розв'язками крайових задач і знайдені оцінки на різницю розв'язків.

Аналогічні результати отримані для рівнянь старших порядків.

Список використаної літератури:

1. Городний М.Ф. Ограниченные и периодические решения одного разностного уравнения и его стохастического аналога в банаховом пространстве // Укр. мат. журн. – 1991. – 43, №1. – С. 41–46.
2. Городний М. Ф. Аппроксимация ограниченного решения одного разностного уравнения решениями соответствующих краевых задач в банаховом пространстве // Математические заметки. – 1992. – т. 51, вып. 4. – С.17–22.
3. Городний М.Ф. Романенко В.М. Аппроксимация ограниченного разв'язку одного різницевого рівняння з необмеженим операторним коефіцієнтом розв'язками відповідних крайових задач // Укр. мат. журн. – 2000. – 52, №4. – С. 548–552.
4. Городний М.Ф., Лагода О.А. Обмежені розв'язки двопараметричного різницевого рівняння у банаховому просторі // Укр. математ. журнал. – 2000. – Т.52, № 12. – С.1610–1614.
5. Шабат Б.В. Введение в комплексный анализ. – М., Наука. – 1969. – 576 с.

Надійшла до редколегії 03.06.2009

УДК 51(091)

Олена М. Рябухо

**Функціональний підхід до
обґрунтування теорії ідеалів для кілець
цілих алгебраїчних чисел в працях
академіка Дмитра Граве**

Проведено аналіз праць академіка Д.О. Граве, в яких розвинуто функціональний підхід до обґрунтування теорії подільності в кільцях алгебраїчних чисел.

Ключові слова: теорія подільності, ідеальні числа, поле функціоналів, найбільший спільний дільник.

rom.olena@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., професор В.В. Кириченко

1. Вступ. Теорія подільності в кільцях цілих алгебраїчних чисел нині є добре розвинутою областю теорії кілець, яка істотно використовує методи комутативної алгебри, зокрема теорію ідеалів в комутативних кільцях. Проте історичний аналіз показує, що після знаменитих праць Куммера було кілька різних підходів до уточнення введеного ним поняття ідеального числа. Основними з них є теорія розкладу ідеалів в кільцях цілих алгебраїчних чисел і теорія функціоналів за Дедекіндом, локальний підхід Є.І. Золотарьова та використання символу найбільшого спільного дільника (Д.О. Граве [1], [3]). Проблематиці уточнення поняття ідеального числа через функціонали академік Д.О. Граве присвятив одну зі своїх великих робіт [1] і значну частину монографії [2]. Ці дослідження тісно пов'язані з іншими його роботами з теорії подільності алгебраїчних чисел, які було проаналізовано в нашій публікації [4]. В даній роботі ми маємо намір охарактеризувати особливості підходу Д.Граве до теорії функціоналів за Дедекіндом і виділити те нове, що привнесли в теорію подільності ці праці Д.Граве. Робота є по суті продовженням нашої статті [4]. Ми використовуємо позначення, які в ній впроваджено і спираємося на історичний екскурс, поданий в [5]. В п. 2 наведено стислий виклад теорії функціоналів в тому вигляді, в якому вона розглядається в праці [1], в п. 3

Olena M. Ryabukho

**Functional approach to foundation of the
ideal theory for rings of integers algebraic
numbers in academician Dmytro Grave's
papers**

Functional approach to foundation of the ideal theory for rings of integers algebraic numbers in academician Dmytro Grave's papers is analyzed in our work.

Key Words: the divisibility theory, functional fields, ideal numbers, grate common divisor ideal numbers.

аналіз цієї теми в монографії [2], а в п. 4 — короткі висновки.

2. Ідеальні числа як функціонали. Нехай Ω — деяке поле, яке називатимемо основним. Прикладами таких полів, які розглядаються Д.Граве, є поля алгебраїчних чисел і поле раціональних над полем комплексних чисел $\mathbb{C}$. Цілим елементом поля Ω називається довільне число (чи, відповідно, раціональна функція), яке є коренем в Ω многочлена з цілими раціональними коефіцієнтами і старшим коефіцієнтом одиниця. При цьому, якщо норма цілого алгебраїчного числа дорівнює ± 1 , то воно називається алгебраїчною одиницею; алгебраїчною одиницею функціонального поля називається його цілий елемент, норма якого є числом. Припустимо, що до основного поля Ω додано певну кількість незалежних змінних $x_1, x_2, \dots, x_n$. Елементи трансцендентного розширення $\Omega(x_1, x_2, \dots, x_n)$ автор, вслід за Дедекіндом, називає функціоналами, а самі змінні $x_1, x_2, \dots, x_n$ — функціональними символами. Два функціонали $\frac{x_1}{\psi_1}, \frac{x_2}{\psi_2}$ рівні в тому і лише в тому разі, коли $\varphi_1 \psi_2 = \psi_1 \varphi_2$. Застосовуючи так зване лексикографічне перетворення функціональну форму

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_n)} a_{i_1, i_2, \dots, i_n} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_n^{i_n}$$

можна перетворити на многочлен від однієї змінної, за яким вона однозначно відновлюється. Для цього вибираємо деяке натуральне число g , більше від степеня форми і замінюємо змінні x_i в формі φ згідно з рівностями

$$x_i = \xi^{g^{i-1}}, 1 \leq i \leq n,$$

де ξ — нова змінна. В результаті дістаємо многочлен від ξ

$$\Phi(\xi) = \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_n)} a_{i_1, i_2, \dots, i_n} \xi^{i_1 + i_2 g + \dots + i_n g^{n-1}}.$$

Зрозуміло, що за многочленом $\Phi(\xi)$ можна відновити форму φ , причому однозначно.

Поле функціоналів має своє кільце цілих елементів, до якого належать цілі елементи основного поля Ω і цілі функціонали. "Варте уваги, — пише автор — що додавання цілих функціоналів породжує неповне поле Ω . Поле функціоналів виявляється вже повним. Неповнота поля Ω , яка вимагала введення ідеальних чисел, заповнюється функціоналами, які грають роль ідеальних чисел".

Таким чином, ідея введення "ідеальних чисел" згідно із указаним підходом полягає в тому, що ми розглядаючи деяке поле алгебраїчних чисел Ω , в кільці цілих елементів O_Ω якого не має місце однозначність розкладу в добуток незвідних множників, переходимо до деякого поля $\Omega(x_1, x_2, \dots, x_n) = \bar{\Omega}$ всіх раціональних функцій від $x_1, x_2, \dots, x_n$ над Ω і його кільця $O_{\bar{\Omega}}$ цілих елементів. Всі елементи із O_Ω в широкому кільці $O_{\bar{\Omega}}$ вже розкладаються в добуток незвідних елементів однозначно. Іншими словами, елементи кільця $O_{\bar{\Omega}}$ відіграють роль ідеальних чисел для кільця O_Ω .

При такому підході природним об'єктом, який пов'язується з цілими функціоналами $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_s \in \Omega(x_1, x_2, \dots, x_n)$, є їх найбільший спільний дільник, який дорівнює

$$\varphi_1 y_1 + \varphi_2 y_2 + \dots + \varphi_s y_s$$

де $y_1, y_2, \dots, y_s$ — функціональні знаки, які не входять до $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_s$.

Два цілі функціонали a, b називаються еквівалентними, якщо вони відрізняються на деякий дільник одиниці в кільці $O_{\bar{\Omega}}$ (одиницю цього кільця). Якщо не розрізняти еквівалентні

функціонали, то можна довести, що в кільці $O_{\bar{\Omega}}$ має теорема про однозначність розкладу цілого функціонала в добуток нерозкладних. Автор подає це твердження як наслідок так званого "принципу спільного дільника," під яким розуміється твердження про зображення найбільшого спільного дільника у вигляді лінійної комбінації функціоналів, яке було сформульоване вище.

Наприклад, розклад числа 21 над кільцем цілих алгебраїчних чисел $\mathbb{Z}(\sqrt{-5})$ є неоднозначним:

$$21 = 3 \cdot 7 = (1 - 2\sqrt{-5})(1 + 2\sqrt{-5}).$$

Для збереження однозначності розкладу згідно з Куммером потрібно ввести 4 ідеальні множники a, b, c, d так, щоб

$$\begin{aligned} ab &= 3, & cd &= 7, \\ ac &= 1 + 2\sqrt{-5}, & bd &= 1 - 2\sqrt{-5}, \\ ad &= 4 - \sqrt{-5}, & bc &= 4 + \sqrt{-5}. \end{aligned} \quad (1)$$

Ідеальне число a є найбільшим спільним дільником чисел 3 і $1 + 2\sqrt{-5}$. За наведеним вище принципом найбільшого спільного дільника функціоналів це ідеальне число можна замінити функціоналом

$$\varphi_1 = 3x + (1 + 2\sqrt{-5})y.$$

Аналогічно, ідеальні числа b, c, d є, відповідно, найбільшими спільними дільниками чисел 3 і $1 - 2\sqrt{-5}$, 7 і $1 + 2\sqrt{-5}$, 7 та $1 - 2\sqrt{-5}$. А тому їх можна, відповідно замінити функціоналами

$$\varphi_2 = 3x + (1 - 2\sqrt{-5})y,$$

$$\varphi_3 = 7x + (1 + 2\sqrt{-5})y,$$

$$\varphi_4 = 7x + (1 - 2\sqrt{-5})y.$$

Залишається перевірити, що функціонали $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ задовольняють рівняння (1) і кожен з них не є еквівалентний числу. Наприклад, щоб переконатися, що функціонал φ_1 не еквівалентний числу, припустимо, від супротивного, що це не так, тобто має місце співвідношення

$$5x + (1 + 2\sqrt{-5})y \sim a + b\sqrt{-5} \quad (2)$$

де a, b — деякі цілі раціональні числа. (Знак $\sim$ означає еквівалентність у розумінні наведеного вище визначення). Співвідношення (2) є можливим лише тоді, коли функціонал

$$\frac{3x + (1 + 2\sqrt{-5})y}{a + b\sqrt{-5}} \quad (3)$$

є одиницею кільця $\mathbb{Z}(\sqrt{-5})$. Але норма цього функціоналу дорівнює

$$\frac{(3x+y)^2 + 20y^2}{a^2 + 5b^2} = \frac{3}{a^2 + 5b^2}(3x^2 + 2yx + 7y^2).$$

Оскільки число $\frac{3}{a^2 + 5b^2}$ ціле при яких цілих a, b не є цілим, то функціонал (3) не є цілим, а отже не є одиницею. Далі можна встановити, що функціонали $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ є різними, причому мають місце рівності

$$\varphi_1\varphi_2 = 3(3x^2 + 2yx + 7y^2),$$

$$\varphi_3\varphi_4 = 7(7x^2 + 2xy + 3y^2),$$

звідки дістаємо

$$\varphi_1\varphi_2 \sim 3, \quad \varphi_3\varphi_4 \sim 7.$$

З іншого боку

$$\varphi_1\varphi_3 \sim (1 + 2\sqrt{-5}),$$

$$\varphi_2\varphi_4 \sim (1 - 2\sqrt{-5}).$$

А далі отримуємо

$$\varphi_1\varphi_4 \sim (4 - \sqrt{-5}),$$

$$\varphi_2\varphi_3 \sim (4 + \sqrt{-5}).$$

Звідки й дістанемо, що поставлену мету досягнуто однозначності розкладу числа 21 над функціональним розширенням кільця $\mathbb{Z}(\sqrt{-5})$ досягнуто.

Далі автор показує, як саме потрібно з функціоналами зіставляти ідеали, щоб перейти до еквівалентної мови теорії ідеалів. Зіставлення ідеалів і функціоналів для даного поля алгебраїчних чисел Ω і його кільця цілих величин $\mathcal{O}_\Omega$ ґрунтується на таких фактах:

1) кожному цілому функціоналові відповідає один і лише один ідеал;

2) кожному ідеалові відповідає ціла родина попарно еквівалентних цілих функціоналів;

3) цілим числам поля відповідають головні ідеали кільця $\mathcal{O}_\Omega$;

4) функціональним одиницям відповідає один і той же ідеал $\mathcal{O} = \mathcal{O}_\Omega$.

Таким чином використання функціоналів для відновлення однозначності розкладу канонічно рівносильне використанню ідеального підходу, причому перехід від однієї мови на іншу може бути здійснений алгоритмічно.

3. Теорія функціоналів у "Трактаті з алгебричного аналізу." Теорії функціоналів і її застосуванням для відновлення однозначності розкладу в кільцях цілих алгебраїчних чисел присвячено окремий розділ тому II "Трактату з алгебричного аналізу" [2].

В принципі цей розділ майже дослівно повторює проаналізовану нами вище статтю Д. Граве [1], але в деяких фрагментах матеріал викладено більш повно і дохідливіше. Наведемо список назв підрозділів цього розділу:

Поняття про ідеал, ідеальні числа, основне поле; трансцендентне розширення; функціонали; лексикографічне перетворення; теорема Гауса; раціональні функціонали; алгебраїчні функціонали; одиниці; принцип найбільшого спільного дільника, алгоритмічні вказівки та висновки.

Значно розширено підрозділ "Лексикографічне перетворення". Автор починає підрозділ з нагадування теорема Абеля, яку нині як правило називають теоремою про примітивний елемент.

Одночасне долучення до основного поля кількох алгебраїчних чисел еквівалентне долученню до нього одного числа, яке певним чином конструюється за початковими.

Далі говориться, що дещо подібне відбувається і при долученні до основного поля незалежних змінних, і воно в певному сенсі рівносильне долученню однієї змінної.

Це здійснюється за допомогою т. зв. лексикографічного перетворення, яке ми описали вище в п.2. Лексикографічне перетворення запропоноване ще Ф. Гаусом і є ефективним інструментом при переході від багатьох змінних до однієї. Автор наводить показові приклади лексикографічних перетворень виду

$$x = \xi, y = \xi^g, z = \xi^{g^2}, \dots,$$

які переводять форму від $x, y, z, \dots$ в деякий многочлен від ξ . і що особливо цікаво, фактично описує алгоритм, як за допомогою заданого многочлену від ξ відновити початкову форму від $x, y, z, \dots$. Він розглядає функцію

$$\sqrt{2}\xi^{278} - 3\xi^{196} + \frac{3}{2}\xi^{125} - \xi^{17} + 3 \quad (4)$$

фіксує показник $g = 5$ і розкладає степінь ξ за основою 5 (тобто записує їх як послідовності

цифр за основою 5):

$$278 = 3 + 0 \cdot 5 + 1 \cdot 5^2 + 2 \cdot 5^3,$$

$$196 = 1 + 4 \cdot 5 + 2 \cdot 5^2 + 1 \cdot 5^3,$$

$$125 = 0 + 0 \cdot 5 + 0 \cdot 5^2 + 1 \cdot 5^3,$$

$$17 = 2 + 3 \cdot 5.$$

Якщо покладемо $x = \xi, y = \xi^5, z = \xi^{5^2}, u = \xi^{5^3}$, то дістанемо функцію

$$\sqrt{2}x^3zu^2 - 3xy^4z^2u + \frac{3}{2}u - x^2y^3 + 3$$

яка рівносильна (4) з точки зору застосування лексикографічного перетворення, чи оберненого до нього. Далі автор пише: "Тому, що ми припускаємо скінченними степені функціоналів відносно функціональних символів, а також при викладках сполучаємо скінченне число функціоналів, то лексикографічне перетворення до однієї змінної завжди приводить до цілі, бо завжди можна число вибрати настільки великим, щоб ці коефіцієнти дії зберігалися".

Заслуговує на окрему увагу постійне акцентування на алгоритмічній стороні справи, яке здійснює автор в цьому розділі "Трактату як, зрештою, і в проаналізованій вище праці. Алгоритмічні підходи описуються на конкретних прикладах. Хоча автор не подає описів алгоритмів в тому вигляді, як це стало прийнято в другій половині минулого століття, але розв'язування конкретних прикладів аналізуються так докладно, що алгоритм, який потрібно застосовувати в даному випадку просто "проглядається". Це стосується зокрема розглянутого вище прикладу, де знайдено розклад числа 21 в добуток функціоналів над $\mathbb{Z}(\sqrt{-5})$. На його основі порівняно легко можна охарактеризувати загальний алгоритм для знаходження таких розкладів.

4. Висновки. В працях академіка Дмитра Граве висвітлено два різних підходи до обґрунтування теорії подільності в кільцях цілих алгебраїчних чисел. Перший з них є більш стандартним і спирається на поняття ідеального множника (ідеалу), а другий підхід, якому присвячено працю [1] і розділ "Трактату з алгебраїчного аналізу" ґрунтується на теорії функціоналів Дедекінда.

Д.О. Граве, по-перше, наводить чіткий опис методу функціоналів за Дедекіндом, по-друге, докладно аналізує типи конкретних

задач, які виникають при такому підході, по-третє, висвітлює алгоритмічну сторону досліджуваних проблем і, по-четверте, подає зв'язки даного підходу з іншими методами відновлення однозначності розкладу на нерозкладні множники в кільцях цілих алгебраїчних чисел.

На основі праць Д.О. Граве, які тут проаналізовані, можна створювати алгоритми для обчислення з алгебраїчними числами, що за своїми обчислювальними потужностями цілком відповідають вимогам сучасної алгоритмічної теорії чисел.

Враховуючи все сказане, можна сказати, що дослідження Д.О. Граве з теорії функціоналів над кільцями цілих алгебраїчних чисел були істотним вкладом в розвиток теорії подільності в таких кільцях і навіть на даному етапі її розвитку можуть знайти застосування в подальших дослідженнях, особливо з алгоритмічної теорії чисел.

Список використаних джерел

1. Граве Д.О. Арифметична теорія алгебраїчних величин. // Журнал Інституту Математики Всеукраїнської Академії Наук. №3-4 (1934), с. 25-44.
2. Граве Д.О. Трактат з алгебраїчного аналізу. Т.2. Київ. Вид-во АН УРСР, 1939, 386 с.
3. Д.О. Граве Теорія ідеалів. // Университетские известия. Киев, №1 (1913), с. 1-44, №2 (1913), с. 45-84/, №3 (1913), с. 85-132.
4. Рябуго О.М. Розвиток теорії подільності для кілець цілих алгебраїчних чисел в працях академіка Дмитра Граве. Вісник Київського університету, серія: фіз.-мат. наук, випуск №1, Київ - 2009, С. 3-10.
5. Чеботарев Н.Г. Академик Дмитрий Александрович Граве (1939-1983) В кн. "Сборник посвященный памяти академика Дмитрия Александровича Граве". Под ред. О.Ю. Шмидта, Б.Н. Делоне и Н.Г. Чеботарева. Гос. издат. тех.-теорет. лит.-ры. Москва-Ленинград. - 1940. - С. 3-14.

Надійшла до редколегії 1.06.2009

УДК 517.98

А. В. Чайковський

Узагальнення теореми Крейна для G -секторіальних операторів

Теорему Крейна про існування і єдиність розв'язку лінійного диференціального рівняння в банаховому просторі узагальнено на випадок G -секторіального операторного коефіцієнта.

Ключові слова: лінійне диференціальне рівняння, банахів простір, G -секторіальний операторний коефіцієнт.

ChaikovskiyAV@ukr.net

Статтю представив доктор ф.-м.н., професор, академік НАН України М.О. Перестюк

Вступ.

Нехай $(B, \|\cdot\|)$ – комплексний банахів простір з вільним елементом $\bar{0}$, $L(B)$ – простір усіх лінійних неперервних операторів в B , I – одиничний оператор.

В [1, с. 119] доведено таке твердження.

Теорема (М. Г. Крейн). Для того, щоб рівняння

$$x'(t) = Ax(t) + y(t), \quad t \in \mathbb{R}, \quad (1)$$

з обмеженим операторним коефіцієнтом для кожної неперервної обмеженої функції мало єдиний обмежений розв'язок, необхідно і достатньо, щоб

$$\sigma(A) \cap \{it \mid t \in \mathbb{R}\} = \emptyset. \quad (2)$$

В цій роботі аналогічні результати будуть отримані у випадку G -секторіальних операторів. Наведемо означення з роботи [2].

Означення 1. Будемо казати, що функція $G: [0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ належить класу Ψ , якщо вона задовольняє умови:

- G – незростаюча на $[0, +\infty)$;
- $G(t) \rightarrow 0, t \rightarrow +\infty$;
- функція $1/G$ ліпшицева на $[0, +\infty)$.

Означення 2. Нехай $G \in \Psi$. Лінійний оператор $A: D(A) \subset B \rightarrow B$ назовемо G -секторіальним, якщо існують такі сталі $\alpha \in \mathbb{R}$ і $\varphi \in (0, \frac{\pi}{2})$, що для множини $S_{\alpha, \varphi} := \{z \in \mathbb{C} \mid z \neq \alpha, |\arg(z - \alpha)| < \varphi\}$ справджуються умови

- $\sigma(A) \subset S_{\alpha, \varphi}$;
- $\exists M > 0 \forall \lambda \notin S_{\alpha, \varphi} : \|R_\lambda(A)\| \leq MG(|\lambda - \alpha|)$.

Нехай A – G -секторіальний оператор. В [2] вводиться операторна експонента $e^{-At}, t > 0$, доводяться її властивості. Деякі з них сформулюємо у вигляді лемми.

A. V. Chaikovskiy

Generalization of Krein's theorem for G -sectorial operators

Krein's theorem about existence and uniqueness of solution of linear differential equations in Banach space is generalized for the case of G -sectorial operator coefficient.

Key words: linear differential equation, Banach space, G -sectorial operator coefficient.

Лема 1. Якщо A – G -секторіальний оператор і $H(t) := \frac{1}{t}G(\frac{1}{t}), t > 0$, то:

- $\exists C_0 > 0 \forall t > 0 \|e^{-At}\| \leq C_0 H(t)e^{-\alpha t}$;
- e^{-At} неперервно диференційовна при $t > 0$, сильно неперервна в т. 0 для елементів з $D(A)$.

Узагальнення достатності теореми Крейна для ліпшицевих правих частин.

Позначимо через Y клас усіх функцій $y: \mathbb{R} \rightarrow D(A)$, які обмежені на всій осі і задовольняють умову Ліпшиця $\exists L > 0 \forall t_1, t_2 \in \mathbb{R} : \|y(t_1) - y(t_2)\| \leq L|t_1 - t_2|$. Позначимо також через X клас усіх функцій $x: \mathbb{R} \rightarrow D(A)$, які обмежені на всій осі і мають похідну в кожній точці.

Теорема 1. Нехай $\int_0^1 H(t)dt < +\infty$. Для того, щоб рівняння (1) мало для кожної функції $y \in Y$ єдиний розв'язок $x \in X$, достатньо, щоб виконувалася умова (2).

Доведення. За умов теореми спектр розпадається на дві замкнені частини $\sigma_+ := \sigma \cap \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z > 0\}$ і $\sigma_- := \sigma \cap \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z < 0\}$. Якщо $\sigma_- \neq \emptyset$, то [1, с.32], [3, с. 641] простір B розкладається у пряму суму відповідних підпросторів B_+ і B_- , в кожному з яких рівняння (1) можна розв'язувати окремо. В просторі B_- оператор A обмежений і існування розв'язку впливає з теореми Крейна. Тому надалі припустимо, що $\sigma = \sigma_+$. В такому разі [2] A – G -секторіальний і відповідна стала $\alpha > 0$.

Покажемо, що єдиним обмеженим розв'язком рівняння (1) є

$$x(t) = - \int_t^{+\infty} e^{A(t-s)} y(s) ds, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Дійсно, зафіксуємо $t_0 \in \mathbb{R}$ і розіб'ємо цей інтеграл в два доданки:

$$\int_t^{t_0} e^{A(t-s)} y(s) ds + \int_{t_0}^{+\infty} e^{A(t-s)} y(s) ds =$$

$$= I_1(t) + I_2(t), \quad t < t_0.$$

Перший доданок згідно [2] є функцією зі значеннями в $D(A)$, яка має похідну $I_1'(t) = AI_1(t) - y(t)$ при всіх $t < t_0$. Другий доданок – це інтеграл від функції, неперервної по s і диференційовної по t , і внаслідок леми 1 він має похідну $I_2'(t) = AI_2(t)$, $t < t_0$.

З довільності t_0 випливає, що (3) задовольняє рівняння (1) при всіх $t \in \mathbb{R}$.

Доведемо єдиність розв'язку (3). Припустимо від супротивного, що існує ще один обмежений розв'язок z . Тоді різниця $x - z$ є розв'язком відповідного однорідного рівняння. В [2] показано, що в цьому разі на кожному відрізку $[t_0, t_1]$

$$x(t) - z(t) = e^{A(t-t_1)}(x(t_1) - z(t_1)), \quad t \in [t_0, t_1].$$

При цьому, зокрема,

$$\|x(t_0) - z(t_0)\| \leq \|e^{A(t-t_1)}\| \cdot \|x(t_1) - z(t_1)\|.$$

Спрямувавши тут $t_1 \rightarrow +\infty$, отримаємо, що $x(t_0) - z(t_0) = 0$, $t_0 \in \mathbb{R}$.

□

Узагальнення теореми Крейна для неперервно диференційовних правих частин.

Позначимо через Y_1 клас усіх функцій $y \in C^1(\mathbb{R}, D(A))$, які обмежені на всій осі і мають обмежену похідну.

Теорема 2. Нехай A – G -секторіальний оператор і $\int_0^1 H(t)dt < +\infty$. Для того, щоб рівняння (1) мало для кожної функції $y \in Y_1$ єдиний розв'язок $x \in X$, необхідно і достатньо, щоб виконувалася умова (2).

Доведення. Необхідність. Розглянемо рівняння (1) у випадку функції $y(t) = e^{i\alpha t} y_0$, $t \in \mathbb{R}$, де $y_0 \in B$ – довільний фіксований елемент, $\alpha \in \mathbb{R}$ – довільне фіксоване число. За умовою рівняння має єдиний обмежений розв'язок x_0 . Проте якщо обрати довільне число $z \in \mathbb{R}$ і покласти $x(t) = e^{-i\alpha t} x_0(t+z)$, $t \in \mathbb{R}$, то

$$x'(t) = e^{-i\alpha t} x'_0(t+z) =$$

$e^{-i\alpha t}(Ax_0(t+z) + y(t+z)) = Ax(t) + y(t)$, $t \in \mathbb{R}$, тобто x задовольняє (1), крім того, x – обмежена функція. Отже, з єдності обмеженого розв'язку випливає, що $x = x_0$, тобто $x_0(t) = e^{-i\alpha t} x_0(t+z)$, $t, z \in \mathbb{R}$.

Але звідси випливає, що функція $e^{-i\alpha t} x_0(t)$ є сталою на $\mathbb{R}$, тобто

$$\exists u_0 \in B \quad \forall t \in \mathbb{R} : x(t) = e^{i\alpha t} u_0.$$

Підставивши цю функцію в рівняння, отримаємо, що $u_0 \in D(A)$ і $i\alpha u_0 = Au_0 + u_0$. Враховуючи довільність y_0 і α , маємо $\forall \alpha \in \mathbb{R} \quad \forall y_0 \in B \quad \exists u_0 \in D(A) : (i\alpha I - A)u_0 = y_0$. Враховуючи теорему Банаха про обернений оператор, це твердження рівносильне умові (2).

Достатність. Провівши міркування з доведення теореми 1, отримаємо, що досить розглянути випадок $\sigma = \sigma_+$. В такому разі [2] A – G -секторіальний і відповідна стала $a > 0$.

Покажемо, що єдиним обмеженим розв'язком рівняння (1) є функція (3). З умови на H випливає існування інтеграла. Проінтегрувавши частинами, отримаємо:

$$x(t) = -A^{-1}y(t) - \int_t^{+\infty} A^{-1}e^{A(t-s)}y'(s)ds =$$

$$-A^{-1}y(t) - z(t), \quad t \in \mathbb{R}.$$

Застосувавши теорему 1 до функції $A^{-1}y'(t)$, отримаємо, що $z'(t) = Az(t) - A^{-1}y'(t)$, $t \in \mathbb{R}$. Це еквівалентно тому, що x – розв'язок рівняння (1).

Єдиність розв'язку доводиться так само, як в теоремі 1. □

Висновки.

Теорему Крейна про існування і єдиність розв'язку лінійного диференціального рівняння в банаховому просторі узагальнено на випадок G -секторіального операторного коефіцієнта.

Список використаних джерел

1. Далецкий Ю.Л., Крейн М.Г. Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве. М. 1970. – 536 с.
2. Городний М.Ф., Чайковский А.В. Об одном обобщении понятия секторального оператора // Мат. сборник. – 2006, №7, 197. – С.29-46.
3. Данфорд Н., Шварц Дж.Т. Линейные операторы. Общая теория. М., 2004. – 896 с.

Надійшла до редколегії 03.05.2009

УДК 519.21

Р.Є. Ямненко, к.ф.-м.н., доцент
А.П. Креневич, к.ф.-м.н., асистент

Про розподіл супремума узагальненого
ДБР з параметром Хюрста $H < 0.5$

Знайдено оцінки ймовірності виходу траєкторій суми N незалежних узагальнених строго φ -субгауссових процесів дробового броунівського руху з однаковим параметром Хюрста $H < 0.5$, визначених на відрізку $[a, b]$, за рівень, заданий кривою ct^α , $c > 0$, $\alpha \in [0, 1]$.

Ключові слова: узагальнений дробовий Броунівський рух, розподіл супремуму.

E-mails: yamnenko@univ.kiev.ua, krenevich@ukr.net
Статтю представив доктор фіз.-мат. наук Козаченко Ю.В.

1 Вступ

Процеси дробового броунівського руху (ДБР) внаслідок своїх властивостей часто використовують в якості моделей у фінансовій математиці, теорії черг тощо. Моделі, в основі яких виступає узагальнений ДБР, зокрема, φ -субгауссовий, розширюють коло випадкових процесів, для яких можна вирішувати відповідні задачі, оскільки знімається обмеження на нормальність скінченновимірних розподілів процесу.

Нагадаємо [1], що випадковий процес $Z^H = \{Z^H(t), t \in T\}$ називають строго φ -субгауссовим узагальненим дробовим броунівським рухом (φ -УДБР) з індексом Хюрста $H \in (0, 1)$, якщо Z^H – строго φ -субгауссовий процес зі стаціонарними приростами і коваріаційною функцією

$$R_H(t, s) = \frac{1}{2} (|t|^{2H} + |s|^{2H} - |s - t|^{2H}), \quad t, s \in T.$$

Знаходження оцінок ймовірності виходу траєкторій випадкового процесу за криву c , безсумнівно, актуальною задачею як у теорії ризику при оцінюванні ймовірності банкрутства, так і в теорії черг при оцінюванні надійності систем передачі даних. Такі оцінки для сум незалежних φ -УДБР процесів з класу $\Psi_{\Sigma_0}^q$ з параметром Хюрста $H \geq 0.5$ для скінченного і нескінченного інтервалів наведено в роботах [1], [2] та [3]. В даній роботі

R.E. Yamnenko, PhD, Associate Professor
A.P. Krenovich, PhD, Assistant Professor

On supremum distribution of a generalized FBM with Hurst parameter $H < 0.5$

An estimate of exceeding by trajectories of a sum of N independent strictly φ -sub-Gaussian generalized fractional Brownian motion processes with identical Hurst parameter $H < 0.5$, which are defined on the same interval $[a, b]$, a level specified by a curve ct^α , $c > 0$, $\alpha \in [0, 1]$.

Key Words: generalized fractional Brownian motion, supremum distribution.

досліджується випадок $H < 0.5$, який для φ -УДБР процесів раніше не розглядався.

Додаткові відомості та необхідні означення з теорії φ -субгауссових та строго φ -субгауссових випадкових величин і процесів можна прочитати, наприклад, у монографіях [1] та [4].

2 Основні результати

Наступна теорема доведена у [1], частковий її варіант для $\alpha = N = 1$ наведена у роботі [2].

Теорема 2.1. Нехай $Z_i^H = \{Z_i^H(t), t \in [a, b]\}$, $i = \overline{1, N}$ – незалежні однаково розподілені випадкові процеси строго φ -УДБР з індексом Хюрста $H \in (0, 1)$, $c > 0$, $\alpha \in [0, 1]$ – деякі сталі. Тоді для всіх $p \in (0, 1)$, $\beta \in (0, (\frac{b-a}{2})^H]$ та $\lambda > 0$ виконується наступна нерівність:

$$P \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - ct^\alpha \right) > x \right\} \leq (b-a) \left(\frac{e}{\beta p} \right)^{\frac{1}{H}} \exp \left\{ \frac{\lambda c (\beta p)^{\frac{H}{1-H}}}{C_\Delta (1-p)^{\frac{H}{1-H}}} + p N \varphi \left(\frac{\lambda \beta}{1-p} \right) + (1-p) \theta_\varphi(\lambda, p) - \frac{\lambda x}{C_\Delta} \right\}, \quad (1)$$

де $\theta_\varphi(\lambda, p) = \sup_{a \leq u \leq b} \left(N \varphi \left(\frac{\lambda u^H}{1-p} \right) - \frac{\lambda c u^\alpha}{C_\Delta (1-p)} \right)$, C_Δ – визначальна стала простору строго φ -субгауссових випадкових величин [1].

Надалі розглядатимемо строго φ -УДБР процеси з класу $\Psi_{x_0}^q$.

Означення 2.1. Будемо казати, що φ -субгауссовий процес належить класу $\Psi_{x_0}^q$, якщо

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{x^q}{x_0^q}, & x > x_0, \\ \frac{x^2}{x_0^2}, & x \leq x_0, \end{cases}$$

де $x_0 > 0$, $q \geq 2$ – деякі сталі.

Наступна теорема уточнює результати теореми 2.1 для процесів строго φ -УДБР з класу $\Psi_{x_0}^q$ та індексом Хюрста $H \in (0, \frac{q}{2}) \subseteq (0, \frac{1}{2})$.

Для спрощення позначень покладемо $\varepsilon = \frac{x}{C_\Delta}$ і $C = \frac{C}{C_\Delta}$.

Теорема 2.2. Нехай $Z_i^H = (Z_i^H(t), t \in [a, b], 0 \leq a < b < \infty)$, $i = \overline{1, N}$, – незалежні однаково розподілені процеси строго φ -УДБР з класу $\Psi_{x_0}^q$ та індексом Хюрста $H \in (0, \frac{q}{2})$. Нехай $C > 0$, $p \in (0, 1)$ та $\alpha \in [0, 1]$ – деякі сталі. Припустимо, що якщо $q > 2$, то для чисел a та b виконується така нерівність:

$$\max \left\{ v^{-H}, \frac{2^H}{(b-a)^H} \right\} \leq \left(\frac{x_0 C (b-a)}{N(b^{qH} - a^{qH})} \right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (2)$$

де $v = a$, якщо $a > 0$, або $v = b$, якщо $a = 0$.

Тоді для всіх

$$\varepsilon \geq -Ca^\alpha + \frac{q}{x_0} \max \left\{ v^{-H(q-1)}, \frac{2^{H(q-1)}}{(b-a)^{H(q-1)}} \right\} \times \\ \times \left(Na^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} Np}{2^{qH}(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^\alpha p^{\frac{q}{H}}}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})}. \quad (3)$$

мають місце наступні три оцінки.

1) Якщо

$$\varepsilon \geq -Cb^\alpha + \frac{x_0^{q^2-2q} C^{q-1} \alpha^{q-1} b^{(\alpha-qH)(q-1)}}{N^{q-2} q^{q-2} H^{q-1}} \times \\ \times \left(b^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH}(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^\alpha p^{\frac{q}{H}}}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})},$$

то

$$\mathbb{P} \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\frac{1}{C_\Delta} \sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - Ct^\alpha \right) > \varepsilon \right\} \leq$$

$$\leq 2 \left(\frac{\varepsilon}{p} \right)^{\frac{1}{H}} \exp \left\{ - \frac{(q-1)x_0^{\frac{q}{q-1}} (Cb^\alpha + \varepsilon)^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} b^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{px_0^{\frac{q}{q-1}} (Cb^\alpha + \varepsilon)^{\frac{1}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} b^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \left(\frac{(Cb^\alpha + \varepsilon)(b-a)^{qH}}{2^{qH} b^{qH} (1-p)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{p^{\frac{q}{H}-1} q C (b-a)^\alpha}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})} + (q-1)(Cb^\alpha + \varepsilon) \right) \right\}.$$

2) Якщо $a \neq 0$ і

$$\varepsilon \leq -Ca^\alpha + \frac{x_0^{q^2-2q} C^{q-1} \alpha^{q-1} a^{(\alpha-qH)(q-1)}}{N^{q-2} q^{q-2} H^{q-1}} \times \\ \times \left(a^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH}(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^\alpha p^{\frac{q}{H}}}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})},$$

$$\mathbb{P} \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\frac{1}{C_\Delta} \sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - Ct^\alpha \right) > \varepsilon \right\} \leq \\ \leq 2 \left(\frac{\varepsilon}{p} \right)^{\frac{1}{H}} \exp \left\{ - \frac{(q-1)x_0^{\frac{q}{q-1}} (Ca^\alpha + \varepsilon)^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} a^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{px_0^{\frac{q}{q-1}} (Ca^\alpha + \varepsilon)^{\frac{1}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} a^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \left(\frac{(Cb^\alpha + \varepsilon)(b-a)^{qH}}{2^{qH} a^{qH} (1-p)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{p^{\frac{q}{H}-1} q C (b-a)^\alpha}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})} + (q-1)(Cb^\alpha + \varepsilon) \right) \right\}.$$

3) Якщо

$$-Ca^\alpha + \frac{x_0^{q^2-2q} C^{q-1} \alpha^{q-1} a^{(\alpha-qH)(q-1)}}{N^{q-2} q^{q-2} H^{q-1}} \times \\ \times \left(a^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH}(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^\alpha p^{\frac{q}{H}}}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})} \leq \\ \leq \varepsilon \leq -Cb^\alpha + \frac{x_0^{q^2-2q} C^{q-1} \alpha^{q-1} b^{(\alpha-qH)(q-1)}}{N^{q-2} q^{q-2} H^{q-1}} \times \\ \times \left(b^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH}(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^\alpha p^{\frac{q}{H}}}{2^\alpha(1-p^{\frac{q}{H}})},$$

то

$$\mathbb{P} \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\frac{1}{C_\Delta} \sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - Ct^\alpha \right) > \varepsilon \right\} \leq \\ \leq 2 \left(\frac{\varepsilon}{p} \right)^{\frac{1}{H}} \inf_{\lambda \geq \frac{(1-p)x_0}{\max \left\{ v^{qH}, \frac{(b-a)^{qH}}{2^{qH}} \right\}}} \exp \{ -\lambda \varepsilon + \\ + \lambda^q \frac{N(b-a)^{qH} p}{2^{qH}(1-p)^q} x_0^q +$$

$$+ \lambda^{\frac{qa-qH}{a-qH}} \left(\frac{N^{\frac{a}{a-qH}} (qH)^{\frac{qH}{a-qH}}}{x_0^{\frac{q}{a-qH}} (1-p)^{\frac{a}{a-qH}} (C\alpha)^{\frac{qH}{a-qH}}} - \frac{(NqH)^{\frac{a}{a-qH}}}{C^{\frac{qH}{a-qH}} x_0^{\frac{qa}{a-qH}} (1-p)^{\frac{(q-1)a}{a-qH}}} \right) \Bigg\}.$$

Доведення. Для простоти виберемо $\beta = \frac{(b-a)^H}{2^H}$. Для того, щоб однозначно визначити функцію $\varphi(\cdot)$, розглянемо такі $\lambda \geq \lambda_0 > 0$, $\frac{\lambda_0(b-a)^H}{2^H(1-p)} \geq x_0$ і $\frac{\lambda_0 a^H}{1-p} \geq x_0$, якщо $a > 0$, або $\frac{\lambda_0 b^H}{1-p} \geq x_0$ при $a = 0$. Тоді можна покласти

$$\lambda_0 = (1-p)x_0 \max \left\{ v^{-H}; \frac{2^H}{(b-a)^H} \right\},$$

де $v = a$ при $a > 0$ або інакше $v = b$, якщо $a = 0$. Оскільки $H < \frac{q}{q-1}$, то

$$\theta_\varphi(\lambda, p) = \sup_{a \leq u \leq b} \left(\frac{N\lambda^q u^{qH}}{x_0^q (1-p)^q} - \frac{\lambda C u^a}{(1-p)} \right) =$$

$$= \begin{cases} \frac{N\lambda^q a^{qH}}{x_0^q (1-p)^q} - \frac{\lambda C a^a}{1-p}, & \lambda_0 \leq \lambda \leq \lambda_a; \\ \frac{N\lambda^q u_*^{qH}}{x_0^q (1-p)^q} - \frac{\lambda C u_*^a}{1-p}, & \lambda_a \leq \lambda \leq \lambda_b; \\ \frac{N\lambda^q b^{qH}}{x_0^q (1-p)^q} - \frac{\lambda C b^a}{1-p}, & \lambda \geq \lambda_b, \end{cases} \quad (4)$$

де

$$\lambda_a = (1-p) \left(\frac{a^{a-qH} C x_0^q \alpha}{NqH} \right)^{\frac{1}{q-1}},$$

$$\lambda_b = (1-p) \left(\frac{b^{a-qH} C x_0^q \alpha}{NqH} \right)^{\frac{1}{q-1}},$$

$$u_* = \left(\frac{\lambda^{q-1} NqH}{C\alpha x_0^q (1-p)^{q-1}} \right)^{\frac{1}{a-qH}}$$

Для $\lambda \geq \lambda_0$ розглянемо експоненційну частину оцінки (1) з теореми 2.1. Тоді з (4) матимемо

$$\Gamma(\lambda, p, \varepsilon) = \exp \left\{ \frac{\lambda C (b-a)^a p^{\frac{a}{H}}}{2^a (1-p^{\frac{a}{H}})} + \right.$$

$$+ N\varphi \left(\frac{\lambda (b-a)^H}{2^H (1-p)} \right) p + (1-p) \theta_\varphi(\lambda, p) - \lambda \varepsilon \Bigg\} =$$

$$= \exp \left\{ \lambda^q \left(\frac{Nd^{qH}}{x_0^q (1-p)^{q-1}} + \frac{N(b-a)^{qH} p}{x_0^q 2^{qH} (1-p)^q} \right) - \right.$$

$$\left. - \lambda \left(C d^a + \varepsilon - \frac{C(b-a)^a p^{\frac{a}{H}}}{2^a (1-p^{\frac{a}{H}})} \right) \right\} =$$

$$= \exp \{ \lambda^q A_d - \lambda B_d \},$$

де $d = \begin{cases} a, & \text{якщо } \lambda \leq \lambda_a, \\ b, & \text{якщо } \lambda \geq \lambda_b. \end{cases}$ А коли $\lambda_a \leq \lambda \leq \lambda_b$, то

$$\Gamma(\lambda, p, \varepsilon) = \exp \left\{ \lambda^q \frac{N(b-a)^{qH} p}{2^{qH} (1-p)^q} x_0^q + \right.$$

$$+ \lambda^{\frac{qa-qH}{a-qH}} \left(\frac{N^{\frac{a}{a-qH}} (qH)^{\frac{qH}{a-qH}}}{x_0^{\frac{q}{a-qH}} (1-p)^{\frac{a}{a-qH}} (C\alpha)^{\frac{qH}{a-qH}}} - \right.$$

$$\left. - \frac{(NqH)^{\frac{a}{a-qH}}}{C^{\frac{qH}{a-qH}} x_0^{\frac{qa}{a-qH}} (1-p)^{\frac{(q-1)a}{a-qH}}} \right) - \lambda \varepsilon \Bigg\}.$$

Очевидно, що коли $\lambda_b \leq \left(\frac{B_b}{qA_b} \right)^{\frac{1}{q-1}}$, що те саме, якщо

$$\varepsilon \geq -Cb^a + \frac{x_0^{q^2-2q} C^{q-1} \alpha^{q-1} b^{(a-qH)(q-1)}}{N^{q-2} q^{q-2} H^{q-1}} \times$$

$$\times \left(b^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH} (1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^a p^{\frac{a}{H}}}{2^a (1-p^{\frac{a}{H}})},$$

тоді функція $\Gamma(\lambda, p, \varepsilon)$ досягає свого мінімального значення в точці $\lambda = \left(\frac{B_b}{qA_b} \right)^{\frac{1}{q-1}}$. Аналогічним чином, як у [1], отримуємо

$$\min_{\lambda > 0} \Gamma(\lambda, p, \varepsilon) \leq \min_{\lambda \geq \lambda_0} \Gamma(\lambda, p, \varepsilon) =$$

$$= \exp \left\{ - \frac{(q-1) B_b^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} A_b^{\frac{1}{q-1}}} \right\} = \exp \left\{ - \frac{(q-1) x_0^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} b^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \right.$$

$$\times \frac{(Cb^a + \varepsilon)^{\frac{q}{q-1}} \left(1 - \frac{C(b-a)^a p^{\frac{a}{H}}}{2^a (Cb^a + \varepsilon) (1-p^{\frac{a}{H}})} \right)^{\frac{q}{q-1}}}{\left(1 + \frac{(b-a)^a p^{\frac{a}{H}}}{(2b)^{qH} (1-p)} \right)^{\frac{1}{q-1}}} \Bigg\} \times$$

$$\exp \left\{ \frac{p(q-1) x_0^{\frac{q}{q-1}} \left(Cb^a + \varepsilon - \frac{C(b-a)^a p^{\frac{a}{H}}}{2(1-p^{\frac{a}{H}})} \right)^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}} \left(b^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH} (1-p)} \right)^{\frac{1}{q-1}}} \right\}$$

$$\leq \exp \left\{ - \frac{(q-1) x_0^{\frac{q}{q-1}} (Cb^a + \varepsilon)^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} b^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \right\} \times$$

$$\exp \left\{ \frac{p x_0^{\frac{q}{q-1}} (Cb^a + \varepsilon)^{\frac{1}{q-1}} \left((Cb^a + \varepsilon) (b-a)^{qH} + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{p^{\frac{a}{H}-1} q C (b-a)^a}{2^a (1-p^{\frac{a}{H}})} + (q-1) (Cb^a + \varepsilon) \right) \right\}.$$

Далі, коли $\lambda_a \geq \left(\frac{B_a}{qA_a} \right)^{\frac{1}{q-1}}$, що те саме, коли

$$\varepsilon \leq -Ca^a + \frac{x_0^{q^2-2q} C^{q-1} a^{q-1} a^{(a-qH)(q-1)}}{N^{q-2} q^{q-2} H^{q-1}} \times \\ \times \left(a^{qH} + \frac{(b-a)^{qH} p}{2^{qH}(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^a p^{\frac{q}{2H}}}{2^a(1-p^{\frac{q}{2H}})},$$

тоді $\Gamma(\lambda, p, \varepsilon)$ досягає свого мінімального значення в точці $\lambda = \left(\frac{B_a}{qA_a} \right)^{\frac{1}{q-1}}$. Тобто

$$\min_{\lambda > 0} \Gamma(\lambda, p, \varepsilon) \leq \min_{\lambda \geq \lambda_0} \Gamma(\lambda, p, \varepsilon) = \\ = \exp \left\{ -\frac{(q-1)B_a^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} A_a^{\frac{1}{q-1}}} \right\} \leq \\ \leq \exp \left\{ -\frac{(q-1)x_0^{\frac{q}{q-1}} (Ca^a + \varepsilon)^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} a^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{px_0^{\frac{q}{q-1}} (Ca^a + \varepsilon)^{\frac{1}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} a^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \left(\frac{(Cb^a + \varepsilon)(b-a)^{qH}}{2^{qH} a^{qH}(1-p)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{p^{\frac{q}{2H}-1} q C(b-a)^a}{2^a(1-p^{\frac{q}{2H}})} + (q-1)(Cb^a + \varepsilon) \right) \right\}.$$

Крім того, легко бачити, що умова $\lambda_0 \leq \lambda_a$ є еквівалентною до умови (3). $\square$

Зауважимо, що коли розглядати строго субгауссові процеси УДБР, тобто коли $q = 2$ і $x_0^2 = 2$, умова (2) є надлишковою і її треба вилучити. Крім того, з доведення випливає, що отримані оцінки матимуть місце для всіх $\varepsilon \geq 0$. Отже, має місце наступна теорема.

Теорема 2.3. Припустимо, що $Z_i^H = (Z_i^H(t), t \in [a, b], 0 \leq a < b < \infty), i = \overline{1, N}$, – незалежні однаково розподілені строго субгауссові узагальнені процеси ДБР з індексом Хюрста $H \in (0, \frac{1}{2}, 1)$. Нехай $C > 0, p \in (0, 1)$ та $\alpha \in [0, 1]$ – деякі сталі і нехай

$$\varepsilon_u = -Cu^a + \frac{C\alpha u^{a-2H}}{H} \times \\ \times \left(u^{2H} + \frac{(b-a)^{2H} p}{4^H(1-p)} \right) + \frac{C(b-a)^a p^{\frac{q}{2H}}}{2^a(1-p^{\frac{q}{2H}})}.$$

Тоді для $\varepsilon \geq 0$ справедливі такі три оцінки.

1) Якщо $\varepsilon \geq \varepsilon_b$, то

$$P \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\frac{1}{C_\Delta} \sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - Ct^a \right) > \varepsilon \right\} \leq \\ \leq 2 \left(\frac{e}{p} \right)^{\frac{1}{H}} \exp \left\{ -\frac{2(Cb^a + \varepsilon)^2}{4b^{2H}N} \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{px_0^{\frac{q}{q-1}} (Cb^a + \varepsilon)^{\frac{1}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} b^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \left(\frac{(Cb^a + \varepsilon)(b-a)^{qH}}{2^{qH} b^{qH}(1-p)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{p^{\frac{q}{2H}-1} q C(b-a)^a}{2^a(1-p^{\frac{q}{2H}})} + (q-1)(Cb^a + \varepsilon) \right) \right\}. \quad 54$$

$$+ \frac{p^{\frac{q}{2H}-1} q C(b-a)^a}{2^a(1-p^{\frac{q}{2H}})} + (q-1)(Cb^a + \varepsilon) \right) \Bigg\}.$$

2) Якщо $a \neq 0$ і $\varepsilon \leq \varepsilon_a$, то

$$P \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\frac{1}{C_\Delta} \sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - Ct^a \right) > \varepsilon \right\} \leq \\ \leq 2 \left(\frac{e}{p} \right)^{\frac{1}{H}} \exp \left\{ -\frac{(q-1)x_0^{\frac{q}{q-1}} (Ca^a + \varepsilon)^{\frac{q}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} a^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{px_0^{\frac{q}{q-1}} (Ca^a + \varepsilon)^{\frac{1}{q-1}}}{q^{\frac{q}{q-1}} a^{\frac{qH}{q-1}} N^{\frac{1}{q-1}}} \left(\frac{(Cb^a + \varepsilon)(b-a)^{qH}}{2^{qH} a^{qH}(1-p)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{p^{\frac{q}{2H}-1} q C(b-a)^a}{2^a(1-p^{\frac{q}{2H}})} + (q-1)(Cb^a + \varepsilon) \right) \right\}.$$

3) Якщо $\varepsilon_a \leq \varepsilon \leq \varepsilon_b$, то

$$P \left\{ \sup_{a \leq t \leq b} \left(\frac{1}{C_\Delta} \sum_{i=1}^N Z_i^H(t) - Ct^a \right) > \varepsilon \right\} \leq \\ \leq 2 \left(\frac{e}{p} \right)^{\frac{1}{H}} \lambda^{\frac{1}{q-1}} \exp \left\{ -\lambda \varepsilon + \right. \\ \left. + \lambda^2 \frac{N(b-a)^{2H} 2^{1-2H} p}{(1-p)^2} + \right. \\ \left. + \lambda^{\frac{2a-2H}{a-2H}} \frac{N^{\frac{a}{a-2H}} H^{\frac{2H}{a-2H}}}{(1-p)^{\frac{a}{a-2H}} C^{\frac{2H}{a-2H}}} \left(\frac{2^{\frac{3H-a}{a-2H}}}{\alpha^{\frac{2H}{a-2H}}} - H \right) \right\}.$$

Список використаних джерел

1. Козаченко Ю.В., Василюк О.І., Ямненко Р.Є. φ -субгауссові випадкові процеси, К.:ВПЦ "Київ. ун-т", 2008. – 231 с.
2. Yamnenko R. Ruin probability for generalized φ -sub-Gaussian fractional Brownian motion, Theory of Stochastic Processes. – 2006. – Vol. 12 (28), no.1-2. – P. 261-275.
3. Kozachenko Yu., Vasylyk O., Yamnenko R. Upper estimate of overrunning by $\text{Sub}_\varphi(\Omega)$ random process the level specified by continuous function. Rand. Op. and Stoc. Eq. – 2005. – Vol. 13, No. 2. – P. 111-128.
4. V. V. Buldygin, Yu. V. Kozachenko. Metric characterization of random variables and random processes, AMS, Providence RI, 2000.

Надійшла до редколегії 01.10.2009

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

УДК 539.595

Ю.Є. Василевський, аспірант
О.С. Лимарченко, д.т.н., професор

Вплив зміни швидкості течії рідини на нелінійний перерозподіл енергії при коливаннях трубопроводу

На основі розробленої нелінійної моделі динаміки трубопроводу при швидкісному русі рідини проводяться дослідження задач динаміки трубопроводу. Розглядається поведінка системи при втраті прямолінійної форми трубопроводу в околі критичної швидкості для різних законів зміни швидкості руху рідини. Аналізуються можливості використовувати різні режими швидкості течії для зменшення негативного впливу наближення до критичної швидкості.

Ключові слова: трубопровід, нелінійна дискретна модель, критична швидкість, пульсації швидкості.

Yu.E. Vasilevskiy, PhD student
O.S. Limarchenko, Dr. Sci.(Engineering), professor

Influence over changing the velocity on nonlinear re-distribution of energy in the process of pipeline oscillation

We conducted investigation of pipeline dynamics on the basis of the developed nonlinear model of pipeline dynamics with high speed liquid motion. System behavior near loss of linear shape of pipeline in the vicinity of the critical velocity for different laws of liquid velocity changing was examined. Analysis of possible usage of different liquid velocity modes for decrease of negative influence by approaching to critical velocity was done.

Key Words: pipeline, nonlinear discrete model, critical velocity, velocity pulsation.

E-mail: olelim2000@yahoo.com, yuve@univ.kiev.ua

Статтю представила кафедра механіки суцільних середовищ.

1 Вступ

В роботі досліджується система, яка складається з пружної труби та рідини. Поздовжний рух рідини розглядається як заданий, одновимірний, трубопровід розглядаємо на основі балочної моделі.

Метою статті є аналіз поведінки системи трубопровід-рідина на основі нелінійної дискретної моделі динаміки трубопроводу з рідиною при різних законах зміни швидкості течії. Особлива увага приділяється поведінці системи при наближенні до критичних швидкостей течії, коли спостерігається втрата стійкості прямолінійної форми трубопроводу.

2 Постановка задачі

Поперечні коливання трубопроводу будемо описувати змінною $u(x, t)$, де x – поздовжня координата (кінці трубопроводу відповідають координатам $x = 0$ і $x = l$), t – час.

Рівняння руху трубопроводу з рідиною були отримані на основі варіаційного принципу Гамільтона-Остроградського з точністю до величин третього порядку малості [1,2]. Ця модель приймає до уваги всі відомі в літературі нелінійні механізми, які визначають рух трубопроводу з рідиною (сили інерції, пружні сили, коріолісові сили, сили внутрішнього тиску в трубі, сили поздовжнього розтягу труби, та їх взаємний вплив). Для подальшого спрощення моделі скористаємося методом модальної декомпозиції [3].

$$u(x, t) = \sum c_i(t) A_i(x). \quad (2)$$

Тут $c_i(t)$ – амплітудні параметри коливань, залежні від часу, $A_i(x)$ – форми коливань, які є повною ортогональною системою функцій [4].

В амплітудних параметрах дискретна модель системи трубопровід – рідина набуває такого вигляду [2].

$$\begin{aligned} \ddot{c}_i = & -\frac{EJ}{\rho + \mu} \kappa_i^4 c_i + \frac{7}{2} \frac{\rho V^2}{(\rho + \mu) N_i} \sum_j c_j \beta_{ij}^1 + \frac{2\rho V}{(\rho + \mu) N_i} \sum_j c_j (\beta_{ij}^1 - \beta_{ji}^1) - \frac{PF}{(\rho + \mu) N_i} \sum_j c_j \beta_{ij}^2 - \\ & - \frac{2\rho V}{(\rho + \mu) N_i} \sum_j c_j \beta_{ij}^3 - \frac{13}{4} \frac{\rho V^2}{(\rho + \mu) N_i} \sum_{j,k} c_j c_k d_{ijk}^4 - \sum_{j,k} c_j c_k \frac{1}{N_i} \left(d_{ijk}^5 - \frac{1}{2} d_{ijk}^6 \right) - \frac{EJ}{(\rho + \mu) N_i} \sum_{j,k} c_j c_k d_{ijk}^7 - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{2EF}{(\rho + \mu)N_r} \sum_{ijk} c_i c_j c_k d_{ijk}^3 - \frac{1}{2N_r} \sum_{ijk} c_i c_j \left(- \frac{EJ}{\rho + \mu} \chi_{ijk}^4 c_r + \frac{7}{2} \frac{\rho V^2}{(\rho + \mu)N_r} \sum_i c_i \beta_{ir}^2 + \right. \\ & \left. - \frac{PF}{(\rho + \mu)N_r} \sum_i c_i \beta_{ir}^2 - \frac{2\rho V}{(\rho + \mu)N_r} \sum_i c_i \beta_{ir}^2 \right) \end{aligned} \quad (3)$$

де ρ і μ – відповідно поздовжні густини рідини та труби, EJ і F згинна жорсткість та площа поперечного перерізу балки, $V = V(t)$ – задана швидкість течії рідини, P – внутрішній тиск в рідині. Подальше дослідження перехідних процесів руху трубопроводу виконується на основі приведення системи (3) до форми Коші і її чисельного інтегрування на основі методу Рунге-Кутта.

3 Результати проведених досліджень

Чисельне моделювання здійснювалося для випадку шарнірно закріпленого з обох боків циліндричного сталевго трубопроводу з водою довжиною 1 м, внутрішній радіус – 2 см, товщина труби – 1 мм. Початкові умови задачі визначаються відхиленням по другій формі

$$\begin{aligned} c_2(0) &= 0,02, \quad c_i(0) = 0, \quad i = \overline{1,10} \quad (i \neq 2); \\ \dot{c}_i(x,0) &= 0, \quad i = \overline{1,10}. \end{aligned} \quad (4)$$

Будемо досліджувати поведінку системи трубопровод – рідина в околі критичної швидкості, при якій, як відомо [5, 6], частота коливань труби з рідиною, що тече, обертається в нуль. Критична швидкість є порогом втрати стійкості прямолинійної форми трубопроводу.

Для чисельного моделювання розглянемо три режими руху рідини – режим руху зі сталою швидкістю [7], пульсації рідини з різною частотою та режим руху при розгоні рідини.

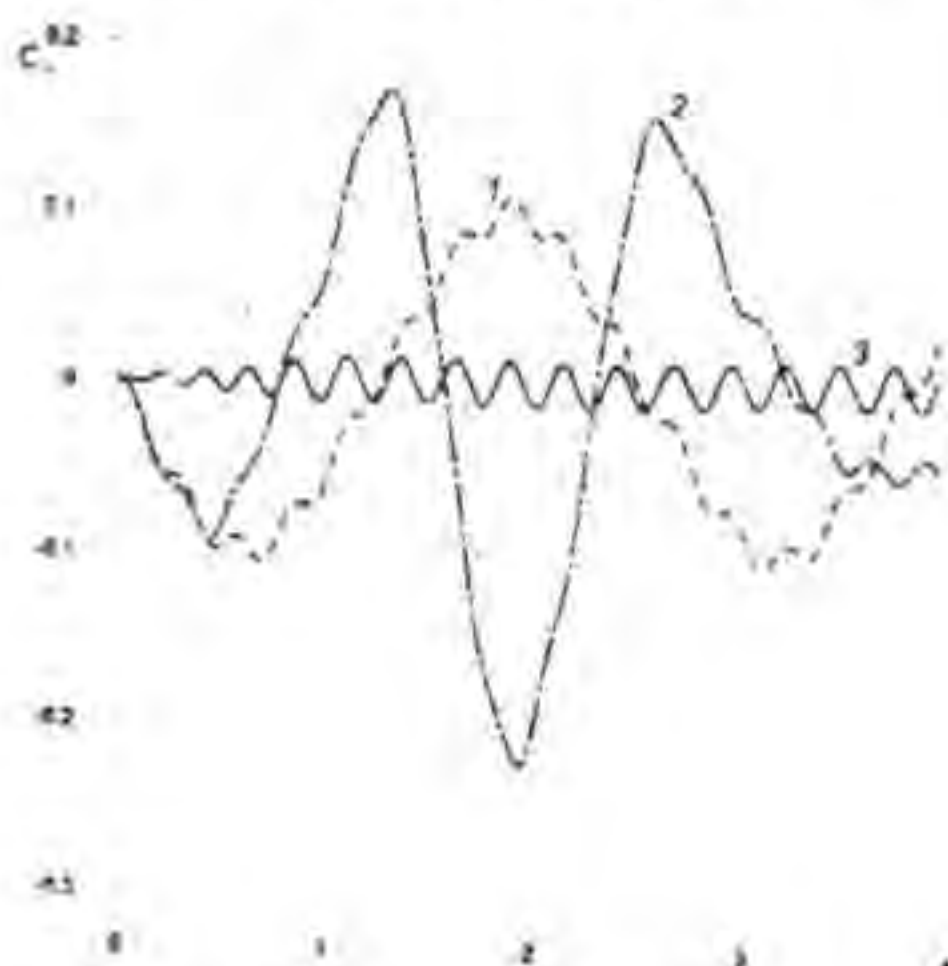


Рис. 1. Амплітуди першої форми коливань при русі рідини в околі критичної швидкості

На Рис. 1–2 показано зміну в часі амплітуд першої та другої форми коливань, відповідно для різних режимів руху рідини: крива 1 відповідає амплітуді коливань системи при течії рідини зі сталою критичною швидкістю, крива 2 – пульсації рідини в околі критичної швидкості з максимальними відхиленнями рівними 10% від критичної швидкості, з частотою пульсації, яка співпадає з частотою коливань трубопроводу за першою формою, крива 3 – режим розгону рідини (швидкість рідини лінійно зростає до кола критичного значення $0,97V_{cr}$, далі рухаючись зі сталою швидкістю).

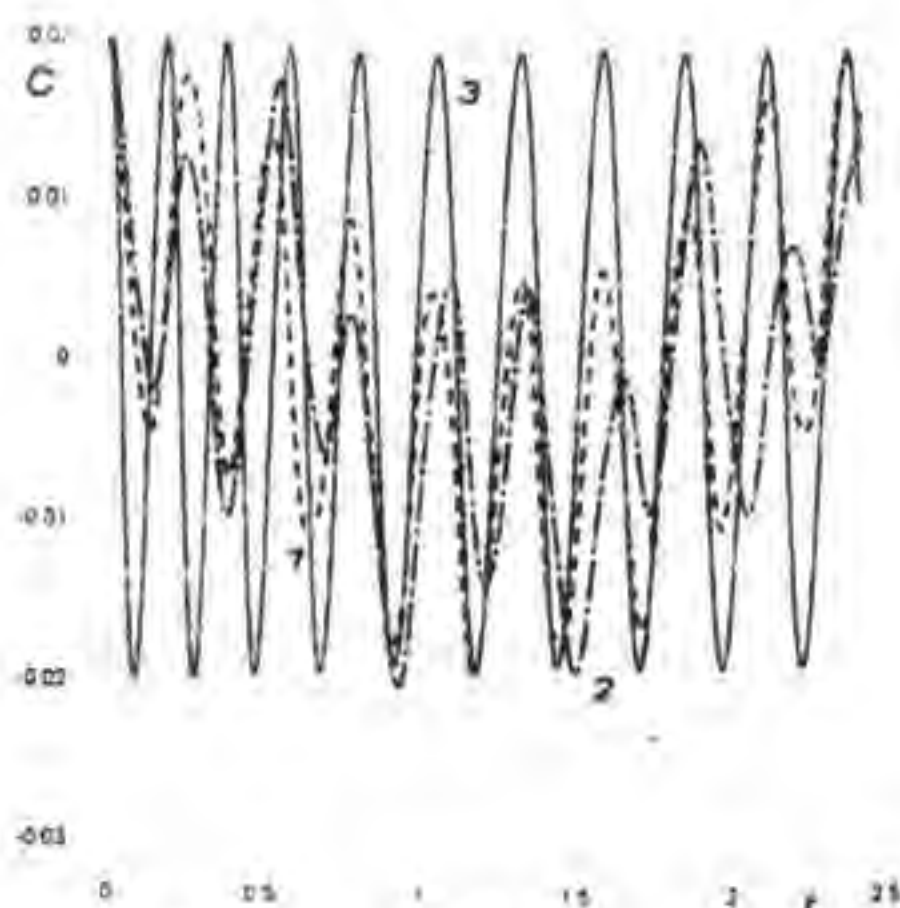


Рис. 2. Амплітуди другої форми коливань при русі рідини в околі критичної швидкості

У вихідному стані система має початкове збурення за другою формою коливань. Течія рідини сприяє перерозподілу енергії коливань балки і руху рідини, які в підсумку в околі критичної швидкості можуть докорінно змінити характер поведінки системи. Як свідчить крива 1, при русі рідини з критичною швидкістю система втрачає прямолинійну форму труби. Для першої форми коливань, згідно проведених розрахунків, з часом коливання досягають амплітуд, які перевищують у 5 разів значення початкових відхилень другої форми. Розрахунки підтверджують, що в околі руху рідини з першою критичною швидкістю має місце передбачена на основі лінійної моделі втрата прямолинійної форми трубопроводу [5, 6]. Енергія перерозподіляється з початково збудженої другої форми до першої (амплітуда другої форми зменшується, про що

свідчить Рис. 2). При пульсаціях течії в околі критичної швидкості амплітуда першої форми збільшується суттєвіше ніж при русі зі сталою критичною швидкістю, одночасно майже вдвічі зростає і амплітуда другої форми. Інші за характером явища можна спостерігати при швидкісному режимі течії рідини, коли швидкість розганяється до критичної, але не досягає її (крива 3). Тоді коливання здійснюються без втрати прямолінійної форми трубопроводу. Як видно з Рис. 1 та 2 при лінійному зростанні швидкості від нуля до $0,97V_{cr}$, та подальшому русі рідини з постійною швидкістю $0,97V_{cr}$ коливання системи відбуваються з невеликими амплітудами.

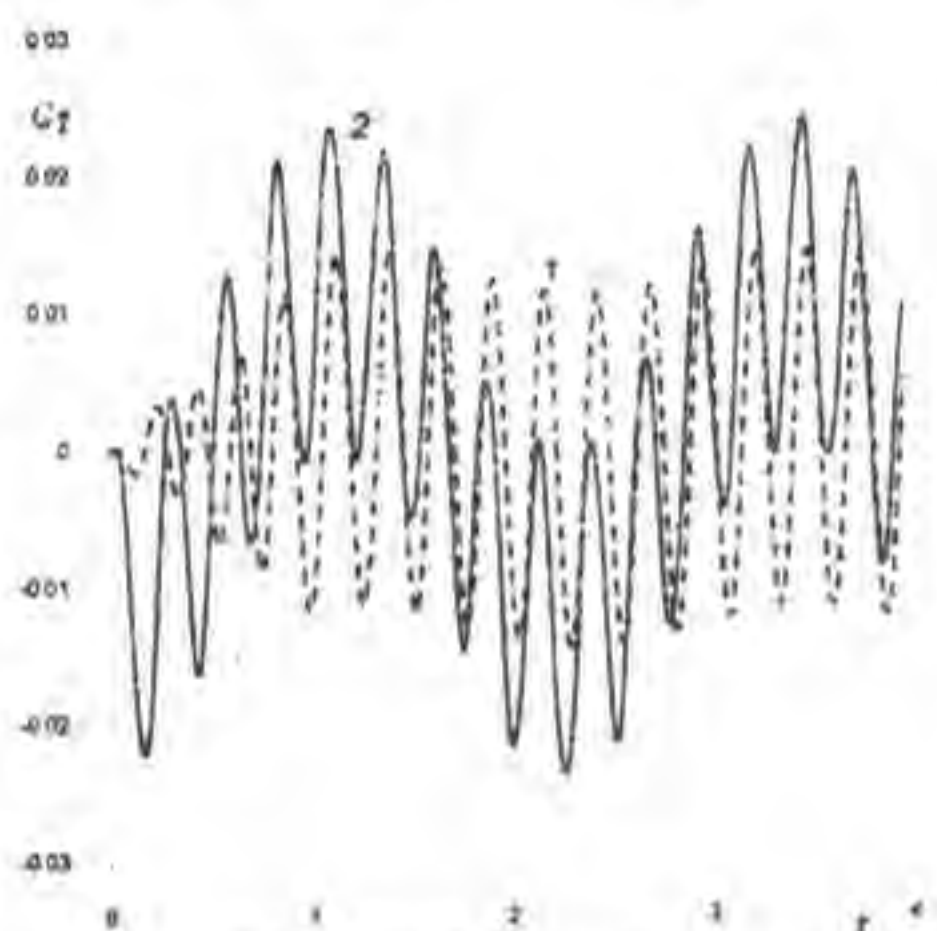


Рис.3. Амплітуди коливань першої форми при розгоні рідини

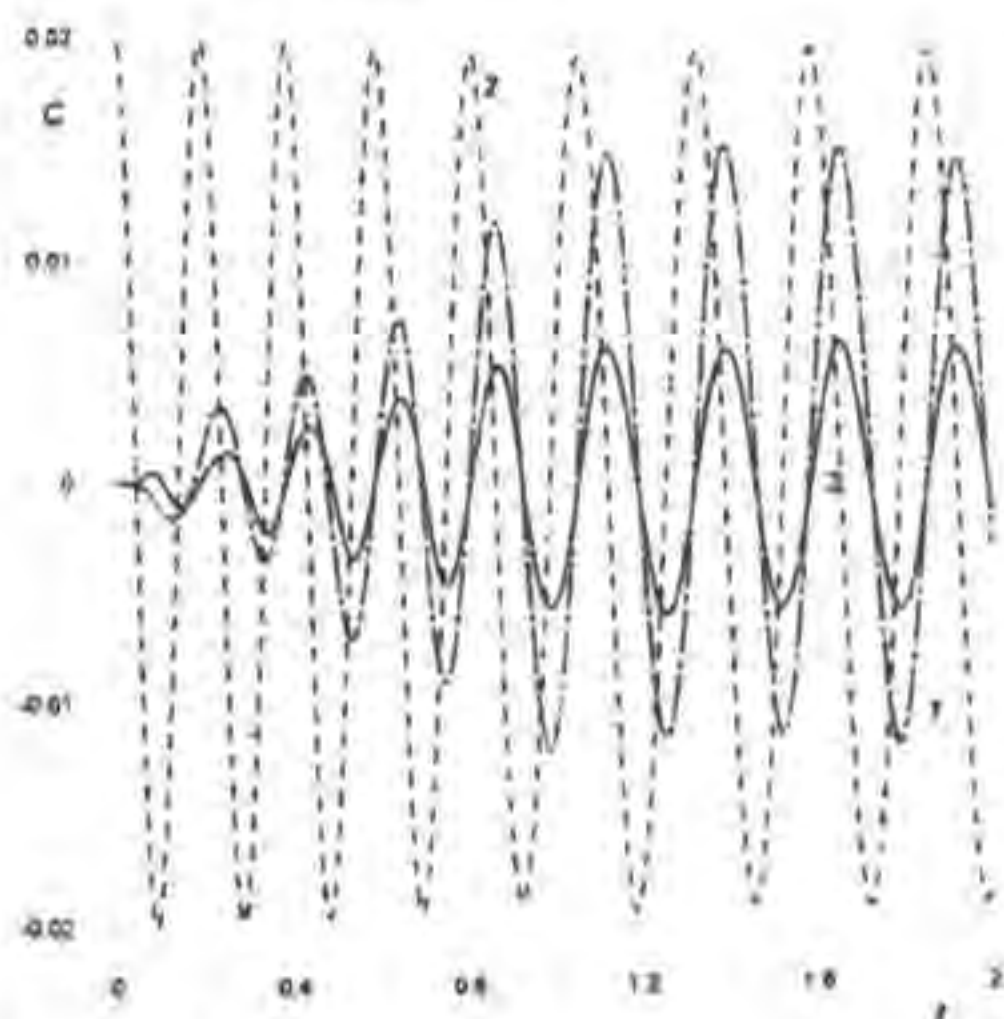


Рис.4. Амплітуди c_1, c_2, c_3 при розгоні до $V = 0,97V_{cr}$

Колівання трубопроводу при розгоні рідини залежать суттєво від швидкості руху рідини.

Досліджувався випадок розгону рідини до близьких до критичних значень швидкості течії за різний час розгону та подальший рух системи з постійною швидкістю рівній 97 % від першої критичної швидкості (Рис.3). При розгоні рідини за час рівний періоду першої форми коливань процес коливань розвивається рівномірно і після переходу до постійної швидкості представляє собою коливання першої форми з незначними проявами модуляції (крива 1). Якщо зробити розгін більш інтенсивним, то отримаємо коливання за першою формою, з суттєвими проявами модуляції (крива 2). Періоди модуляції в обох випадках приблизно однакові.

У випадку миттєвого розгону рідини до значення швидкості $V = 0,97V_{cr}$, амплітуда першої форми зростає до амплітуд приблизно в чотири рази більших початкових збурень системи.

На Рис. 4 показано закон зміни амплітуд коливань перших трьох форм від часу при розгоні рідини до $V = 0,97V_{cr}$ за час рівний періоду першої форми коливань системи. Домінуючою залишається початково збурена друга форма коливань, проте при збільшенні швидкості пропорційно зростають і інші форми (на Рис.4 продемонстроване зростання амплітуд першої та третьої форм).

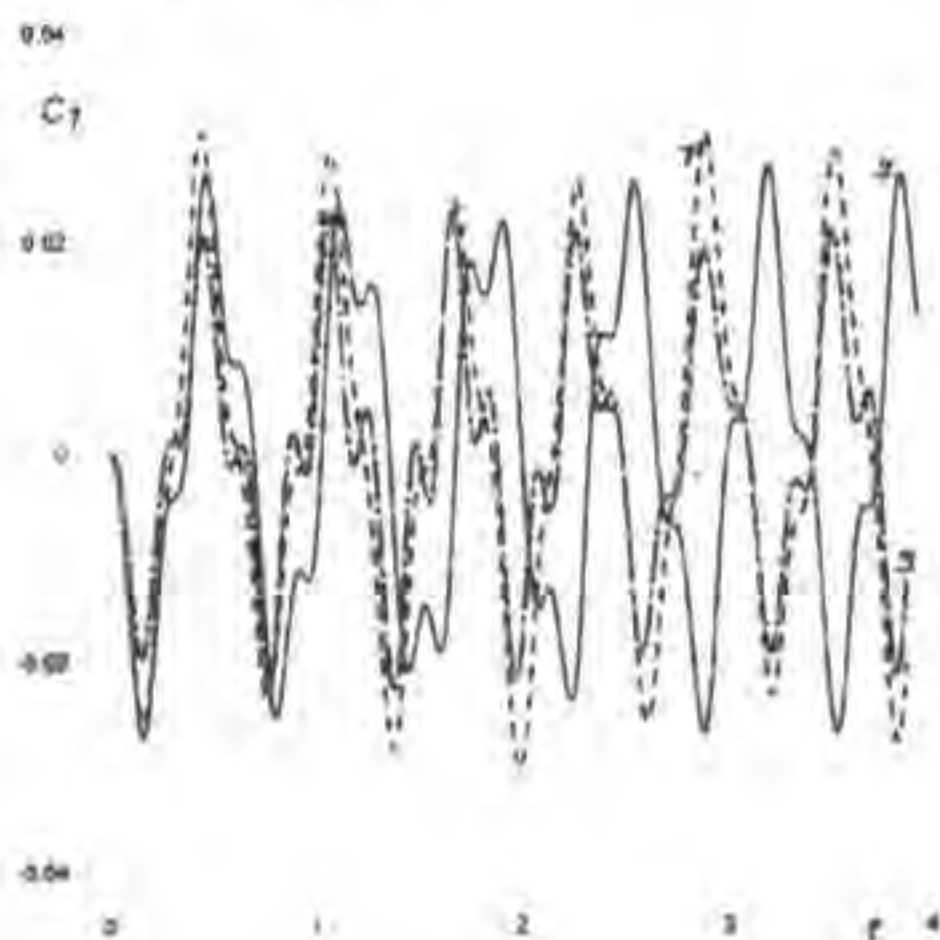


Рис. 5. Амплітуди першої форми коливань при пульсації в околі половини критичної швидкості

Розглянемо рух рідини у трубопроводі з пульсацією швидкості в околі половини першої критичної швидкості. Максимальні відхилення при пульсації, як і у вищерозглянутому випадку пульсації в околі критичної швидкості, виберемо $0,1V_{cr}$. Досліджено вплив частоти пульсацій швидкості течії на поведінку системи. Розгля-

немо пульсації з частотами рівними частоті коливань першої форми трубопроводу, одній п'ятій частоти коливань першої форми трубопроводу та п'яти частотам коливань першої форми труби, позначивши їх відповідно на Рис. 5 та 6 кривими 1, 2 та 3. Зміна першої форми коливань системи свідчить про нелінійний характер процесів, при цьому при більших частотах пульсації амплітуди першої форми коливань менші, ніж при низько-частотних пульсаціях. При пульсаціях з частотою рівною частоті коливань першої форми трубопроводу (крива 1) вплив нелінійних механізмів практично не спостерігається, а для високих частот пульсації прояв нелінійних механізмів є найбільшим.

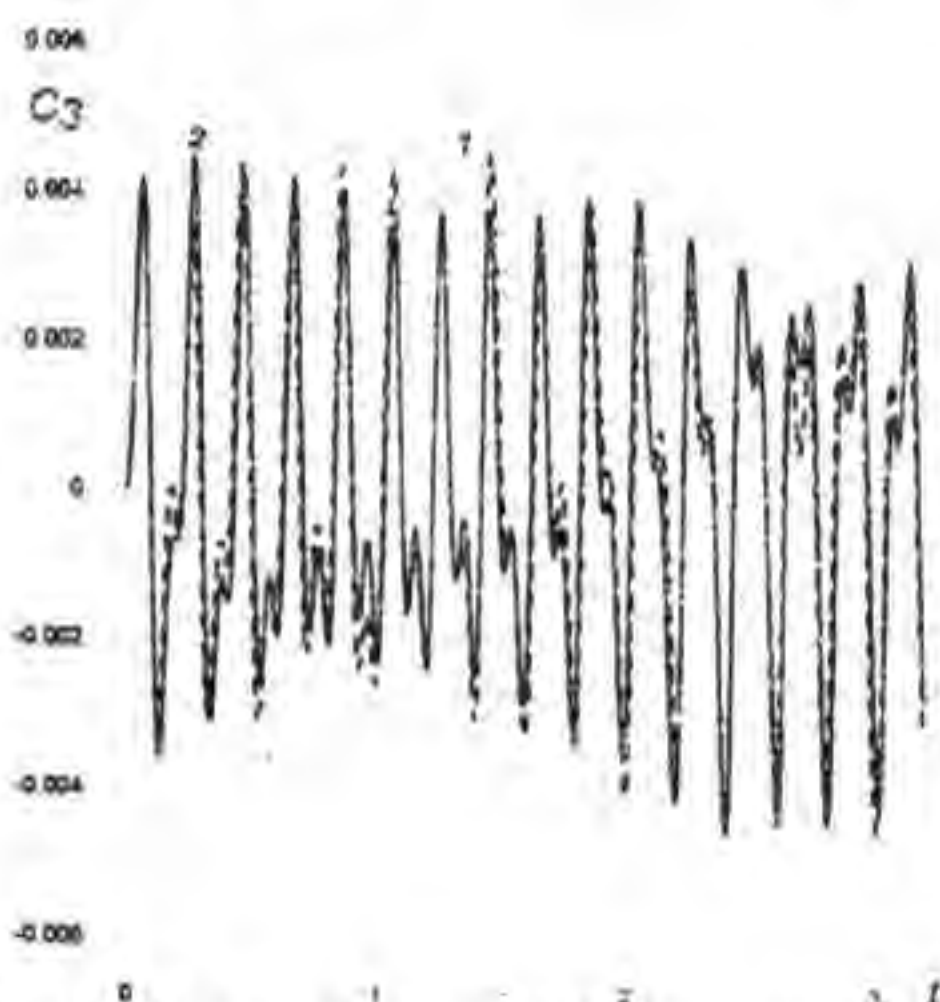


Рис. 6. Амплітуди третьої форми коливань при пульсації в околі половини критичної швидкості

Для другої форми коливань для всіх трьох випадків пульсації суттєво проявляється ефекти модуляції. Третя форма коливань при пульсаціях характеризується особливою поведінкою. Для частоти пульсації, що дорівнює одній п'ятій частотам коливань першої форми труби, модуляція проявляється найбільш суттєво, і окремі моменти часу коливання системи наближаються до антирезонансу, коли амплітуди коливань прямують до нуля.

4 Висновки

Проведенні дослідження демонструють суттєву залежність швидкості рідини та прояву нелінійних механізмів енергообміну. Поведінка системи значно ускладнюється коли швидкість течії наближається до критичних значень. Проте внесення пульсацій течії в околі критичної швидкості не виключає прояву втрати прямолінійної форми трубопроводу, хоча при цьому значно змінюється механізми енергообміну між формами

коливань. При розгоні рідини до швидкості близької до першої критичної суттєвим є ступінь інтенсивності розгону. При швидкісному розгоні коливання трубопроводу відбуваються з більшою амплітудою і ступінь прояву нелінійності є більш помітним. При повільному розгоні прояв цих ефектів зменшується, проте амплітуди коливань системи досягають менших значень ніж у випадку течії рідини зі сталою швидкістю. Частота пульсації потоку суттєво впливає на прояви модуляційних ефектів. Для частот пульсації, що значно менше частоти першої форми коливань трубопроводу ефекти модуляції є визначальними і в системі може спостерігатися явище антирезонансу. Прояв нелінійностей найменший при частотах пульсації рівних частотам першої форми коливань.

Список використаних джерел

1. Лимаренко О.С., Митраццо Дж., Ясинский В.В., Динамика вращающихся конструкций с жидкостью. – Київ: ГНОЗІС, 2002. – 348 с.
2. Василевский Ю.Е., Лимарченко О.С. Нелинейная модель динамики трубопровода при скоростном течении жидкости // Комплексный анализ і течії з вільними границями, Збірник праць Інституту математики НАН України. – 2, № 4. – Київ: Інститут математики НАН України. – 2006. – С. 322-334.
3. Михлин С.Г. Вариационные методы в математической физике. – М: Наука, 1970. – 512 с.
4. Бабаков И.М. Теория колебаний. – М: Наука, 1968. – 560 с.
5. Бондарь Н.Г. Нелинейные автономные задачи механики упругих систем. – К.: Будівельник, 1971. – 265 с.
6. Феодосьев В.И. О колебаниях и устойчивости трубы при протекании через нее жидкости, // Инженерный сборник. – 1951. – 10. – С. 251-257.
7. Василевский Ю.Е., Лимарченко О.С. Нелинейная динамика трубопровода с жидкостью в околі критичних швидкостей течії // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2009. – № 1. – С. 41-46.

Надійшла до редколегії 25.08.2009

УДК 539.3:519.6

Етері Л. Гарт, к. ф.-м. н., доцент
Вадим С. Гудрамович, член-кореспондент
НАН України, професор
Сергій А. Рябоконт, аспірант

Розв'язування задач пружно-пластичної рівноваги пластин з прямокутним і круговим отворами на основі проекційно-ітераційних схем реалізації методу скінченних елементів

Досліджена пружно-пластична рівновага прямокутних пластин з прямокутним і круговим отворами. Врахування пластичного деформування матеріалу здійснюється з використанням змінних параметрів пружності і деформаційної теорії пластичності з побудовою схем послідовних наближень. Застосовано варіаційний принцип теорії пластичності. Розв'язки одержані з використанням проекційно-ітераційних схем реалізації методу скінченних елементів. Розрахунки проведені на послідовності рівномірних і адаптивних сіток. Здійснено порівняння ефективності проекційно-ітераційних схем реалізації із традиційним методом скінченних елементів.

Ключові слова: пружно-пластична рівновага, прямокутний, круговий отвір, метод скінченних елементів, проекційно-ітераційні схеми.

E-mail: hudramovich@i.ua, comrimech@ua.fm

Статтю представив член редколегії д. ф.-м. н., професор Мелешко В. В.

1 Вступ

Дослідження напружено-деформованого стану і несучої здатності пластин і оболонок, які мають отвори, становлять значний інтерес. Саме такі особливості конструкцій, що мають суттєву конструктивну неоднорідність і викликають концентрацію напружень, потребують розв'язання складних задач механіки деформівного твердого тіла. Такі задачі мають значення для механіки руйнування: процес руйнування починається з утворення порушень суцільності, які моделюються отворами різних конфігурацій.

Важливу і складну проблему дослідження пластин і оболонок з отворами суттєвий вклад в світовій практиці розвитку механіки деформівного твердого тіла внесли українські

Eteri L. Hart, Cand. Sci (Phys.-Math.), Associate Professor
Vadym S. Hudramovych, Corresponding member of NAS Ukraine, Professor
Sergej A. Rjabokon, PhD student

Solution of problems elastoplastic equilibrium for plates with rectangular and circular holes founded on projective-iterative schemes of finite element method realization

Elastoplastic equilibrium of rectangular plates with central rectangular and circular holes is developed. Plastic deformation of material was taken into account with use of the variable parameters of elasticity method and deformation theory plasticity with construction of corresponding schemes of successive approximations. Variational principle of plasticity is used. Solutions founded on projective-iterative schemes of finite element method realization are obtained. Calculations using uniform and sequence of adaptive grids are developed. Efficiency comparison of a projective-iterative schemes of the finite element method realization with traditional one is given.

Key Words: elastoplastic equilibrium, rectangular, circular holes, finite element method, projective-iterative schemes.

вчені [1–3]. Аспекти, пов'язані з врахуванням пластичних деформацій, розглянуто в [4–8].

При високому рівні навантаження конструкцій виникають пластичні деформації, які необхідно враховувати при дослідженні деформування [9].

Розв'язання відповідних складних задач потребує застосування ефективних чисельних методів, зокрема методу скінченних елементів (МСЕ). Актуальним при цьому є побудова розрахункових схем, які дають значну економію часу розрахунків на ПК при реалізації МСЕ. Такі схеми можуть бути побудовані, наприклад, при застосуванні проекційних і ітераційних методів [10–13]. При цьому виникає багато складних математичних питань. Посилення ідей проекційних і ітераційних методів привело до створення проекційно-ітераційних методів.

зокрема проекційно-ітераційних варіантів МСЕ, які виявилися ефективними при розв'язуванні задач теорії пружності [14–17].

2 Постановка задачі

Розглянемо задачу про напружено-деформований стан ізотропної прямокутної пластини з отвором у її центрі (прямокутним або круговим). На пластину діє розподілене навантаження P_1 , що зумовлює появу пластичних деформацій (на рис. 1 зображені $1/4$ частини пластин).

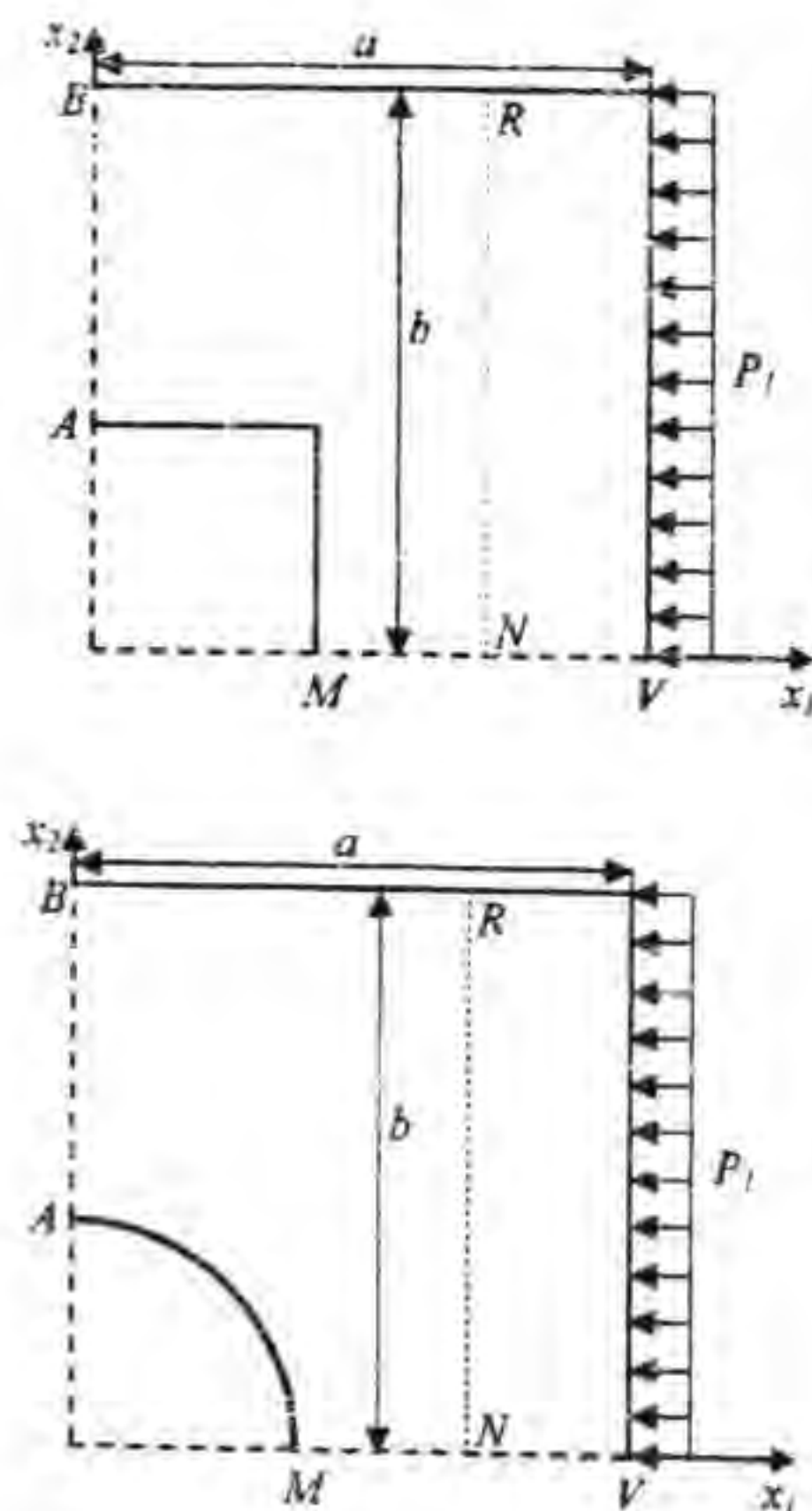


Рис. 1. Геометрія пластин

В процесі розв'язання задачі необхідно визначити межу між зонами пружного і пластичного деформування.

3 Метод розв'язання

Для знаходження розв'язку поставленої задачі застосуємо модифікований варіаційний метод [18, 19], для врахування пластичних деформацій будемо використовувати метод змінних параметрів пружності з побудовою відповідних схем послідовних наближень [20]. В

кожному наближенні розв'язуємо неоднорідну задачу теорії пружності, тобто знаходимо мінімум функціоналу [18, 19]

$$\Pi = \int_{-a}^a \int_{-b}^b \left[\frac{\bar{G}}{1-\bar{\nu}} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{\bar{G}}{1-\bar{\nu}} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{2\bar{G}\bar{\nu}}{1-\bar{\nu}} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\bar{G}}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right)^2 \right] dx_2 dx_1 - \int_{-a}^a P_1 u_1 dx_2, \quad (1)$$

де $\bar{G}$, $\bar{\nu}$ – змінні модуль зсуву і коефіцієнт Пуассона, розглядаються як відомі функції координат і обчислюються за результатами попереднього наближення.

У початковому наближенні $\bar{G} = G$, $\bar{\nu} = \nu$, де G , ν – модуль зсуву і коефіцієнт Пуассона для даного матеріалу. Для всіх наступних наближень

$$\bar{G} = \frac{1}{2\psi}, \quad \bar{\nu} = \frac{E\psi - 1 + 2\nu}{2E\psi + 1 - 2\nu},$$

де $\psi = 3\varepsilon^e / (2\sigma_i)$, σ_i , ε^e – інтенсивності напружень і деформацій відповідно.

Інтенсивність деформацій ε^e знаходимо використовуючи розв'язок задачі теорії пружності попереднього наближення

$$\varepsilon^e = \frac{2\sqrt{3}}{3} \sqrt{\frac{1-\bar{\nu}+\bar{\nu}^2}{3(1-\bar{\nu})^2} (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22})^2 - \varepsilon_{11}\varepsilon_{22} + \frac{1}{4}\gamma_{12}^2},$$

а значення σ_i взяті з діаграми деформування (рис. 2). Процес триває до досягнення заданої точності між двома сусідніми наближеннями.

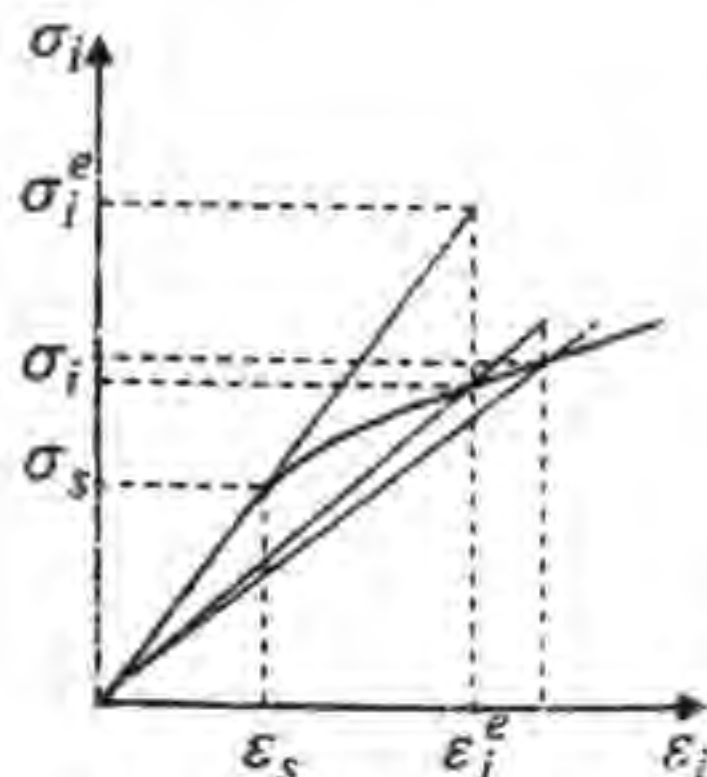


Рис. 2. Діаграма деформування

Мінімізація функціоналу (1) проводиться за проекційно-ітераційною схемою МСЕ [14–17].

4 Числовий аналіз

Розрахунки проведено для пластин зі сторонами $2a = 2b = 0,2$ м, прямокутним отвором розміром $0,08 \times 0,08$ м, круговим отвором радіусу $0,04$ м, матеріалом – алюмінієвий сплав Д16Т. Стискаючі навантаження P_1 змінювалися від $8 \cdot 10^7$ Па до $18 \cdot 10^7$ Па. Проекційно-ітераційна схема МСЕ

була реалізована на вкладених вдвічі скінченно-елементних сітках (21×21 , 41×41 , 81×81 , 161×161 , 321×321 , 641×641 , 1281×1281) із прямокутних лагранжових елементів першої степені, з точністю розрахунків 10^{-5} , параметром релаксації $\omega = 1,75$.

В таблиці 1 приведено результати числової реалізації проекційно-ітераційного варіанту МСЕ на ПК Turgion 64x2 (2 GHz, 2x512 Kb L2 cache) з 2Gb оперативної пам'яті. Програму розроблено на мові C++.

Таблиця 1

Результати розрахунків за проекційно-ітераційною схемою МСЕ

Номер сітки	Сітка	Метод змінних параметрів пружності			
		Прямокутний отвір		Круговий отвір	
		Кількість наближень	Час розрахунків, с	Кількість наближень	Час обчислень, с
1	21x21	11	0,35	10	0,4
2	41x41	10	2,8	10	2,6
3	81x81	11	26	10	21
4	161x161	11	194	10	127
5	321x321	9	625	8	210
6	641x641	8	223	8	305
7	1281x1281	8	595	8	843

Розв'язок задачі для пластини з прямокутним отвором за проекційно-ітераційною схемою МСЕ на послідовності 7-ми сіток було отримано за 9 хв 55 с, виходячи з нульового початкового наближення, що було задане на самій грубій сітці (21×21). При розв'язуванні цієї задачі традиційним МСЕ на одній останній сітці (1281×1281) з нульовим початковим наближенням розв'язок було отримано за 46 хв 10 с, що в 4,5 рази довше, ніж за проекційно-ітераційною схемою МСЕ. Отримані розв'язки добре узгоджуються з результатами наведеними у [19].

Для пластини з круговим отвором час розрахунків проекційно-ітераційним варіантом

МСЕ на послідовності 7-ми сіток становить 14 хв 3 с, а традиційним МСЕ на одній останній сітці (1281×1281) – 24 хв 10 с, що в 1,5 рази довше, ніж проекційно-ітераційним варіантом МСЕ.

На рис. 3 наведено розподіл величин σ_{11}/P_1 (а, в) і σ_{22}/P_1 (б) в характерних перерізах пластини при навантаженні $P_1 = 18 \cdot 10^7$ Па, де суцільні лінії відповідають розв'язкам, що отримані на послідовності 6-ти сіток, штрихові – 7-ми сіток (1 – пластині з прямокутним отвором, 2 – пластині з круговим отвором). Спостерігається асимптотична збіжність розв'язків при дробленні сітки.

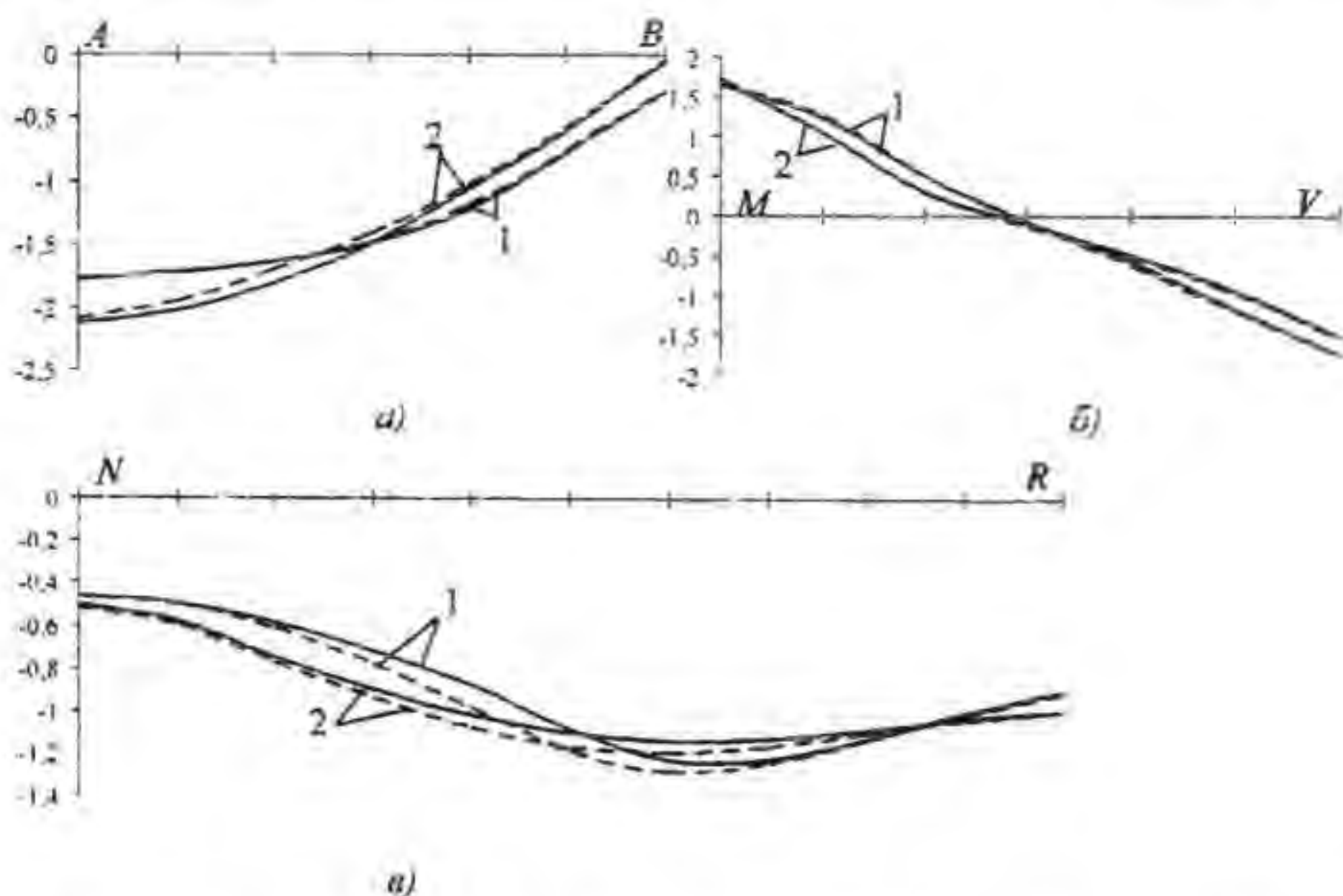


Рис. 3. Порівняння розв'язків, отриманих на послідовності 6-ти і 7-ми сіток

На рис. 4 подано розподіл величин σ_{11}/P_1 (а, в) і σ_{22}/P_1 (б) в характерних перерізах пластини при навантаженні $P_1 = 18 \cdot 10^7 \text{ Па}$, де суцільні лінії

відповідають пружним розв'язкам, штрихові – пружно-пластичним (1 – пластині з прямокутним отвором, 2 – пластині з круговим отвором).

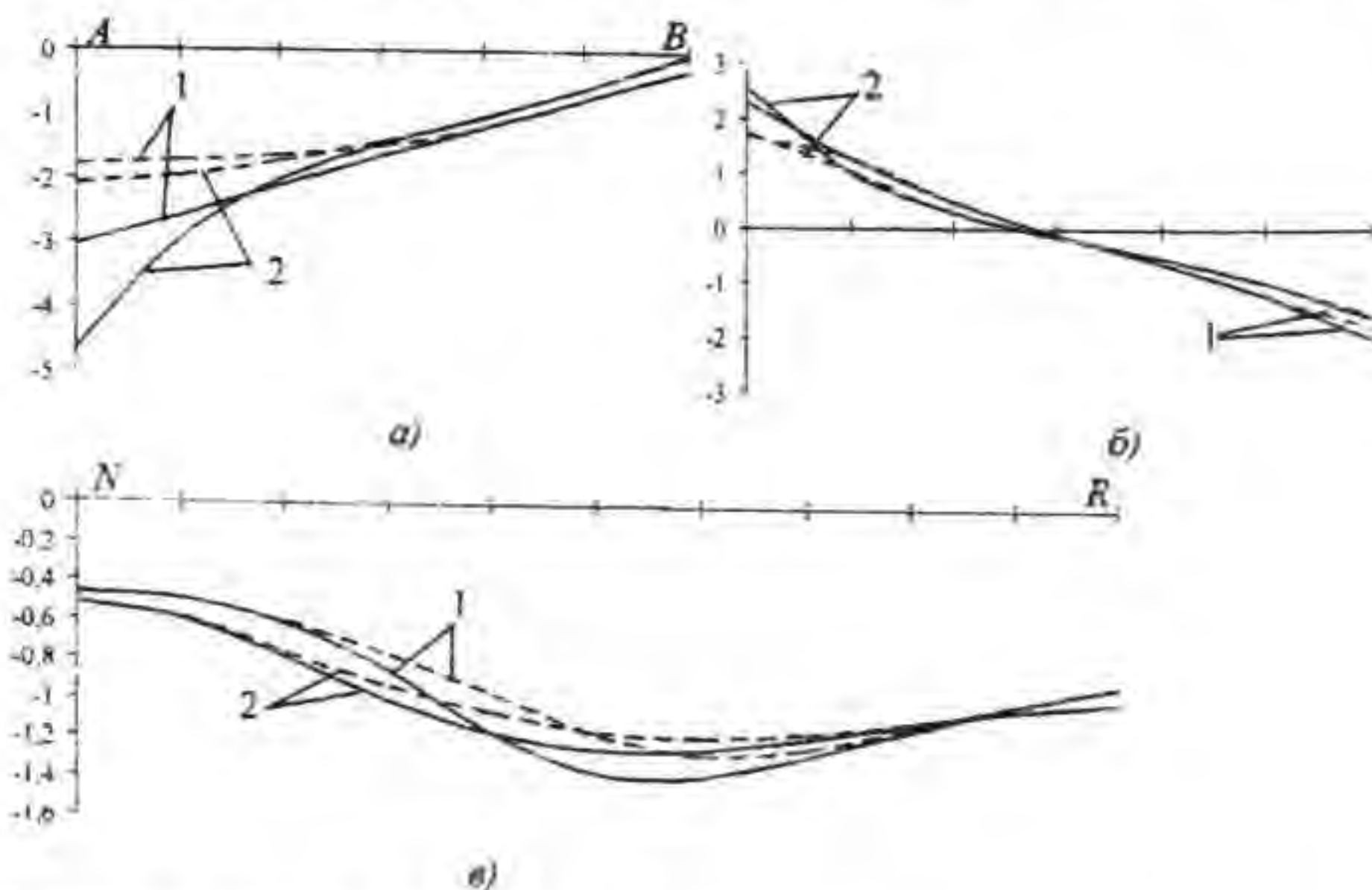


Рис. 4. Розподіл коефіцієнтів напружень пружної і пружно-пластичної задач у характерних перерізах

На рис. 5 зображено розвиток зон пластичності (позначені сіткою) зі збільшенням навантаження.

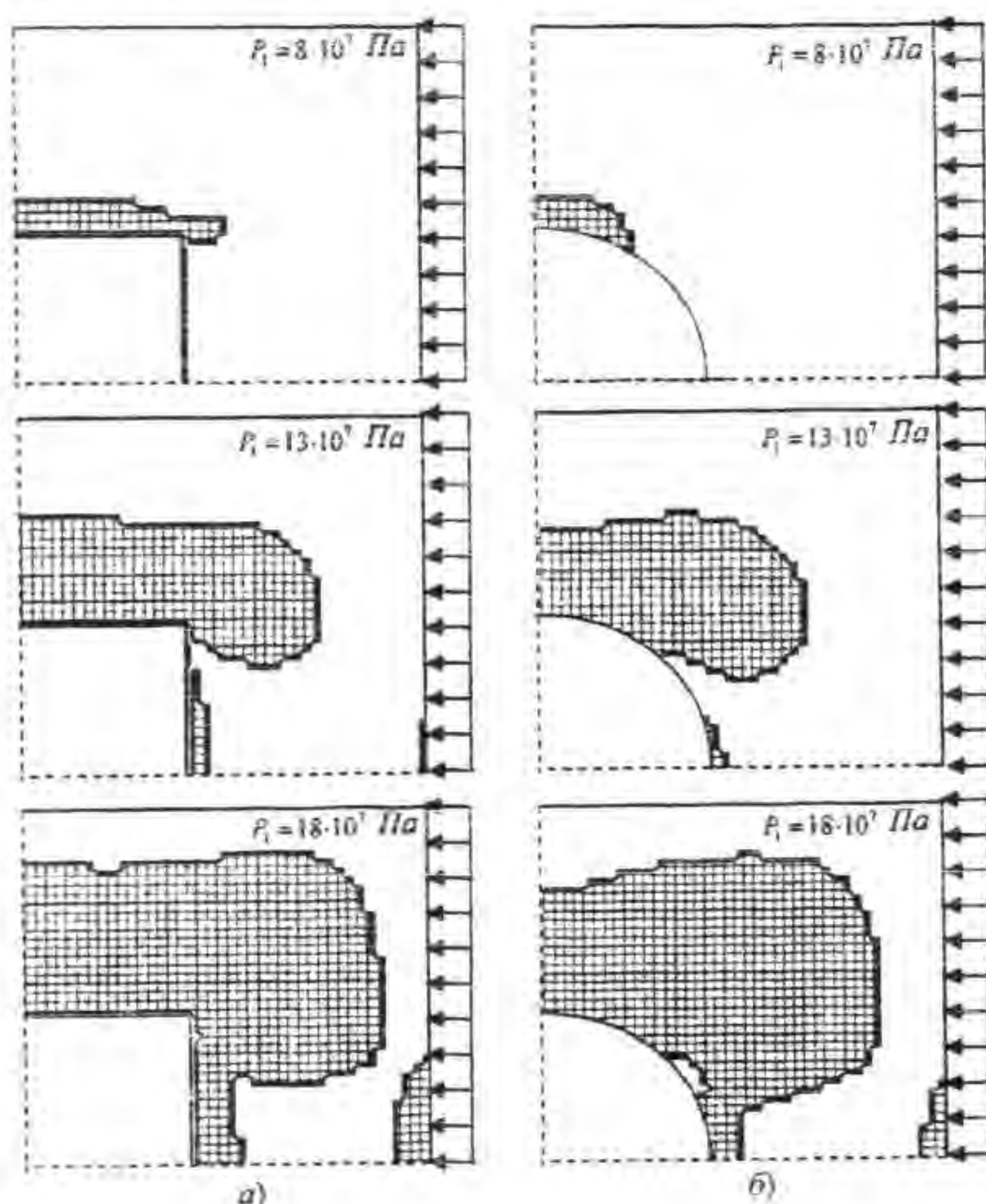


Рис. 5. Розвиток зон пластичності: а) для пластини з прямокутним отвором; б) для пластини з круговим отвором

Для зменшення витрат часу розрахунків на ПК при розв'язуванні задач з концентраторами напружень доцільно використовувати адаптивні сітки, що згущаються в зонах концентрації напружень [16]. Проведено дослідження ефективності використання послідовності адаптивних сіток (31×31 , 61×61 , 121×121 , 241×241 , 481×481 , 961×961) в проекційно-ітераційному процесі. Так, розв'язок задачі для пластини з прямокутним отвором (з круговим отвором) проекційно-ітераційним варіантом МСЕ на послідовності 6-ти адаптивних сіток було отримано за 5 хв 46 с (6 хв 25 с), виходячи з нульового початкового наближення, що було задане на самій грубій сітці (31×31). Порівнюючи з результатами обчислень на послідовності 7-ми рівномірних сіток, маємо, що використання адаптивних сіток в проекційно-

ітераційному процесі в 1,5 рази ефективніше за використання рівномірних сіток для пластини з прямокутним отвором і в 2 рази – для пластини з круговим отвором з точки зору економії часу розрахунків на ПК. При цьому значення одержаних напружень відрізняються на величини менші за 0,5%.

5 Висновки

1) Розроблена методика розв'язування плоскої задачі про пружно-пластичне деформування пластини з центральним отвором (прямокутним або круговим) на основі проекційно-ітераційних схем реалізації МСЕ;

2) застосування проекційно-ітераційних схем реалізації МСЕ для розв'язування задач пружно-пластичного стану для пластин з отворами має

значні переваги в порівнянні з традиційним МСЕ (машинного часу витрачено в 2–4 рази менше);

3) використання адаптивних сіток в проекційно-ітераційному процесі з точки зору економії часу розрахунків на ПК в 1,5–2 рази ефективніше за використання рівномірних сіток.

Розроблений алгоритм і комплекс програм для ПК можуть бути застосовані для розв'язування більш складних пружно-пластичних задач для пластинчато-оболочечних конструкцій з отворами.

Список використаних джерел

1. Гузь А.Н., Чернышенко И.С., Чехов В.И. Методы расчета оболочек. В 5 т. Т. 1. Теория оболочек, ослабленных отверстиями. – К.: Наук. думка, 1980. – 636 с.
2. Підстригач Я.С. Вибрані праці. – К.: Наук. думка, 1995. – 460 с.
3. Савин Г.Н. Распределение напряжений около отверстий. – К.: Наук. думка, 1968. – 888 с.
4. Гудрамович В.С. Особенности нелинейного деформирования и критические состояния оболочечных систем с геометрическими несовершенствами // Прикл. механика. – 42, № 12. – С. 3–47.
5. Гудрамович В.С. Устойчивость упруго-пластических оболочек. – К.: Наук. думка, 1987. – 216 с.
6. Гудрамович В.С., Гарт Э.Л., Рябоконь С.А. Применение проекционно-итерационного варианта метода конечных элементов к решению упруго-пластических задач для пластин с отверстиями // Методи розв'язування прикладних задач механіки деформівного твердого тіла. – 2009. – Вип. 10. – С. 76–83.
7. Сторожук Є.А., Чернышенко И.С., Руденко І.Б. Варіаційний векторно-різницький метод розв'язання пружнопластичних задач для багатозв'язних сферичних оболонок // Проблеми обчислювальної механіки і міцності конструкцій. – 2009. – вип. 13. – С. 228–234.
8. Чернышенко И.С., Сторожук Є.А., Харенко С.Б. Чисельна методика дослідження пружнопластичного стану конічної оболонки з двома круговими отворами // Проблеми обчислювальної механіки і міцності конструкцій. – 2009. – вип. 13. – С. 257–263.
9. Илькошин А.А. Пластичность. – М.-Л.: ГИТТЛ, 1948. – 376 с.
10. Красносельский М.А., Вайнник Г.М., Забрейко П.П. Приближенное решение операторных уравнений. – М.: Наука, 1969. – 455 с.
11. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука, 1981. – 416 с.
12. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
13. Шайдулов В.В. Многосеточные методы конечных элементов. – М.: Наука, 1989. – 288 с.
14. Гарт Э.Л. Проекционно-итерационные модификации метода конечных элементов в краевых задачах теории упругости // Доповіді НАН України. – 2008. – № 6. – С. 56–61.
15. Гарт Э.Л. Проекционно-итерационный вариант метода поточечной релаксации // Математичні методи та фізико-механічні поля. – 2008. – 51, № 4. – С. 70–79.
16. Гарт Э.Л. Проекционно-итерационный вариант метода конечных элементов на последовательности адаптивных сеток // Техническая механика. – 2007. – № 2. – С. 92–100.
17. Гудрамович В.С., Гарт Э.Л. Вплив форми скінченного елементу на обчислювальну ефективність проекційно-ітераційних методів при розв'язуванні плоскої задачі теорії пружності // Вісник Київськ. нац. унів. ім. Тараса Шевченка. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2008. – № 4. – С. 53–58.
18. Качанов Л.М. Вариационные методы в теории пластичности // Механика твердого тела. Труды II Всесоюзного съезда по теоретической и прикладной механике. – М.: Наука, 1966. – 3. – С. 177–190.
19. Угодчиков А.Г., Коротких Ю.Г. Некоторые методы решения на ЭЦВМ физически нелинейных задач теории пластин и оболочек. – К.: Наукова думка, 1971. – 220 с.
20. Биргер И.А. Общие алгоритмы решения задач теорий упругости, пластичности и ползучести // Успехи механики деформируемых сред. – М.: Наука, 1975. – С. 51–73.

Надійшла до редколегії 28.09.2009

УДК 539.3

В.Г.Карнаухов, д.ф.-м.н., професор
В.М.Січко, к.ф.-м.н., доцент
О.С.Карпенюк, аспірант

**Вплив фізичної нелінійності на пасивне
демпфування вимушених резонансних
коливань ізотропної в'язкопружної
циліндричної панелі**

Запропоновано скінченно-елементний метод розв'язування нелінійних задач про пасивне демпфування вимушених резонансних коливань ізотропних оболонок обертання з врахуванням впливу фізичної нелінійності. З його використанням розв'язана задача про пасивне демпфування резонансних коливань циліндричної панелі при шарнірному обпиранні її торців. Показано, що фізична нелінійність суттєво впливає на ефективність пасивного демпфування циліндричної панелі.

Ключові слова: резонансні коливання, циліндрична ізотропна панель, пасивне демпфування, фізична нелінійність.

E-mail: karn@iitp.kiev.ua

Статтю представив член редколегії д. ф.-м. н., проф. Мелешко В.В.

1. Вступ

Тонкі шаруваті циліндричні оболонки з металевих, полімерних, композитних і п'єзоелектричних матеріалів знаходять широке застосування в багатьох галузях науки й техніки: в космічній техніці, в авіа-, автомобіле-, судно-, машинобудуванні, радіоелектроніці і т. п. Для зменшення рівня коливань, забезпечення динамічної міцності елементів конструкцій, стійкої роботи апаратури та покращення комфортності машин і механізмів в сучасній техніці широко застосовуються пасивні методи демпфування, коли в конструкцію включаються в'язкопружні, пластичні чи в'язкопружно-пластичні компоненти з високими гістерезисними втратами. На ефективність таких методів впливає багато факторів, зокрема і фізична нелінійність. Ця нелінійність може виникнути із-за різних причин. Перший тип фізичної нелінійності породжується залежністю механічних властивостей від температури і нелінійною залежністю дисипативної функції від амплітуд деформацій і температури. Другий тип фізичної нелінійності породжується залежністю механічних характеристик матеріалу

V. G. Karnaukhov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor
V. M. Sichko, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Ass. Professor
O. S. Karpeniuk, PhD student

**Influence of physical nonlinearity on a passive
damping of the forced resonant vibrations of an
isotropic viscoelastic cylindrical panel**

Finite element method of solving of the nonlinear problems on a passive damping of the forced resonant vibrations of the isotropic revolution shells with taking into account an influence of physical nonlinearity is proposed. On the base the problem of the passive damping of the resonant vibrations of a cylindrical panel with simply supported edges is solved. It is shown that an influence of the physical nonlinearity on damping vibrations is considerable.

Key words: resonant vibrations, cylindrical isotropic panel, passive damping, physical nonlinearity.

від амплітуд деформацій чи напружень. Загальна теорія фізично нелінійних пасивних і п'єзоактивних матеріалів такого типу з використанням концепції комплексних характеристик розроблена в [1]. По аналогії з деформаційною теорією пластичності вважається, що складові комплексних механічних характеристик залежать від інтенсивності деформацій Γ [1]. Задача про пасивне демпфування вимушених резонансних коливань ізотропної в'язкопружної циліндричної панелі з врахуванням впливу фізичної нелінійності першого типу розглянута в [2].

В даній роботі подана постановка задачі про вплив фізичної нелінійності другого типу на пасивне демпфування вимушених резонансних коливань тонкостінних оболонок обертання, на які діє гармонічний за часом поверхневий тиск з частотою, близькою до резонансної частоти оболонки. Для моделювання термомеханічної поведінки матеріалів використовується концепція комплексних характеристик [1]: вважається, що комплексний модуль зсуву $G = G' + iG''$ залежить від амплітуд деформацій. Ця залежність знаходиться з експериментів. Задача

зводиться до розв'язку складної нелінійної системи диференціальних рівнянь, розв'язок якої знаходиться ітераційним методом в поєднанні з методом скінченних елементів.

2. Постановка і розв'язок задачі

Для розрахунку температури дисипативного розігріву до рівнянь, які описують механічну поведінку тіла, необхідно додати рівняння енергії

$$k\Delta\theta + W = c\theta \quad (1)$$

з джерелом тепла W , яке співпадає з осередненою за цикл дисипацією. Для ізотропного матеріалу дисипативна функція розраховується за формулою

$$W = \frac{\omega}{2} [2\mu^* (\varepsilon_{xx}' \varepsilon_{xx}' + \varepsilon_{yy}' \varepsilon_{yy}') + \lambda^* [(\varepsilon_{xx}''^2 + (\varepsilon_{yy}''^2)] \quad (2)$$

Якщо властивості матеріалу не залежать від температури, задача зводиться до послідовного розв'язування задачі механіки про коливання нелінійного в'язкопружного тіла і розв'язку лінійного рівняння теплопровідності з відомим джерелом тепла.

В даній статті механічна поведінка тонких оболонок описується на основі механічних гіпотез Кірхгофа-Лява. Основні співвідношення механіки оболонок – кінематичні співвідношення, рівняння руху, механічні граничні умови – можна одержати з рівнянь, представлених, наприклад, в монографії [3]. Задача про коливання і дисипативний розігрів оболонки обертання зводиться до розв'язку нелінійної комплексної системи диференціальних рівнянь

$$L_1(u, v, w, \theta) = 0; L_2(u, v, w, \theta) = 0, \quad (3)$$

$$L_3(u, v, w, \theta) = 0; L_4(u, v, w, \theta) = 0.$$

Оператори L_1, L_2, L_3, L_4 можуть бути одержані з наведених в [3] рівнянь, якщо в них вважати модуль зсуву комплексним і знехтувати нелінійними членами, які породжуються геометричною нелінійністю. Оператор L_4 описує температуру дисипативного розігріву і може бути записаний з використанням результатів, наведених в [1].

3. Метод розв'язування і результати розрахунків

Для розв'язування задачі використовується ітераційний метод пружних параметрів [1] в поєднанні зі скінченно-елементним методом. На кожній ітерації необхідно розв'язувати лінійну задачу механіки для в'язкопружного матеріалу. Для їх розв'язку застосовується метод скінченних елементів (МСЕ), який використовує варіаційне формулювання цих задач:

$$\delta\mathcal{E} = \delta\mathcal{E}_1 + \delta\mathcal{E}_2 = 0. \quad (4)$$

Тут введено такі позначення:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1 = & \frac{1}{2} \iint_V \{ C_{11} (\varepsilon_{xx}^0)^2 + 2C_{12} (\varepsilon_{xx}^0 \varepsilon_{\theta\theta}^0) + \\ & + C_{22} (\varepsilon_{\theta\theta}^0)^2 + 4C_{44} (\varepsilon_{x\theta}^0)^2 + 2K_{11} (\varepsilon_{xx}^0 \kappa_{xx}) + \\ & + 2K_{12} (\varepsilon_{xx}^0 \kappa_{\theta\theta}) + 2K_{21} (\varepsilon_{\theta\theta}^0 \kappa_{xx}) + \\ & + 2K_{22} (\varepsilon_{\theta\theta}^0 \kappa_{\theta\theta}) + 8K_{44} (\varepsilon_{x\theta}^0 \kappa_{x\theta}) + D_{11} (\kappa_{xx})^2 + \\ & + 2D_{12} (\kappa_{xx} \kappa_{\theta\theta}) + D_{22} (\kappa_{\theta\theta})^2 + 4D_{44} (\kappa_{x\theta})^2 - \\ & - \omega^2 \rho_1 (u_0^2 + v_0^2 + w^2) + \\ & + 2\omega^2 \rho_2 (v_0 \frac{\partial w}{\partial s} + v_0 \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta}) - \omega^2 \rho_3 [(\frac{\partial w}{\partial s})^2 + \\ & + (\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta})^2] \} r ds d\theta, \\ \mathcal{E}_2 = & - \iint_F (P_s u_0 + P_\theta v_0 + P_z w) r ds d\theta - \\ & - \int_L (N_s u_0 + N_\theta v_0 + N_z w - M_s \frac{\partial w}{\partial s} - M_\theta \frac{\partial w}{r \partial \theta}) dL. \end{aligned}$$

Для дослідження впливу температури дисипативного розігріву на ефективність активного демпфування коливань оболонок обертання для знаходження цієї температури використовуємо тривимірне варіаційне рівняння енергії для шаруватої оболонки [1]:

$$\begin{aligned} \iiint_V [c_T^k \rho^k \frac{\partial T}{\partial t} \delta T + \lambda_T^k \left(\frac{\partial T}{\partial z} \delta \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial T}{\partial r} \delta \frac{\partial T}{\partial r} + \right. \\ \left. + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \delta \frac{\partial T}{r \partial \theta} \right) + Q^k \delta T] r ds d\theta dz + \\ + \iint_\Sigma \alpha_T (T - T_c) \delta T d\Sigma = 0, \quad (5) \end{aligned}$$

де c_T^k – коефіцієнт теплоємності матеріалу шару оболонки; α_T – коефіцієнт теплообміну при конвективному теплообміні на поверхні Σ з

середовищем з температурою T_c ; t – час нагріву;
 λ_i^k – коефіцієнти теплопровідності.

Для зведення тривимірної варіаційної задачі теплопровідності до системи двовимірних задач приймаємо, що нормальна складова теплового потоку q_z змінюється по товщині пакету шарів по лінійному закону $q_z = q_0 + q_1 z$.

Як і в роботі [2], розв'язок варіаційних задач знаходимо МСЕ з використанням дванадцятивузлових ізопараметричних чотирикутних елементів з апроксимацією переміщень і геометрії оболонки поліномами третього степеня в межах чотирикутника. Тангенціальні складові переміщень серединної поверхні оболонки в межах елемента апроксимуються кубічними поліномами. Деталі використаного методу описано в [2].

Після розв'язку задачі механіки знаходиться дисипативна функція і потім розв'язується рівняння теплопровідності з відомим джерелом тепла.

При деформуванні на резонансних частотах за межами пружності і при реальних теплообміні та розмірах оболонок рівень температури дисипативного розігріву, як правило, перевищує розумні межі. Цей факт необхідно враховувати при дослідженні вимушених резонансних коливань пружно-пластичних і в'язкопружно-пластичних тіл за межами пружності. Розумні різні температур досягаються при деформуванні в області мікропластичності. Для моделювання термомеханічної спряженості для цього випадку можна використати модель, розроблену, наприклад, в монографії [4]. Вона дає такі вирази для складових комплексного модуля зсуву:

$$G' = G(1 - r\Gamma^\alpha), \quad G'' = gG\Gamma^\alpha$$

Тут параметри r, g, α визначаються експериментально. З другої сторони, можна просто використати експериментальні гістерезисні петлі і по них розрахувати комплексний модуль зсуву або використати табличні дані для них. Так, наприклад, наведені в [5] експериментальні дані для модуля зсуву в межах до 10% деформацій можна з великою точністю апроксимувати такими виразами:

$$G' = a_1 - b_1 \Gamma^2, \quad G'' = a_2 - b_2 \Gamma^2, \quad (5)$$

Тут для вказаного в [5] матеріалу

$$a_1 = 2,410 \cdot 10^5 \text{ Па}, \quad a_2 = 1,810 \cdot 10^5 \text{ Па},$$

$$b_1 = 0,537 \cdot 10^5 \text{ Па}, \quad b_2 = 0,380 \cdot 10^5 \text{ Па}.$$

Ця апроксимація дозволяє одержати прості аналітичні розв'язки задачі про коливання і дисипативний розігрів циліндричної панелі з фізично нелінійного матеріалу і на його основі побудувати амплітудно-частотні та температурно-частотні характеристики. Вони можуть бути еталонним при апробації чисельних методів, зокрема і методу скінченних елементів. Порівняння результатів, одержаних за допомогою аналітичних і скінченно-елементних методів для пластини, проведено в [2].

На основі описаного підходу розв'язано конкретна задача для тришарової циліндричної панелі загальною товщиною $h = 0,05 \text{ м}$ і довжиною сторін $a = b = 0,5 \text{ м}$. Осереднений коефіцієнт Пуассона $\nu = 0,31$, густина непружного матеріалу $\rho_0 = 1200 \text{ кг/м}^3$, а пружного – $\rho_1 = 7800 \text{ кг/м}^3$. Амплітуда поверхневого тиску $p_0 = 2 \cdot 10^3 \text{ Па}$. Коефіцієнт теплопровідності непружного матеріалу $\lambda_0 = 0,3 \text{ Вт/м} \cdot \text{град}$, а пружного – $\lambda_1 = 0,38 \text{ Вт/м} \cdot \text{град}$. Теплові граничні умови відповідають умовам конвективного теплообміну з зовнішнім середовищем з $\theta = 20^\circ \text{C}$, при цьому на зовнішніх поверхнях оболонки $\alpha = 5 \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{град}$. При розв'язку задачі методом скінченних елементів використовувались вказані вище експериментальні дані.

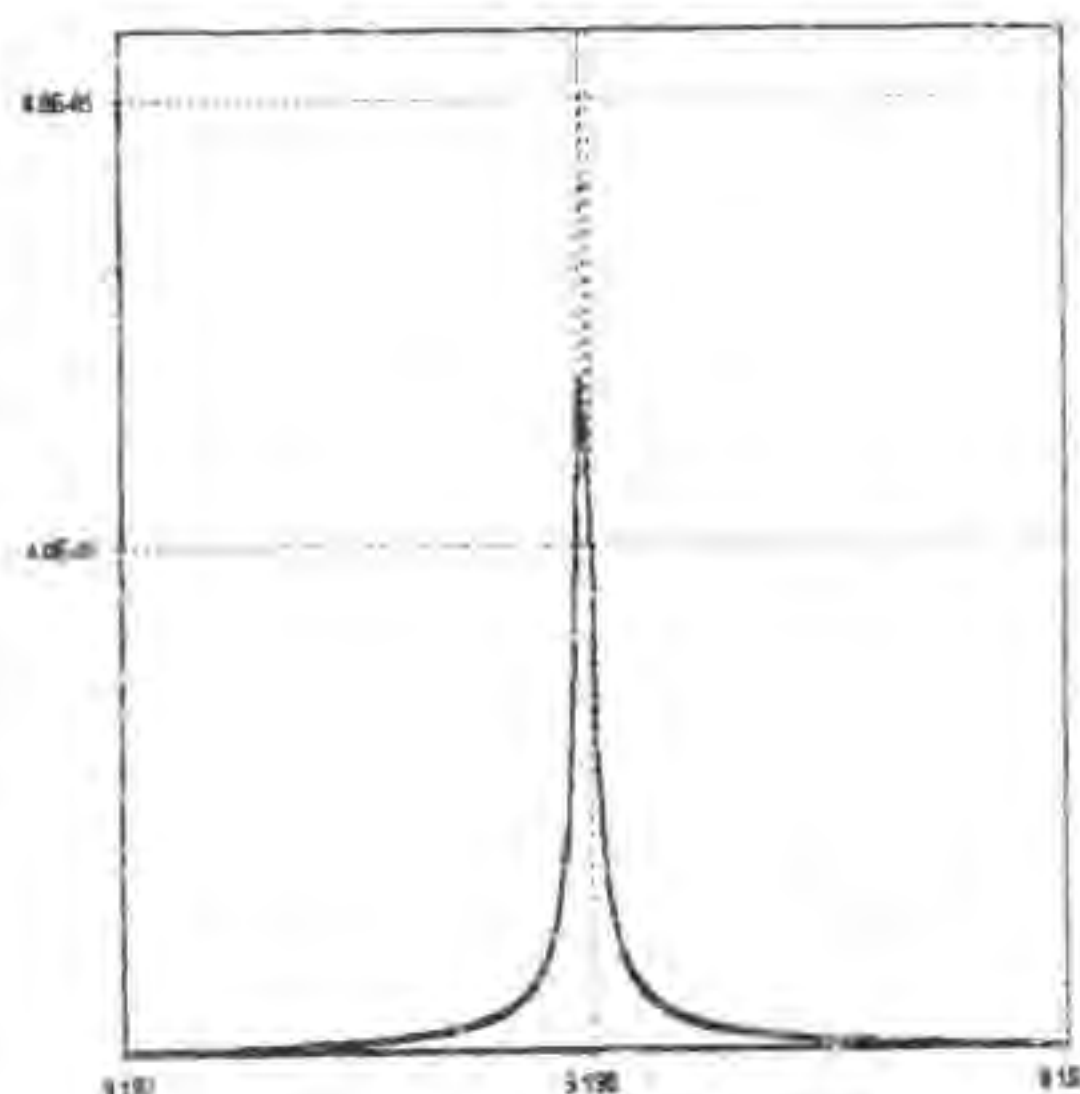


Рис. 1. Амплітудно-частотна характеристика
Числові результати, які ілюструють вплив фізичної нелінійності на амплітудно- і температурно-частотні характеристики, предс-

тавлено на Рис.1,2. Тут жирна лінія відповідає задачі з врахуванням фізичної нелінійності, а пунктирна – без такого врахування.

Як видно, при вибраних даних фізична нелінійність суттєво покращує ефективність демп-

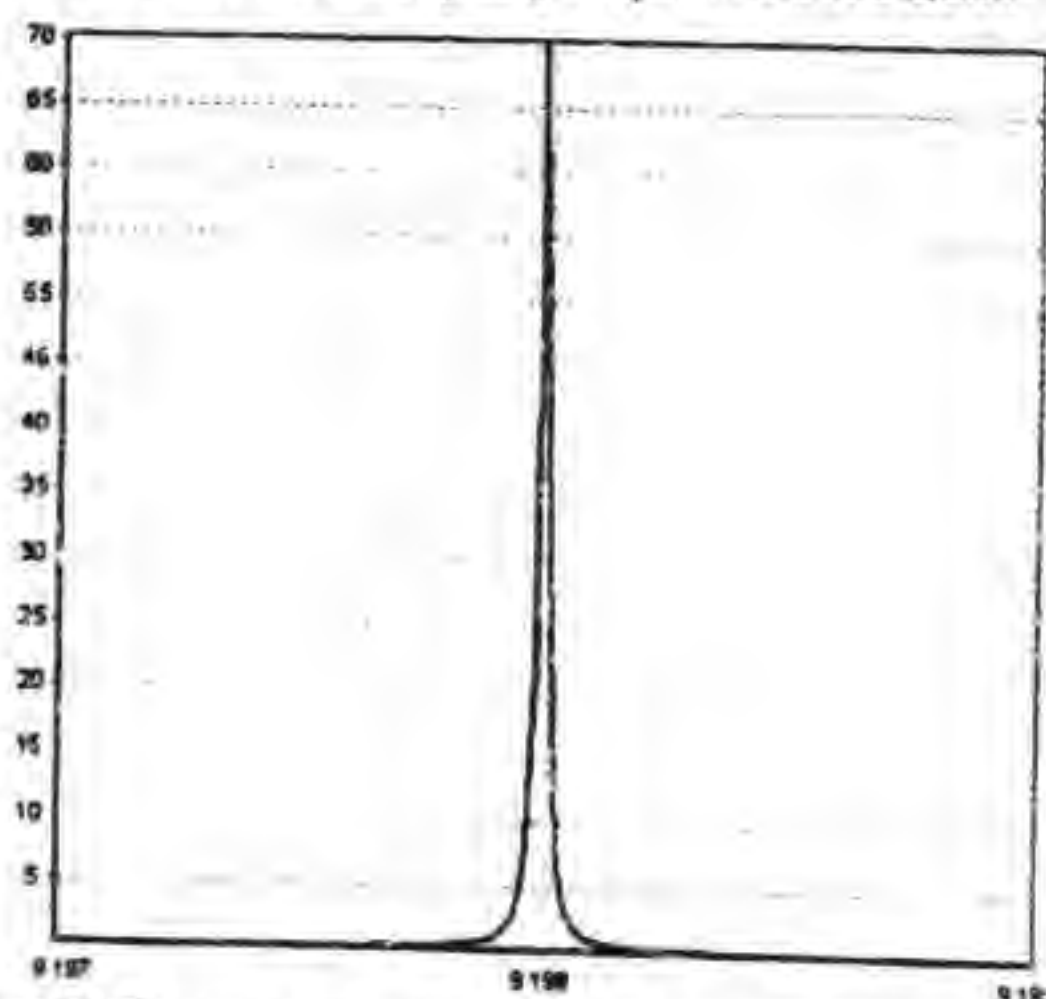


Рис.2. Температурно-частотна характеристика

фування резонансних коливань панелі та зменшує температуру дисипативного розігріву.

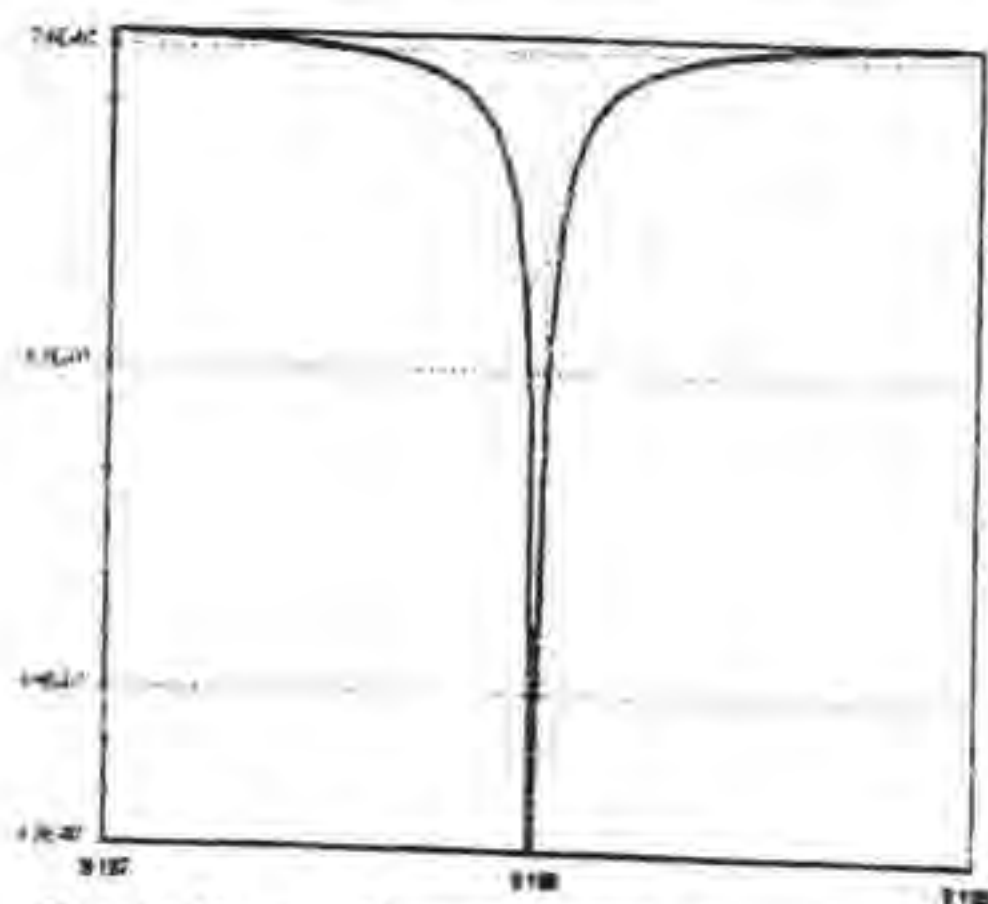


Рис.3. Вплив фізичної нелінійності на КД

Вплив фізичної нелінійності на коефіцієнт демпфування (КД) показано на Рис.3. З нього видно, що має місце різке зменшення цього коефіцієнту в околі резонансної частоти.

4. Висновки

На основі концепції комплексних характеристик подано постановку задачі про вплив фізичної нелінійності на пасивне демпфування вимушених резонансних коливань і температуру дисипативного розігріву тонких шаруватих оболонок обертання з фізично нелінійних

непружних матеріалів, дійсна і уявна частини комплексних характеристик яких залежать від деформацій. Для розв'язування нелінійних диференціальних рівнянь в часткових похідних з комплексними коефіцієнтами застосовано ітераційні методи, які зводять вихідну нелінійну задачу до послідовності лінійних задач в'язкопружності і теплопровідності. Вказані лінійні задачі розв'язуються методом скінченних елементів.

З використанням описаного підходу розв'язано конкретну задачу про вимушені резонансні коливання і дисипативний розігрів прямокутної в плані тришарової циліндричної панелі, яка знаходиться під дією гармонічного за часом тиску. Середній шар має високі гістерезисні втрати, а комплексний модуль зсуву матеріалу цього шару залежить від деформацій. Досліджено вплив фізичної нелінійності на амплітудно-частотну, температурно-частотну характеристики та на коефіцієнт демпфування вимушених резонансних коливань циліндричної панелі.

Список використаних джерел

1. Карнаухов В.Г., Михайленко В.В. Нелинейная термомеханика пьезоэлектрических неупругих тел при моногармоническом нагружении. – Житомир: ЖІТУ, 2005. – 428с.
2. Карнаухов В.Г., Січко В.М., Карпенюк О.С. Вплив температури дисипативного розігріву на пасивне демпфування вимушених резонансних коливань ізотропної в'язкопружної циліндричної панелі // Вісник Київського університету. Серія фізико-математичні науки. – 2009. – №1. – С. 51-54.
3. Григоренко Я.М., Мухомед А.П. Розв'язання лінійних і нелінійних задач теорії оболонок на ЕОМ. – Київ: Либідь, 1992. – 152.
4. Пальмов В.А. Колебания упругопластических тел. – Москва: Наука, 1976. – 328с.
5. Gandhi F. Influence of Nonlinear Viscoelastic Material Characterization on Performance of Constrained Layer Damping Treatment // AIAA Journal. – 2001. – 39, N5. – P. 924-931.

Надійшла до редколегії 03.09.2009

УДК 517.925.4

*Igor I. Korol, k.f.-m.n., доцент

Дослідження розв'язків нетерових крайових задач для імпульсних диференціальних систем з виродженням

У роботі розв'язано питання існування розв'язків задачі Коші для таких систем. Одержано критерій існування розв'язків неоднорідних нетерових крайових задач для вироджених диференціально-алгебраїчних рівнянь з імпульсною дією.

Ключові слова: імпульсні диференціальні системи з виродженням, нетерові крайові задачі.

*E-mail: korol_igor@ukr.net

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., проф. Перестюк М.О.

У роботі досліджено структуру розв'язків вироджених диференціально-алгебраїчних систем, які піддаються імпульсній дії в фіксовані моменти часу, знайдено умови розв'язності та побудовано розв'язки задачі Коші та лінійної крайової задачі.

Постановка задачі.

Розглянемо вироджену диференціально-алгебраїчну систему рівнянь з імпульсною дією:

$$B(t) \frac{dx}{dt} = A(t)x(t) + f(t), t \neq \tau_i, \quad (1)$$

$$\Delta x|_{t=\tau_i} \equiv x(\tau_i + 0) - x(\tau_i) = B_i x(\tau_i) + b_i, \quad (2)$$

де $x, f \in R^n$, $\text{rank} B(t) = n - r \quad \forall t \in [a, b]$, $r > 0$; вектор-функція $f(t)$ і $(n \times n)$ -вимірні матриці $A(t)$ і $B(t)$ є достатньо гладкими: $f(t), A(t), B(t) \in C^k([a, b], R^n)$, k – деяке натуральне число, $a < \tau_1 < \dots < \tau_p < b$, $p < \infty$.

Під розв'язком задачі (1), (2) будемо розуміти кусково неперервно диференційовну на $[a, b] \setminus \{\tau_i\}$, $i = \overline{1, p}$ функцію

$$x(t) = \begin{cases} x_0(t), & t \in [a, \tau_1], \\ x_j(t), & t \in (\tau_j, \tau_{j+1}], \quad j = \overline{1, p-1}, \\ x_p(t), & t \in (\tau_p, b], \end{cases}$$

з розривами першого роду в точках $t = \tau_i$, яка задовольняє систему (1) та умови (2). Функції $x_j(t)$ визначені і неперервно диференційовні на відповідних відрізках: $x_j(t) \in C^1([\tau_j, \tau_{j+1}], R^n)$, $x_j(\tau_j) =$

*Ihor I. Korol, Cand.Sci (Phys.-Math.).

Investigating for the solutions of Noetherian boundary value problems for impulsive differential systems with singularity

In this paper the problem of existence of the solutions of the Cauchy problem systems was solved. The criterion for existence of solutions of nonhomogeneous Noetherian boundary value problems for impulsive differential-algebraical systems with impulse action was obtained.

Key words: impulsive differential systems with singularity, Noetherian boundary value problems.

$= x(\tau_i + 0) = \lim_{t \rightarrow \tau_i + 0} x(t)$, і розв'язок неперервний зліва: $x(\tau_i) = x(\tau_i - 0) = x_{i-1}(\tau_i) = \lim_{t \rightarrow \tau_i - 0} x_{i-1}(t)$. У просторі неперервно диференційовних n -вимірних вектор-функцій $C^1([a, b], R^n)$ розглянемо оператор

L та спряжений до нього оператор L^T : $L(t) = A(t) - B(t) \frac{d}{dt}$, $L^T(t) = A^T(t)x(t) + \frac{d}{dt} B^T(t)$. Має місце наступне твердження.

Теорема 1. Нехай 1) $\text{rank} B(t) = n - r = \text{const} \quad \forall t \in [a, b]$; 2) матриця $B(t)$ має при всіх $t \in [a, b]$ повний жорданів набір векторів $\varphi_j^{(i)}(t)$, $j = \overline{1, s}$, $i = \overline{1, r}$ відносно оператора $L(t)$, який складається з r ланцюжків задовжки $s_1, \dots, s_r$; 3) $f(t) \in C^{q-1}([a, b], R^n)$, $A(t), B(t) \in C^{3q-2}([a, b], R^{n \times n})$, де $\max s_i = q$. Тоді існують неособливі при всіх $t \in R$ $(n \times n)$ -матриці $P(t), Q(t) \in C^{q-1}([a, b], R^n)$ такі, що множенням на $P(t)$ та заміною

$$x = Q(t)u \quad (3)$$

вироджена диференціально-алгебраїчна система (1) з імпульсною дією (2) зводиться до диференціально-алгебраїчної системи в центральній канонічній формі з імпульсною дією

$$\begin{bmatrix} E_{n-r} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \frac{du}{dt} = \begin{bmatrix} M(t) & 0 \\ 0 & E_r \end{bmatrix} u + g(t), \quad (4)$$

$$\Delta u|_{t=\tau_i} = Q^{-1}(\tau_i) B_i Q(\tau_i) u(\tau_i) + Q^{-1}(\tau_i) b_i. \quad (5)$$

де $I = \text{diag}\{I_1, \dots, I_r\}$, I_j – нільпотентні блоки Жордана порядку s_j , $M(t) \in C^{q-1}([a, b], R^n)$, $j = \overline{1, r}$, E_k – одинична матриця порядку k ,

$$g(t) = P(t)f(t), g(t) = \text{col}(\tilde{g}(t), \bar{g}(t)), \quad (6)$$

$$\tilde{g} \in R^{n-s}, \bar{g} \in R^s, s = s_1 + \dots + s_r.$$

Доведення полягає в тому, що в [1, 2] систему (1) зведено до центральної канонічної форми (4), а (5) одержується з (2) заміною (3) з урахуванням неперервності матриці $Q(t)$ у точках імпульсів.

Нехай $X(t)$ – $((n-s) \times (n-s))$ -вимірна фундаментальна матриця системи звичайних диференціальних рівнянь

$$\frac{du_1}{dt} = M(t)u_1, u_1 \in R^{n-s}, \quad (7)$$

а $X(t, \sigma), X(\sigma, \sigma) = E_{n-s}$ – матрицант системи (7). Позначимо також

$$Q^{-1}(\tau_i)B_iQ(\tau_i) = \begin{bmatrix} B_{i,1} & B_{i,2} \\ B_{i,3} & B_{i,4} \end{bmatrix},$$

де $B_{i,1}, B_{i,2}, B_{i,3}, B_{i,4}$ при всіх $i = \overline{1, p}$ є відповідно $((n-s) \times (n-s))$ -, $((n-s) \times s)$ -, $(s \times (n-s))$ - та $(s \times s)$ -вимірними блоками.

Структура розв'язків вироджених лінійних однорідних систем з імпульсною дією.

Розглянемо відповідну (1), (2) вироджену однорідну імпульсну систему

$$B(t)\frac{dx}{dt} = A(t)x(t), t \neq \tau_i, \quad (8)$$

$$\Delta x|_{t=\tau_i} = B_i x(\tau_i). \quad (9)$$

Її розв'язки будемо шукати у вигляді

$$x(t) = \begin{cases} Q(t) \begin{bmatrix} X(t) \\ 0 \end{bmatrix} c_0, t \in [a, \tau_1], \\ Q(t) \begin{bmatrix} X(t) \\ 0 \end{bmatrix} c_j, t \in (\tau_j, \tau_{j+1}], j = \overline{1, p-1}, \\ Q(t) \begin{bmatrix} X(t) \\ 0 \end{bmatrix} c_p, t \in (\tau_p, b], \end{cases} \quad (10)$$

де $c_0, c_i \in R^{n-s}$, $i = \overline{1, p}$ – довільні сталі вектори. Оскільки $Q(t)$ і $X(t)$ є неперервними на $[a, b]$ то імпульсні умови (9) можемо записати так:

$$Q(\tau_i) \begin{bmatrix} X(\tau_i) \\ 0 \end{bmatrix} c_i = (E_{n-s} + B_i) Q(\tau_i) \begin{bmatrix} X(\tau_i) \\ 0 \end{bmatrix} c_{i-1}.$$

Множачи зліва на $Q^{-1}(\tau_i)$, одержимо:

$$\begin{bmatrix} X(\tau_i)c_i \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{n-s} + B_{i,1} & B_{i,2} \\ B_{i,3} & E_s + B_{i,4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X(\tau_{i-1})c_{i-1} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Оскільки $\det X(t) \neq 0$, то розглядаючи (11) як лінійну алгебраїчну систему відносно c_i , бачимо, що вона сумісна тоді і тільки тоді, коли $B_{i,3}$ є нуль-матрицею. Отже, без обмеження загальності можемо прийняти, що матриці B_i задовольняють умову

$$Q^{-1}(\tau_i)B_iQ(\tau_i) = \begin{bmatrix} B_{i,1} & B_{i,2} \\ 0 & B_{i,4} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

При цьому якщо $\det(E_{n-s} + B_{i,1}) \neq 0$, то існує взаємно однозначний зв'язок між c_i та c_{i-1} :

$$c_i = X^{-1}(\tau_i)(E_{n-s} + B_{i,1})X(\tau_i)c_{i-1}. \quad (13)$$

Підставляючи (13) у (10), одержимо значення розв'язку $x(t)$ на кожному з інтервалів $(\tau_i, \tau_{i+1}]$:

$$x(t) = X_{n-s}(t)c_0, \quad (14)$$

де $X_{n-s}(t) = Q(t) \begin{bmatrix} \Omega_s(t) \\ 0 \end{bmatrix}$ є $(n \times (n-s))$ -вимірною матрицею, стовпцями якої є лінійно незалежні розв'язки системи (8), (9), а

$$\Omega_s(t) = \begin{cases} X(t), t \in [a, \tau_1], \\ X(t, \tau_1)(E_{n-s} + B_{1,1})X(\tau_1), t \in (\tau_1, \tau_2], \\ X(t, \tau_i) \left(\prod_{j=i}^2 (E_{n-s} + B_{j,1}) \right) X(\tau_i, \tau_{i-1}), \\ (E_{n-s} + B_{i,1})X(\tau_i), t \in (\tau_i, \tau_{i+1}], i \geq 2, \end{cases}$$

є [1] $((n-s) \times (n-s))$ -вимірною фундаментальною матрицею невиродженої лінійної однорідної імпульсної системи

$$\frac{du_1}{dt} = M(t)u_1, t \neq \tau_i, \Delta u_1|_{t=\tau_i} = B_{i,1}u_1(\tau_i).$$

Для матрицанта $\Omega_s(t, \sigma) = \Omega_s(t)\Omega_s^{-1}(\sigma)$, $\Omega_s(\sigma, \sigma) = E_{n-s}$, $\tau_{j-1} < \sigma \leq \tau_j < \tau_i < t \leq \tau_{i+1}$ маємо:

$$\begin{aligned} \Omega_s(t, \sigma) &= X(t, \tau_i) \left(\prod_{j=i}^p (E_{n-s} + B_{j,1}) \right) X(\tau_i, \tau_{i-1}) \\ &\quad \cdot (E_{n-s} + B_{i,1})X(\tau_i, \sigma), \\ X_{n-s}(t, \sigma) &= Q(t) \begin{bmatrix} \Omega_s(t, \sigma) \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Спряжені системи.

Розглянемо вироджену диференціально-алгебраїчну систему з імпульсною дією

$$\frac{d}{dt}(B^T(t)y(t)) = -A^T(t)y(t), \quad t \neq \tau_i, \quad (14)$$

$$\Delta(B^T y)|_{t=\tau_i} = -(E_n + B_{i,1}^T)^{-1} B_{i,2}^T B^T(\tau_i) y(\tau_i), \quad (15)$$

яку будемо називати спряженою до системи (8), (9). Відомо [1,2], що розв'язком системи (14) є $y(t) = P^T(t) \begin{bmatrix} Y(t) \\ 0 \end{bmatrix} d_0$, де $d_0 \in R^{n-s}$ – довільна стала, $Y(t) \in ((n-s) \times (n-s))$ – вимірною фундаментальною матрицею спряженої до (7) системи

$$\frac{dv_i}{dt} = -M^T(t)v_i, \quad v_i \in R^{n-s}, \quad (16)$$

Через $Y(t, \sigma)$ позначимо матрицант системи (16).

З урахуванням вищенаведеного, будемо шукати розв'язок імпульсної системи (14), (15) у вигляді

$$y(t) = y_i(t) = P^T(t) \begin{bmatrix} Y(t) \\ 0 \end{bmatrix} d_i, \quad t \in (\tau_i, \tau_{i+1}], \quad d_i \in R^{n-s}. \quad (17)$$

Оскільки $B(t) = P^{-1}(t) \begin{bmatrix} E_{n-s} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} Q^{-1}(t)$, то

$$B^T y_i(t) = (Q^T(t))^{-1} \begin{bmatrix} Y(t) \\ 0 \end{bmatrix} d_i. \quad (19)$$

Якщо $\det(E_{n-s} + B_{i,1}^T) \neq 0$, то враховуючи (12), (19) і неперервність матриці $B(t)$, за аналогією до (11), для імпульсу (15) в точці $t = \tau_i$ одержуємо алгебраїчну систему для знаходження d_i :

$$\begin{bmatrix} Y(\tau_i) \\ 0 \end{bmatrix} d_i = \begin{bmatrix} (E_{n-s} + B_{i,1}^T)^{-1} Y(\tau_i) \\ - (E_{n-s} + B_{i,1}^T)^{-1} B_{i,2}^T (E_{n-s} + B_{i,1}^T)^{-1} Y(\tau_i) \end{bmatrix} d_{i-1}.$$

Ця система сумісна тоді і тільки тоді, коли $B_{i,2}$ є нульовою матрицею, і при цьому її розв'язком є

$$d_i = Y^{-1}(\tau_i) (E_{n-s} + B_{i,1}^T)^{-1} Y(\tau_i) d_{i-1}.$$

За індукцією одержимо

$$d_i = Y^{-1}(\tau_i) \left(\prod_{j=1}^i (E_{n-s} + B_{j,1}^T)^{-1} Y(\tau_j, \tau_{j-1}) \right) Y(\tau_0) d_0. \quad (20)$$

Підставляючи (20) в (17), отримаємо розв'язок $y(t) = Y_{n-s}(t) d_0$ системи (14), (15), де $Y_{n-s}(t)$ – $(n \times (n-s))$ – вимірна матриця, стовпці якої є лі-

нійно незалежними розв'язками спряженої системи (14), (15):

$$Y_{n-s}(t) = P^T(t) \begin{bmatrix} \Omega_y(t) \\ 0 \end{bmatrix},$$

де

$$\Omega_y(t) = \begin{cases} Y(t), & t \in [a, \tau_1], \\ Y(t, \tau_1) (E_{n-s} + B_{1,1}^T)^{-1} Y(\tau_1), & t \in (\tau_1, \tau_2], \\ Y(t, \tau_i) \left(\prod_{j=1}^i (E_{n-s} + B_{j,1}^T)^{-1} Y(\tau_j, \tau_{j-1}) \right) (E_{n-s} + B_{i,1}^T)^{-1} Y(\tau_i), & t \in (\tau_i, \tau_{i+1}], \quad i \geq 2, \end{cases}$$

Зауваження 1. З вищенаведених міркувань випливає, що матриці B_i повинні мати наступну структуру:

$$B_i = Q(\tau_i) \begin{bmatrix} B_{i,1} & 0 \\ 0 & B_{i,2} \end{bmatrix} Q^{-1}(\tau_i), \quad (21)$$

$$\det(E_{n-s} + B_{i,1}^T) \neq 0, \det(E_{n-s} + B_{i,2}) \neq 0.$$

Залежність між розв'язками системи (8), (9) та спряженої до неї системи (14), (15) встановлює наступна лема.

Лема 1. Нехай виконуються умови теореми 1 і матриці B_i мають вигляд (21). Тоді

1) для будь-яких розв'язків $x(t)$ системи (8), (9), (21) і розв'язків $y(t)$ системи (14), (15) виконується рівність $\langle B(t)x(t), y(t) \rangle = \text{const} \quad \forall t \in R$;

2) фундаментальні матриці $X_{n-s}(t)$ і $Y_{n-s}(t)$ відповідних вироджених систем (8), (9) і (14), (15) задовольняють співвідношення $Y_{n-s}^T(t) B(t) X_{n-s}(t) = C$, де C – невироджена квадратна $(n-s)$ -вимірна стала матриця, причому якщо фундаментальні матриці $X(t)$ і $Y(t)$ вибрати так, щоб

$$Y^T(t_0) X(t_0) = E_{n-s}, \quad (22)$$

при деякому $t = t_0 \in [a, b]$, тоді

$$Y_{n-s}^T(t) B(t) X_{n-s}(t) = E_{n-s}. \quad (23)$$

Доведення 1. Оскільки на кожному з інтервалів $t \in (\tau_i, \tau_{i+1})$ виконуються тотожності

$$B(t) \frac{dx}{dt} = A(t)x(t) \quad \text{і} \quad \frac{d}{dt}(B^T(t)y(t)) = -A^T(t)y(t),$$

то

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle B(t)x(t), y(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \langle x(t), B^T(t)y(t) \rangle = \\ &= \langle \frac{dx(t)}{dt}, B^T(t)y(t) \rangle + \langle x, \frac{d}{dt} (B^T(t)y(t)) \rangle = \\ &= \langle B(t) \frac{dx(t)}{dt}, y(t) \rangle + \langle x, \frac{d}{dt} (B^T(t)y(t)) \rangle = \\ &= \langle A(t)x(t), y(t) \rangle + \langle x, -A^T(t)y(t) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Отже, $\langle B(t)x(t), y(t) \rangle = m_i = \text{const} \quad \forall t \in (\tau_i, \tau_{i+1})$. Покажемо, що $m_i = m \quad \forall i = \overline{1, p}$, тобто що $\Delta \langle B(t)x(t), y(t) \rangle|_{t=\tau_i} = 0$. Справді,

$$\begin{aligned} \Delta \langle B(t)x(t), y(t) \rangle|_{t=\tau_i} &= \Delta \langle x(t), B^T(t)y(t) \rangle|_{t=\tau_i} = \\ &= \langle x(\tau_i + 0), B^T(\tau_i)y(\tau_i + 0) \rangle - \langle x(\tau_i), B^T(\tau_i)y(\tau_i) \rangle = \\ &= \langle (E_n + B_i)x(\tau_i), (E_n + B_i^T)^{-1} B^T(\tau_i)y(\tau_i) \rangle - \\ &\quad - \langle x(\tau_i), B^T(\tau_i)y(\tau_i) \rangle = \\ &= \langle x(\tau_i), B^T(\tau_i)y(\tau_i) \rangle - \langle x(\tau_i), B^T(\tau_i)y(\tau_i) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Отже, $m_{i+1} = m_i = m = \text{const}$.

2. Сталість матриці C впливає з попереднього пункту, оскільки стовпцями матриць $X_{n-s}(t)$ і $Y_{n-s}(t)$ є розв'язки відповідних імпульсних систем. Покажемо, що C є неособливою матрицею.

$$\begin{aligned} Y_{n-s}^T(t) B(t) X_{n-s}(t) &= \\ &= \left(P^T(t) \begin{bmatrix} \Omega_y(t) \\ 0 \end{bmatrix} \right)^T P^{-1}(t) \begin{bmatrix} E_{n-s} & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Omega_x(t) \\ 0 \end{bmatrix} = \\ &= \Omega_y^T(t) \Omega_x(t) = \\ &= \left(Y(\tau_1) (E_{n-s} + B_{1,1}^T)^{-1} \left(\prod_{i=2}^t Y(\tau_i, \tau_{i-1}) (E_{n-s} + B_{i,1}^T)^{-1} \right) Y(t, \tau_i) \right)^T \cdot \\ &\quad \cdot X(t, \tau_1) \left(\prod_{i=1}^t (E_{n-s} + B_{i,1}) X(\tau_i, \tau_{i-1}) \right) (E_{n-s} + B_{1,1}) X(\tau_1). \end{aligned}$$

Оскільки для матрицантів $X(t, \sigma)$ і $Y(t, \sigma)$ маємо, що $Y^T(t, \sigma) X(t, \sigma) = E_{n-s}$ [4], то

$$Y_{n-s}^T(t) B(t) X_{n-s}(t) = Y^T(\tau_1) X(\tau_1) = C. \quad (24)$$

Оскільки $\det X(\tau_1) \neq 0$, $\det Y(\tau_1) \neq 0$, то C теж є невиродженою матрицею. Крім того, з (24) очевидно, що з (22) випливає (23). Лема доведена.

Структура загального розв'язку неоднорідних систем

З'ясуємо структуру загального розв'язку неоднорідної системи (1), (2). Попередньо введемо деякі позначення:

$$\begin{aligned} U(t) &= [X_{n-s}(t), \Phi(t)], V(t) = [Y_{n-s}(t), \Psi(t)]^T \\ \Phi(t) &= [\varphi_1^{(1)}(t), \dots, \varphi_1^{(s)}(t), \dots, \varphi_r^{(1)}(t), \dots, \varphi_r^{(s)}(t)], \\ \Psi(t) &= [\psi_1^{(1)}(t), \dots, \psi_1^{(s)}(t), \dots, \psi_r^{(1)}(t), \dots, \psi_r^{(s)}(t)]. \end{aligned}$$

Відомо [1], що матрицю $Q(t)$ можна представити у вигляді добутку $Q(t) = Q_1(t)Q_2(t)$, де $Q_1(t) = [q_1(t), \dots, q_{n-s}(t), \Phi(t)]$ і $q_i(t) \in C^{m+1}([a, b], R^n)$ $i = \overline{1, n-s}$ доповнюють вектори $\varphi_j^{(j)}(t)$, $j = \overline{1, s}$, $i = \overline{1, r}$ до повного базису в $C^k([a, b], R^n)$.

$$Q_2(t) = \begin{bmatrix} Q_{11}(t) & 0 \\ Q_{21}(t) & Q_{22}(t) \end{bmatrix},$$

де $Q_{11}(t), Q_{22}(t)$ – нижньотрикутні матриці відповідно $(n-s)$ - та s -го порядків з одиницями на діагоналі. При цьому неважко переконатися, що мають місце матричні рівності

$$\begin{aligned} Q_2^{-1}(t) &= \begin{bmatrix} Q_{11}^{-1}(t) & 0 \\ -Q_{22}^{-1}(t)Q_{21}(t)Q_{11}^{-1}(t) & Q_{22}^{-1}(t) \end{bmatrix}, \\ \Phi(t) &= Q_1(t) \begin{bmatrix} 0 \\ E_s \end{bmatrix} = Q(t) \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{22}^{-1}(t) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Крім того, з (6) випливає, що

$$X_{n-s}(t) Y_{n-s}^T(\sigma) f(\sigma) = X_{n-s}(t, \sigma) \tilde{g}(\sigma). \quad (25)$$

Згідно [1,2], розв'язок системи (1) на інтервалі $t \in [a, \tau_1]$ має вигляд

$$\begin{aligned} x(t) = x_0(t) &= X_{n-s}(t) c_0 + \\ &+ \int_a^t X_{n-s}(t) Y_{n-s}^T(\sigma) f(\sigma) d\sigma - \Phi(t) r(t), \end{aligned} \quad (26)$$

$$\text{тобто } x_0(t) = Q(t) \begin{bmatrix} X(t) c_0 + \int_a^t X(t, \sigma) \tilde{g}(\sigma) d\sigma \\ -Q_{22}^{-1}(\tau_1) r(\tau_1) \end{bmatrix},$$

$$\text{де } r(t) = \sum_{k=0}^{m-1} I^k \frac{d^k}{dt^k} ((\Psi^T(t) L(t) \Phi(t))^{-1} \Psi^T(t) f(t)).$$

Після імпульсного збурення в точці $t = \tau_1$ продовжимо розв'язок $x_0(t)$ вигляду (26) з інтервалу $t \in [a, \tau_1]$ на розв'язок $x_1(t)$ вигляду

$$x_1(t) = Q(t) \begin{bmatrix} X(t) c_1 + \int_a^t X(t, \sigma) \tilde{g}(\sigma) d\sigma \\ -Q_{22}^{-1}(\tau_1) r(\tau_1) \end{bmatrix}, \quad (27)$$

який визначений на інтервалі $t \in (\tau_1, \tau_2]$. Перехід від $x_0(t)$ до $x_1(t)$ визначається імпульсом (2) в точці $t = \tau_1$. Для знаходження зв'язку між c_0 і c_1 підставимо (26), (27) в (2) при $i = 1$:

$$x_1(\tau_1 + 0) = (E_n + B_1) x_0(\tau_1) + b_1,$$

$$Q(\tau_1) \begin{bmatrix} X(\tau_1)c_1 \\ -Q_{22}^{-1}(\tau_1)r(\tau_1) \end{bmatrix} = \\ = (E_n + B_{11})Q(\tau_1) \begin{bmatrix} X(\tau_1)c_0 + \int_{\tau_1}^{\tau_1} X(\tau_1, \sigma) \tilde{g}(\sigma) d\sigma \\ -Q_{22}^{-1}(\tau_1)r(\tau_1) \end{bmatrix} + b_1$$

Множачи останню рівність зліва на $Q^{-1}(t)$ і беручи до уваги (21), одержимо:

$$\begin{bmatrix} X(\tau_1)c_1 \\ -Q_{22}^{-1}(\tau_1)r(\tau_1) \end{bmatrix} = \\ = \begin{bmatrix} E_{n-1} + B_{11} & 0 \\ 0 & E_1 + B_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X(\tau_1)c_0 + \int_{\tau_1}^{\tau_1} X(\tau_1, \sigma) \tilde{g}(\sigma) d\sigma \\ -Q_{22}^{-1}(\tau_1)r(\tau_1) \end{bmatrix} + Q^{-1}(\tau_1)b_1$$

Зрозуміло, що останнє рівняння має розв'язки тоді і тільки тоді, коли вектор b_1 має вигляд

$$b_1 = Q(\tau_1) \begin{bmatrix} a_1 \\ B_{14}Q_{22}^{-1}(\tau_1)r(\tau_1) \end{bmatrix},$$

де $a_1 \in R^{n-1}$ – довільний сталий вектор. При цьому одержимо таке значення c_1 :

$$c_1 = X^{-1}(\tau_1)(E_{n-1} + B_{11})X(\tau_1)\{c_0 + \\ + \int_{\tau_1}^{\tau_1} X^{-1}(\sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma + X^{-1}(\tau_1)a_1\}.$$

Підставляючи його в (27) одержимо:

$$x_1(t) = X_{n-1}(t, 0)c_0 + \int_{\tau_1}^t X_{n-1}(t, \sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma + \\ + X_{n-1}(t, \tau_1 + 0)g_1 - \Phi(t)r(t).$$

Міркуючи аналогічно, можемо переконатися, що справедливим є наступне твердження.

Теорема 2. Нехай виконуються умови теореми 1, матриці B , і вектори b_i мають вигляд відповідно (21) і (28):

$$b_i = Q(\tau_i) \begin{bmatrix} a_i \\ B_{i4}Q_{22}^{-1}(\tau_i)r(\tau_i) \end{bmatrix}, \quad (28)$$

де $a_i \in R^{n-1}$. Тоді розв'язок $x(t) = x_i(t)$ визначається за формулою

$$x(t) = X_{n-1}(t, 0)c_0 + \int_{\tau_1}^t X_{n-1}(t, \sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma + \\ + \sum_{\tau_i < t} X_{n-1}(t, \tau_i + 0)a_i - \Phi(t)r(t). \quad (29)$$

Щодо розв'язності початкової задачі для системи (8), (9) справедливою є наступна теорема.

Теорема 3. Нехай виконуються умови теореми 1, матриці B , і вектори b_i мають вигляд відповідно (21) і (28). Тоді для того, щоб задача Коші (8), (9), (30)

$$x(t_0) = x_0, \quad t_0 \in [a, b], \quad (30)$$

мала розв'язок, необхідно і достатньо, щоб при всіх $j = \overline{1, r}$, $k = \overline{1, s_j}$ вектор x_0 задовольняв умову

$$\sum_{i=0}^{k-1} \frac{d^i}{dt^i} \langle A(t_0)x_0 + f(t_0), \psi_{i,j}^{k-1}(t_0) \rangle = 0.$$

При цьому розв'язок задачі Коші (8), (9), (30) єдиний і має наступний вигляд

$$x(t) = X_{n-1}(t, t_0)[E_{n-1}, 0]Q^{-1}(t_0)x_0 + \\ + \int_{\tau_1}^t X_{n-1}(t, \sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma + \\ + \sum_{\tau_i < t} X_{n-1}(t, \tau_i + 0)a_i - \Phi(t)r(t). \quad (31)$$

Доведення. Відомо [1], що (31) є необхідною і достатньою умовою того, щоб x_0 було допустимим початковим значенням розв'язку $x(t) = x_0(t)$. У разі виконання умов (21) і (28) розв'язок $x(t)$ єдиним чином переходить через кожну з точок імпульсів $t_0 \leq \tau_1 < \dots < \tau_r < b$ на наступний проміжок, тобто існує єдиний розв'язок $x(t), t \in [t_0, b]$ з початковим значенням $x(t_0) = x_0$. Згідно (29), розв'язок $x(t)$ у початковій точці $t = t_0$ приймає наступне значення:

$$x(t_0) = x_0 = X_{n-1}(t_0, t_0)c_0 - \Phi(t_0)r(t_0) = U(t_0) \begin{bmatrix} c_0 \\ -r(t_0) \end{bmatrix}.$$

Беручи до уваги, що $\Omega_1(t_0, t_0) = E_{n-1}$, одержимо:

$$\begin{bmatrix} c_0 \\ -r(t_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{n-1} & 0 \\ 0 & Q_{22}(t_0) \end{bmatrix} Q^{-1}(t_0)x_0.$$

Отже, зв'язок між x_0 і сталою c_0 має вигляд $c_0 = [E_{n-1}, 0]Q^{-1}(t_0)x_0$, з чого одержуємо (31).

Нетерові крайові задачі для вироджених диференціальних систем з імпульсною дією

Розглянемо питання існування розв'язку вироджених лінійних систем диференціальних рівнянь (1) з імпульсною дією (2), які задовольняють крайові умови

$$lx(\cdot) = \alpha, \quad \alpha \in R^m, \quad (32)$$

де l – лінійний m -вимірний вектор-функціонал над простором неперервних на $[a, b]$ вектор-функцій: $l: C([a, b], R^n) \rightarrow R^m$, $\alpha \in R^m$ – сталий вектор. Припускаємо, що система (1), (2) задовольняє умови теореми 1, а матриці B , і вектори b_i мають вигляд відповідно (21) і (28).

За допомогою $(m \times n)$ -вимірної матрично-значної функції $C(t)$ обмеженої варіації можемо записати крайові умови (32) у вигляді

$$\int_a^b dC(t)lx(t) = \alpha. \quad (33)$$

Підставимо в (33) загальний розв'язок (29) виродженої імпульсної системи (1), (2). Змінюючи порядок інтегрування одержимо:

$$Gc_0 = \alpha - \int_a^b Z_{n-s}(\sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma - \sum_{i=1}^p Z_{n-s}(\tau_i+0)a_i + z_\Phi, \quad (34)$$

де

$$Z_{n-s}(s) = \int_a^s dC(t)X_{n-s}(t, s), \quad z_\Phi = \int_a^b dC(t)\Phi(t),$$

$$G = lX_{n-s}(\cdot, a) = \int_a^b dC(t)X_{n-s}(t, a),$$

є $(m \times (n-s))$ -вимірними матрицями, а r_i – m -вимірний сталий вектор:

$$r_i = \int_a^b dC(t)\Phi(t)r(t).$$

Отже, крайова задача (1), (2), (32) має розв'язки тоді і тільки тоді, коли сумісною є лінійна відносно c_0 алгебраїчна система (34), тобто тоді і тільки тоді, коли

$$P_{G^*} \left(\alpha - \int_a^b Z_{n-s}(\sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma - \sum_{i=1}^p Z_{n-s}(\tau_i+0)a_i + z_\Phi \right) = 0, \quad (35)$$

де P_{G^*} – $(k^* \times m)$ -вимірна матриця, рядки якої є лінійно незалежними рядками ортопроектора P_{G^*} , $k^* = m - \text{rank } G$, і при цьому розв'язок системи (34) має вигляд

$$c_0 = P_{G^*} \xi + G^* \left(\alpha - \int_a^b Z_{n-s}(\sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma - \sum_{i=1}^p Z_{n-s}(\tau_i+0)a_i + z_\Phi \right),$$

де $k = n-s - \text{rank } G$, $\xi \in R^k$ – вектор довільних сталих, G^* – єдина псевдообернена за Муром-Пенроузом до G матриця. При цьому розв'язком крайової задачі (1), (2), (32) є

$$x(t, \xi) = X_{n-s}(t, a)P_{G^*} \xi + X_{n-s}(t, a)G^* \left(\alpha - \int_a^b Z_{n-s}(\sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma - \sum_{i=1}^p Z_{n-s}(\tau_i+0)a_i + z_\Phi \right) + \int_a^t X_{n-s}(t, \sigma)\tilde{g}(\sigma)d\sigma + \sum_{a=\tau_i < t} X_{n-s}(t, \tau_i+0)a_i - \Phi(t)r(t). \quad (36)$$

Отже ми довели наступне твердження.

Теорема 4. Нехай виконуються умови теореми 1, матриці B , і вектори b_i мають вигляд відповідно (21) і (28). Тоді крайова задача (1), (2), (32) має розв'язки тоді і тільки тоді, коли виконується умова (35). При цьому розв'язки утворюють k -параметричну сім'ю вигляду (36).

Одержані в даній роботі результати можуть бути використані при дослідженні існування і побудови розв'язків вироджених диференціальних систем з імпульсним впливом.

Список використаних джерел

1. Самойленко А.М., Шкіль М.І., Яковець В.П. Лінійні системи диференціальних рівнянь з виродженнями. – К.: Вища школа, 2000. – 294 с.
2. Самойленко А.М., Яковець В.П. О приводимости вырожденной линейной системы к центральной канонической форме // Доп. НАН України. – 1993. – №4. – С. 10 – 15.
3. Boichuk A.A., Samoilenko A.M. Generalized Inverse Operators and Fredholm Boundary Value Problems. VSP Utrecht Boston, 2004. – 318 p.
4. Samoilenko A.M., Perestyuk N.A. Impulsive differential equations – Singapore, 1995. – 455 p.
5. Бойчук А.А., Шегда Л.М. Вироджені крайові задачі // Нелінійні коливання. – 2007. – 10, №3. – С. 303 – 312.

Надійшла до редколегії 29.09.2009

УДК 539.3

Ірина І. Лоос, к.ф.-м.н.

Аналіз напруженого стану гнучкої ортотропної конічної оболонки в лінійній і нелінійній постановках в нестационарному магнітному полі

Розглядається напружено-деформований стан гнучкої ортотропної конічної оболонки в нестационарному магнітному полі. Проведено аналіз отриманих результатів в лінійній та нелінійній постановках.

Ключові слова: оболонка, магнітне поле, магнітопружність

E-mail: LoosI@univ.kiev.ua

Статтю представила кафедра механіки суцільних середовищ

1 Вступ

В останній час з використанням нових технологічних процесів створені матеріали з новими електромагнітними властивостями. Ці матеріали ефективно використовуються у різних галузях нової техніки, експлуатація якої пов'язана з навантаженням в умовах взаємодії електромагнітних і механічних полів. Це обумовлює широкий інтерес дослідників до задач фізики спряжених полів.

Особливий інтерес викликають задачі магнітопружності при дії на тіло стороннього струму. Однак задачі, пов'язані з питаннями врахування сторонніх струмів, достатньо важкі, але суттєво спрощуються у випадку тонких тіл, що мало змінюють форми при деформації. Будемо розглядати саме ці задачі.

На даний час в механіці отримали значний розвиток дослідження процесів деформації електропровідних гнучких тіл під дією силових і електромагнітних навантажень. Ці процеси описуються класом нелінійних крайових задач для тонкостінних пластин і оболонок. Нижче розглянемо одну задачу з цього класу – розрахунок напружено-деформованого стану гнучкої ортотропної конічної оболонки постійної товщини в нестационарному магнітному полі.

2 Постановка задачі

Виходячи із загальних рівнянь магнітопружності, побудуємо осесиметричну розв'язувальну систему рівнянь ортотропної конічної оболонки.

Irina I. Loos, Cand. Sci. (Phys.-Math.).

The analysis of strain state of flexible orthotropic conical shell in linear and nonlinear problem formulation in no stationary magnetic field

The stress-strain state of flexible orthotropic conical shell in no stationary magnetic field is considered. The analysis results of investigation in linear and nonlinear problem formulation has been carried out.

Key words: shell, magnetic field, magnetoelasticity

У випадку дослідження напружено-деформованого стану оболонок обертання довільної форми будемо виходити з наступних положень.

По-перше, шукана система рівнянь повинна описувати весь клас оболонок обертання, по-друге, вона повинна мати вигляд, зручний для чисельного розв'язку задачі, по-третє, вона повинна допускати формулювання граничних умов у зусиллях, моментах, переміщеннях і у змішаному вигляді. Нарешті, система диференціальних рівнянь повинна бути записана відносно таких функцій, щоб умови спряження різних оболонок виконувалися найпростішим шляхом.

Припускаємо, що розглядуване ортотропне тіло лінійне відносно магнітних і електричних властивостей, з врахуванням діагонального вигляду тензорів σ_{ij} , μ_{ij} , ϵ_{ij} і згідно результатів робіт [1-5], а також, враховуючи геометрію оболонки, отримаємо розв'язувальну систему диференціальних рівнянь ортотропної конічної оболонки в формі Коші.

Виходячи з цих міркувань, обираємо в якості розв'язувальних наступні функції:

$$u_r, u_z, \vartheta, N_r, N_z, M_r, B_z, E_0. \quad (1)$$

де u_r, u_z – радіальне та осьове переміщення, N_r, N_z – радіальне та осьове зусилля, ϑ – кут повороту нормалі, E_0, B_z – напруженість електричного і індукція магнітного полів, які виражаються через переміщення u, w і зусилля N, Q наступним чином:

$$N_x = N_0 \cos \varphi + Q \sin \varphi; \quad N_z = N_0 \sin \varphi - Q \cos \varphi;$$

$$u_r = u \cos \varphi + w \sin \varphi; \quad u_z = u \sin \varphi - w \cos \varphi. \quad (2)$$

Після деяких перетворень з врахуванням (1), (2) і використовуючи методику наведену у роботах [6,7], отримуємо наступну зв'язану систему нелінійних диференціальних рівнянь у формі Коші [8]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r}{\partial s} &= \frac{1 - \nu_0 \nu_0}{e_s h} (\cos \varphi N_x + \sin \varphi N_z) \cos \varphi + \\ &+ \frac{\nu_0 \cos \varphi}{r} u_r + \frac{1}{R_s} u_r - \sin \varphi \vartheta_s - \frac{\cos \varphi}{2} \vartheta_s^2; \\ \frac{\partial u_z}{\partial s} &= \frac{1 - \nu_0 \nu_0}{e_s h} (\cos \varphi N_x + \sin \varphi N_z) \sin \varphi + \\ &+ \frac{\nu_0 \sin \varphi}{r} u_r - \frac{1}{R_s} u_r + \cos \varphi \vartheta_s - \frac{\sin \varphi}{2} \vartheta_s^2; \\ \frac{\partial \vartheta_s}{\partial s} &= \frac{12(1 - \nu_0 \nu_0)}{e_s h^3} M_s - \frac{\nu_0 \cos \varphi}{r} \vartheta_s; \\ \frac{\partial N_x}{\partial s} &= \frac{\cos \varphi}{r} (\nu_0 - 1) N_x + \left(\frac{1}{R_s} + \frac{\nu_0 \sin \varphi}{r} \right) N_x + \\ &+ \frac{e_0 h}{r^2} u_r - \cos \varphi (P_s + \rho f_s^r) - \\ &- \sin \varphi (P_z + \rho f_s^z) + \rho h \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2}; \\ \frac{\partial N_z}{\partial s} &= -\frac{\cos \varphi}{r} N_x - \frac{1}{R_s} N_x - \sin \varphi (P_s + \rho f_s^r) + \\ &+ \cos \varphi (P_z + \rho f_s^z) + \rho h \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}; \quad (3) \\ \frac{\partial M_s}{\partial s} &= \frac{\cos \varphi}{r} (\nu_0 - 1) M_s + \frac{e_0 h^3 \cos^2 \varphi}{12 r^2} \vartheta_s + \\ &+ \cos \varphi N_x - \sin \varphi N_z + \\ &+ (\cos \varphi N_x + \sin \varphi N_z) \vartheta_s - \\ &- \frac{\nu_0 \sin \varphi}{r} M_s \vartheta_s - \frac{e_0 h^3 \cos \varphi \sin \varphi}{12 r} \vartheta_s^2; \\ \frac{\partial B_z}{\partial s} &= -\sigma_2 \mu_0 \left[E_0 + 0,5 \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} \sin \varphi - \frac{\partial u_z}{\partial t} \cos \varphi \right) \times \right. \\ &\times (B_s^+ + B_s^-) - \left. \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} \cos \varphi + \frac{\partial u_z}{\partial t} \sin \varphi \right) B_z \right] + \\ &+ \frac{B_s^+ - B_s^-}{\mu_0 h}; \\ \frac{\partial E_0}{\partial s} &= -\frac{\partial B_z}{\partial t} - \frac{\cos \varphi}{r} E_0. \end{aligned}$$

Компоненти сили Лоренца в даному випадку мають вигляд:

$$\rho f_s^r = -h J_{\theta \phi m} B_z + \sigma_1 h [E_0 B_z +$$

$$+ 0,5 \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} \sin \varphi - \frac{\partial u_z}{\partial t} \cos \varphi \right) B_z (B_s^+ + B_s^-) -$$

$$- \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} \cos \varphi + \frac{\partial u_z}{\partial t} \sin \varphi \right) B_z^2]. \quad (4)$$

$$\rho f_s^z = 0,5 h J_{\theta \phi m} (B_s^+ + B_s^-) + \sigma_1 h [-0,5 E_0 \times$$

$$\times (B_s^+ + B_s^-) - \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} \sin \varphi - \frac{\partial u_z}{\partial t} \cos \varphi \right) \times$$

$$\times \left[0,25 (B_s^+ + B_s^-)^2 + \frac{1}{12} (B_s^+ - B_s^-)^2 \right] +$$

$$+ 0,5 \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} \cos \varphi + \frac{\partial u_z}{\partial t} \sin \varphi \right) B_z (B_s^+ + B_s^-)].$$

Через B_z^+ позначено вираз

$$B_z^+ = B_{z0} + B_{z1} - B_{z2} \theta_s + B \theta_s, \quad \text{де } B_{z0}$$

компоненти магнітної індукції початкового власного магнітного поля, обумовлені стороннім електричним струмом; B_{z0} – компоненти зовнішнього магнітного поля, отримані з розв'язку задачі статички; B_z – нормальна складова магнітної індукції оболонки. Позначення системи наведені в [8].

Отримана зв'язана розв'язувальна система нелінійних диференціальних рівнянь восьмого порядку (3), яка описує напружено-деформівний стан гнучких струмонесучих оболонок з ортотропною електропровідністю.

Для побудови лінійних рівнянь при дослідженні електромагнітних полів при малих збуреннях проведемо лінеаризацію вихідних рівнянь магнітопружності.

Представимо компоненти збуреного електромагнітного поля і вектор переміщення $\vec{u}$ у вигляді:

$$\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{h}_0, \quad \vec{E} = \vec{e}_0, \quad \vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{b}_0,$$

$$\vec{D} = \vec{d}_0, \quad \vec{J} = \vec{j}_0, \quad \vec{U} = \vec{u}_0 + \vec{u}$$

Враховуючи, що компоненти індукованого електромагнітного поля $\vec{h}_0, \vec{b}_0, \vec{d}_0, \vec{j}_0$, а також переміщення, що з'являються в результаті збурення $\vec{U}$ малі, лінеаризуємо всі вихідні рівняння. При цьому ми використовуємо положення теорії малих збурень, тобто при лінеаризації нехтуємо квадратами і добутками усіх величин, що виникають у результаті збурення.

Після відповідних перетворень отримуємо лінеаризовані рівняння магнітопружності ортотропного конуса:

$$\frac{\partial U}{\partial s} = \frac{1 - \nu_0 \nu_0}{e_s h} N_x - \frac{\nu_0 \cos \varphi}{r} U - \frac{\nu_0 \sin \varphi}{r} w;$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial w}{\partial s} &= -g_s; \\ \frac{\partial g_s}{\partial s} &= \frac{12(1 - \nu_s \nu_g)}{e_s h^3} M_s - \frac{\nu_0 \cos \varphi}{r} g_s; \\ \frac{\partial N_s}{\partial s} &= \frac{\cos \varphi}{r} \left(\nu_s \frac{e_0}{e_s} - 1 \right) N_s + \\ &+ \frac{e_0 h \cos^2 \varphi}{r^2} U + \frac{e_0 h \cos \varphi \sin \varphi}{r^2} w - P_s + \\ &+ h J_{m\tau} B_{\tau 0} - \sigma_1 h \left[e_{00} B_{\tau 0} - \frac{\partial U}{\partial t} B_{\tau 0} + \right. \\ &+ \left. 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} B_{\tau 0} (B_s^+ + B_s^-) \right] + \rho h \frac{\partial^2 U}{\partial t^2}; \\ \frac{\partial Q_s}{\partial s} &= -\frac{\cos \varphi}{r} Q_s + \nu_s \frac{e_0 \sin \varphi}{e_s r} N_s + \\ &+ \frac{e_0 h \sin \varphi \cos \varphi}{r^2} U + e_0 h \frac{\sin^2 \varphi}{r^2} w - \\ &- P_s - 0,5 h J_{m\tau} (B_s^+ + B_s^-) - \\ &- \sigma_1 h [-0,5 e_{m0} (B_s^+ + B_s^-) - \\ &- 0,25 \frac{\partial w}{\partial t} (B_s^+ + B_s^-)^2 - \\ &- \frac{1}{12} \frac{\partial w}{\partial t} (B_s^+ - B_s^-)^2 + 0,5 \frac{\partial U}{\partial t} B_{s0} \times \\ &\times (B_s^+ + B_s^-) + \rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}; \\ \frac{\partial M_s}{\partial s} &= \frac{\cos \varphi}{r} \left(\nu_s \frac{e_0}{e_s} - 1 \right) M_s + \\ &+ \frac{e_0 h^3 \cos^2 \varphi}{12 r^2} g_s + Q_s; \\ \frac{\partial b_{0\tau}}{\partial s} &= -\sigma_2 \mu \left[e_{00} + 0,5 \frac{\partial w}{\partial t} (B_s^+ + B_s^-) - \right. \\ &- \left. \frac{\partial U}{\partial t} B_{\tau 0} \right] + \frac{B_s^+ - B_s^-}{h}; \\ \frac{\partial e_{00}}{\partial s} &= -\frac{\partial b_{0\tau}}{\partial t} - \frac{\cos \varphi}{r} e_{00}.\end{aligned}$$

Значення $B_{\tau 0}$, яке задовольняє задачі магнітопружності, обиралось як середнє значення із розв'язків нелінійної задачі і приймалося рівним $B_{\tau 0} = -0,79 \cdot 10^{-1} \text{ Т}$. Геометричні та фізичні параметри оболонки, навантаження та граничні умови відповідають крайовій задачі в нелінійній постановці.

Додавши до отриманої системи початкові та граничні умови, отримаємо крайову задачу, яка розв'язується чисельно згідно з методикою наведеною в роботах [6,9]. Запропонований підхід до чисельного розв'язання крайової задачі магнітопружності базується на послідовному застосуванні схеми Ньюмарка, метода

квазілінеаризації та методу дискретної ортогоналізації.

3 Чисельний розв'язок задачі

Розглядається зрізана ортотропна конічна оболонка із бороалюмінія, яка знаходиться в зовнішньому магнітному полі під дією нормальної складової механічної сили

$P_s = 5 \cdot 10^4 \sin \omega t \text{ Н/м}^2$ і зовнішнього електричного струму

$J_{0\tau m} = 5 \cdot 10^4 \sin \omega t \text{ А/м}^2$. Параметри оболонки та матеріалу обираємо наступні:

$s_0 = 0$, $s_n = 0,4 \text{ м}$, $h = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м}$, $B_s^+ = 0,5 \text{ Т}$,

$e_s = 22,9 \cdot 10^{-10} \text{ Н/м}^2$, $e_n = 10,7 \cdot 10^{-10} \text{ Н/м}^2$,

$\nu_s = 0,262$, $\nu_n = 0,32$, $\rho = 2670 \text{ кг/м}^3$,

$\sigma_1 = \sigma_2 = 0,454 \cdot 10^8 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$, $\sigma_3 = 0,2 \cdot 10^8 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$,

$\mu = 1,256 \cdot 10^{-6} \text{ Гн/м}$, $\omega = 314,16 \text{ с}^{-1}$.

Граничні умови обираються такі:

$u = M_r = 0$, $Q_s = -200$, $B_s^+ = 0,3 \sin \omega t$ при $s = 0$.

$u = w = g_s = B_s^- = 0$ при $s = s_n$.

Розв'язання задачі проводилося на інтервалі за часом $t = 1 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, шаг інтегрування за часом обирався рівним $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ при ста точках інтегрування за довжиною оболонки.

В таблиці наведені значення прогину w , колового механічного навантаження σ_n на зовнішній поверхні оболонки, нормальної складової індукції магнітного поля $B_{\tau 0}$ і меридіональної складової сили Лоренца F_s^+ в залежності від s для кутів $\varphi = \frac{\pi}{30}$, $\frac{\pi}{15}$.

Значення функцій взяті при $t = 5 \cdot 10^{-3} \text{ с}$, де вони досягають максимальних значень.

4 Висновки

Розглядаючи значення функцій для кута $\varphi = \frac{\pi}{30}$, відмічаємо, що розбіжності максимальних значень прогину w за двома теоріями (контур $s = s_n$) складає 27%; для σ_n при $s = 0,08 \text{ м}$ досягає 97%; $B_{\tau 0}$ при $s = 0,04 \text{ м}$ досягає 41%; F_s^+ при $s = s_n$ практично рівні, розбіжності складають 0,3%.

	s	w · 10 ³		σ _θ ⁺ · 10 ⁻⁷		B _y · 10 ³		F _s ⁺	
		лін.	нел.	лін.	нел.	лін.	нел.	лін.	нел.
φ = $\frac{\pi}{15}$	0.00	1.4398	1.1378	3.3443	3.1912	300.00	300.00	-12476.0	12435.0
	0.04	0.9015	0.8627	-4.6155	-0.0476	4.8370	-8.2703	-0.8281	3.0788
	0.08	0.5198	0.4998	24.3430	12.3650	-1.7395	-1.2817	-0.2602	-0.0681
	0.12	0.3846	0.3686	0.4753	0.4509	-1.0607	-0.7938	0.2941	0.1908
	0.16	0.3228	0.3096	0.1194	0.1198	-0.1133	-0.0320	0.0199	0.0076
	0.20	0.2937	0.2832	-0.0057	-0.0353	0.2464	-0.0229	-0.0721	0.0057
	0.24	0.2771	0.2624	-0.1706	-0.1337	-0.1398	0.0557	0.0402	-0.0140
	0.28	0.2393	0.2306	-0.3439	-0.2547	-0.5995	-0.4252	0.1095	0.1091
	0.32	0.1699	0.1659	-0.4431	-0.3582	-0.1462	0.3152	0.0574	-0.0750
	0.36	0.0680	0.0671	-0.3079	-0.3017	-0.9963	-1.1217	0.2646	0.3011
	0.40	-0.0004	-0.0009	0.2515	0.2739	-0.0373	0.0767	0.0081	-0.0158
φ = $\frac{\pi}{10}$	0.00	1.2291	1.2290	5.7388	5.7333	300.00	300.00	-12633.0	-12633.0
	0.04	0.5174	0.5170	3.4229	3.4167	-4.8492	-5.0399	0.8895	0.9229
	0.08	0.2745	0.2734	0.9587	0.9524	-1.1126	-1.1196	0.2573	0.2584
	0.12	0.2189	0.2183	0.2152	0.2103	-0.0797	-0.0725	0.0193	0.0175
	0.16	0.2060	0.2066	0.0329	0.0258	0.0788	0.0739	-0.0196	-0.0186
	0.20	0.2034	0.2033	-0.0273	-0.0210	0.2158	0.1502	-0.0518	-0.0377
	0.24	0.2067	0.2061	-0.0549	-0.0471	0.2413	0.1826	-0.0626	-0.0479
	0.28	0.2070	0.2097	-0.1700	-0.1531	-0.0428	0.1908	0.0111	-0.0472
	0.32	0.1811	0.1859	-0.4245	-0.4450	0.0567	-0.8175	-0.0088	0.2631
	0.36	0.0854	0.0937	-0.5523	-0.5107	-0.8686	-0.1832	0.0932	0.02371
	0.40	-0.0032	0.0000	0.5409	0.5652	-0.1534	0.1016	0.0212	-0.0217

Розглядаючи кут $\varphi = \frac{\pi}{15}$, відмічаємо збіг результатів, як за лінійною, так і за нелінійною теоріям при їх максимальних значеннях. Тобто розбіжності між розв'язками в лінійній та нелінійній теоріях збільшуються зі зменшенням кута φ (збільшенням кута розкриття конусу).

В той же час необхідно відмітити суттєву різницю за лінійною і нелінійною теоріям для напруження, магнітної індукції та сили Лоренца при наближенні до правого кінця оболонки ($s = 0.28; 0.32; 0.36m$).

Аналізуючи отримані результати, можемо судити про вплив геометричної нелінійності на напружено-деформівний стан ортотропних оболонок у порівнянні з лінійною теорією.

Список використаних джерел

1. Багдасарян Г.Е., Данилян З.Н. Уравнения движения в перемещениях идеально-проводящих упругих анизотропных сред при наличии магнитного поля // Механика: Межвуз. сб. науч. тр. Мех. дефор. твер. тела. - 1984. - Вып.3. - С. 32-42.
2. Вольман В.И., Пименов Ю.В. Техническая электродинамика - М.: Связь, 1971. - 487 с.

3. Kaliski S. Wave equations of thermoelectromagnetoelasticity. // Proc. Vibr. Probl. Pol. Acad. Sci., - 1965. - Vol. 6, - № 3, - P. 231-265.
4. Най Дж. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. - М.: Мир, 1967. - 639 с.
5. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. - М.: Наука, 1979. - 639 с.
6. Улитко А.Ф., Мольченко Л.В., Ковальчук В.Ф. Магнітопружність при динамічному навантаженні. - К.: Либідь, 1994. - 115 с.
7. Амбарцумян С.А., Багдасарян Г.Е., Белубекян М.В. Магнитоупругость тонких оболочек. - М.: Наука, 1977. - 272 с.
8. Мольченко Л.В., Лоос І.І., Індіанінов Р.Ш. Магнітопружне деформування ортотропних оболонок обертання з ортотропною електропровідністю // Вісник КУ. Математика. Механіка. - 2008. - Вип. 19-20. - С. 53-59.
9. Григоренко Я.М., Мольченко Л.В. Основи теорії пластин та оболонок. - К.: Либідь, 1993. - 231 с.

Надійшла до редколегії 04.06.2009.

УДК 539.3

Олег С. Лимарченко, д.т.н., професор,
Ігор С. Ружицький, аспірант

Вплив рухомості еліптичного резервуару на нелінійне хвилеутворення на поверхні рідини

Розглядається рух еліптичного резервуару при кінематичних збуреннях вільної поверхні і силовому збудженні руху резервуару. Резервуар рухається поступально в горизонтальній площині. Показано, що рухомість резервуару сприяє підсиленню енергообміну між резервуаром і рідиною, зокрема, це призводить до більшого збудження вищих форм коливань і вісесиметричної форми, яка зумовлює несиметричність профілю хвилі. У випадку збудження коливань системи короткотривалим силовим імпульсом в системі більш суттєво проявляються нелінійні ефекти і внесок вищих форм коливань.

Ключові слова: рідина, еліптичний резервуар, імпульсне збудження руху.

Oleg S. Limarchenko, Dr. Sci. (Engineering),
professor
Igor S. Ruzhitskiy, PhD student

Influence of elliptic reservoir mobility on nonlinear waveformation on a liquid surface

We consider motion of elliptic reservoir under kinematic excitations of a free surface of liquid and force disturbance of reservoir motion. Reservoir performs translation motion in horizontal plane. It was shown that reservoir mobility promotes intensification of energy redistribution between reservoir and liquid, in particular, this results in excitation of high modes of oscillations and axisymmetric mode, which defines non-symmetry of waves profile. In the case of disturbance of oscillations of the system by short-term force impulse nonlinear effects and contribution of high modes of oscillations manifested to great extent.

Key Words: liquid, elliptic reservoir, impulse excitation of motion.

E-mail: olelim2000@yahoo.com, glove20003@ukr.net

Статтю представила кафедра механіки суцільних середовищ.

1. Вступ.

Задачі про коливання рідини в резервуарах є класичними і розв'язувалися протягом багатьох років. Переважно дослідження проводилися для резервуарів циліндричної форми, а для резервуарів нециліндричної форми розглядалися лише задачі частот, форм коливань, приєднаних мас і моментів інерції. В більшості випадків припускалося, що рух резервуару заданий.

Історично нелінійні задачі динаміки резервуарів з рідиною розвивалися на основі методу збурень в диференціальній та варіаційній формах. Слід виділити роботи Г.С. Нариманова, Л.В. Докучаєва, І.О. Луковського, Дж. Майлса, Х. Бауера, О. Фалтінсена [1–5]. В останні роки практично всі ефективні теоретичні дослідження виконувалися на основі варіаційних алгоритмів.

Розв'язання задач про коливання ідеальної однорідної нестисливої рідини з вільною поверхнею в нециліндричних резервуарах суттєво пов'язане з проблемою виконання умов розв'язності крайової задачі Неймана для рівняння Лапласа. Поглиблений аналіз цієї умови, яка з механічної точки зору пов'язана з узагальненою умовою збереження об'єму рідини, вказує на те,

що для ефективного розв'язання нелінійної задачі необхідно з високою точністю задовільнити умовам збереження об'єму на вільній поверхні, а також уточнено задовільнити граничній умові неперетікання не лише на змочуванні в незбуреному стані бічній поверхні резервуару Σ_0 , а і на деякому її продовженні $\Delta\Sigma$, куди можуть досягати гребені хвиль в процесі збуреного руху.

2. Постановка задачі

Математичне формулювання задачі динаміки системи "резервуар–рідина" з вільною поверхнею представляє собою сукупність кінематичних і динамічних граничних умов. Згідно з ідеями аналітичної механіки кінематичні умови повинні розглядатися як механічні в'язі, які накладають обмеження на варіації невідомих і мають бути виконані заздалегідь при описі механічної системи на основі принципу Гамільтона–Остроградського. При цьому динамічні граничні умови випливають з варіаційного принципу Гамільтона–Остроградського як природні.

До кінематичних умов відносяться:

1) вимога нерозривності потоку в об'ємі рідини τ

$$\Delta\varphi = 0 \text{ в } \tau.$$

2) умова неперетікання на твердій границі контакту тіло-рідина Σ

$$\frac{\partial\varphi}{\partial n} = 0 \text{ на } \Sigma;$$

3) умова неперетікання на вільній збуреній поверхні рідини S

$$\frac{\partial\varphi}{\partial n} = \frac{1}{\sqrt{1+(\nabla\xi)^2}} \frac{\partial\xi}{\partial t} \text{ на } S.$$

Тут і далі використовуємо такі позначення:

φ – потенціал швидкостей рідини, $\frac{\partial}{\partial n}$ – зовнішня нормаль до поверхні, індекс „0” вказує, що поверхня або область розглядаються в незбуреному стані. $\Delta\Sigma$ ($\Sigma = \Sigma_0 + \Delta\Sigma$) – зміна поверхні контакту рідини, яка викликана збуренням руху, ξ – рівняння вільної поверхні рідини.

Рух об'єкту описується в декартовій системі координат $Oxyz$, яка зв'язана з резервуаром. Для формулювання задачі слід додати динамічну граничну умову на вільній поверхні і рівняння руху резервуару, які є наслідком взір'яційного принципу Гамільтона–Остроградського. Зауважимо, що виконання всіх кінематичних умов повинно бути реалізовано до переходу до розв'язку варіаційної задачі.

3. Метод розв'язання

Методика виключення всіх кінематичних граничних умов задачі, виконання умов розв'язності докладно викладена в роботах [6,7]. При цьому здійснюється перехід від континуальної функції Лагранжа системи до дискретної функції Лагранжа, яка відповідає вільній механічній системі для довільної кількості форм коливань рідини. Зауважимо, що для декомпозиції параметрів руху рідини по амплітудах використовувалися не класичні форми коливань рідини, а координатні функції, які були одержані на основі методу допоміжної області [6,7], який дозволив з високою точністю забезпечити виконання умов неперетікання не лише на Σ , але й на $\Delta\Sigma$, куди може досягати рідина в рамках нелінійної моделі. При цьому рівняння Лагранжа II роду – рівняння сумісного руху системи "резервуар-рідина" в амплітудних параметрах a_i та параметрах руху несучого тіла $\bar{e}$ мають такий вигляд:

$$\sum_i \bar{e} \left\{ \dot{v}_i^2 + \sum_j a_j \dot{v}_{ij}^2 + \sum_{j,k} a_j a_k \dot{v}_{ijk}^2 \right\} + \bar{e} \left\{ \dot{U}_i^2 + \sum_j a_j \dot{U}_{ij}^2 + \right.$$

$$\left. + \sum_{i,j} a_i a_j \dot{U}_{ij}^2 + \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k \dot{U}_{ijk}^2 \right\} = \sum_{i,j} \dot{a}_i \dot{a}_j V_{ij}^{2*} + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i \dot{a}_j a_k V_{ijk}^{2*} +$$

$$+ \bar{e} \left\{ \sum_i \dot{a}_i \dot{U}_{in}^{2*} + \sum_{i,j} \dot{a}_i a_j \dot{U}_{ij}^{2*} + \sum_{i,j,k} \dot{a}_i a_j a_k \dot{U}_{ijk}^{2*} \right\} - g \left\{ \sum_i a_i W_i^2 \right\} +$$

$$+ \frac{3}{2} \sum_{i,j} a_i a_j W_{ij}^2 + 2 \sum_{i,j,k} a_i a_j a_k W_{ijk}^2, \quad r = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

$$\frac{\rho}{(M_x + M_r)} \left\{ \sum_i \bar{a}_i \left[\dot{U}_i^2 + \sum_j a_j \dot{U}_{ij}^2 + \sum_{j,k} a_j a_k \dot{U}_{ijk}^2 \right] \right\} +$$

$$+ \bar{e} = \frac{\bar{F}}{(M_x + M_r)} - g \bar{e}_0 -$$

$$- \frac{\rho}{(M_a + M_r)} \sum_{i,j} \dot{a}_i \dot{a}_j \left\{ \dot{U}_i^2 + 2 \sum_k a_k \dot{U}_{ik}^2 \right\}. \quad (2)$$

Рівняння (1) описують зміну амплітуд коливань вільної поверхні рідини, а рівняння (2) – динаміку поступального руху резервуара. В рівняння входять сили внутрішньої взаємодії між резервуаром і рідиною. Сумісний рух резервуара з рідиною повністю характеризується незалежними узагальненими координатами a_i та $\bar{e}$. В узагальненому вигляді ці рівняння руху системи мають вигляд:

$$\sum_{n=1}^N p_m(a_i, t) \ddot{a}_n + \sum_{n=N+1}^{N+3} p_m(a_i, t) \ddot{\bar{e}}_{n-N} = q_r(a_i, \dot{a}_i, t),$$

$$r = 1, 2, \dots, N+3$$

Задача про коливання еліптичного резервуару розв'язувалася для випадку нерухомого резервуару, рухомого та при динамічному збудженні. При цьому розглядалися резервуари трьох типів:

- 1) розтягнутий еліпсоїд $a = 1, b = 1.4, H = 0.7$;
- 2) сфера $a = 1, b = 1, H = 0.5$;
- 3) стиснений еліпсоїд $a = 1, b = 0.7, H = 0.35$.

Для всіх випадків резервуарів розглядалися наступні три задачі:

- а) резервуар нерухомий, рух збурюється за рахунок початкового відхилення вільної поверхні рідини по першій антисиметричній формі $a_1 = 0.15R$, де R – радіус вільної поверхні;
- б) резервуар рухомий, збурення таке ж, як і у випадку першої серії задач;
- в) резервуар та рідина знаходяться у стані спокою, рух збуджується горизонтальною силою, прикладеної до стінки резервуару, у вигляді прямокутного імпульсу;

Для аналізу розвинення динамічних процесів і нелінійних механізмів взаємозв'язків системи проаналізовано зміну в часі, вказаного у секун-

дах, першої та другої антисиметричних форм коливань в рідині (a_1, a_6), а також першої та другої симетричних форм коливань в рідині (a_3, a_6), які збуджуються лише в рамках нелінійної моделі. Ці залежності приведено на рис. 1 – 4 для випадку розтягнутого еліпсоїда, загальна тенденція зміни амплітудних параметрів залишається незмінною.

Аналіз чисельних результатів вказує на те, що рухомість резервуару призводить до більшого збудження вищих форм коливань рідини. Силове збудження призводить до більшого прояву нелінійних механізмів взаємодії між формами коливань. Зміна в часі основної форми коливань a_1 для цих задач відбувається з різною частотою.

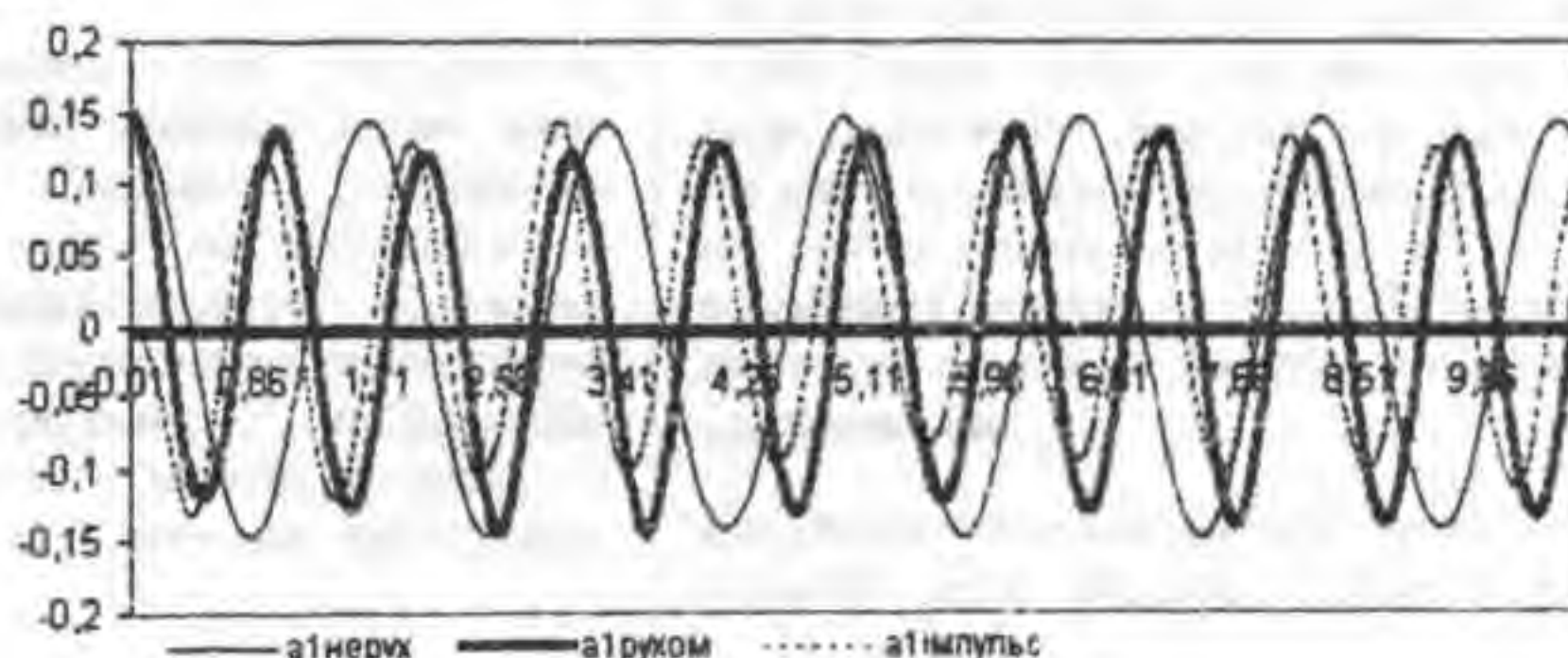


Рис.1. Зміна амплітуди a_1 в часі.

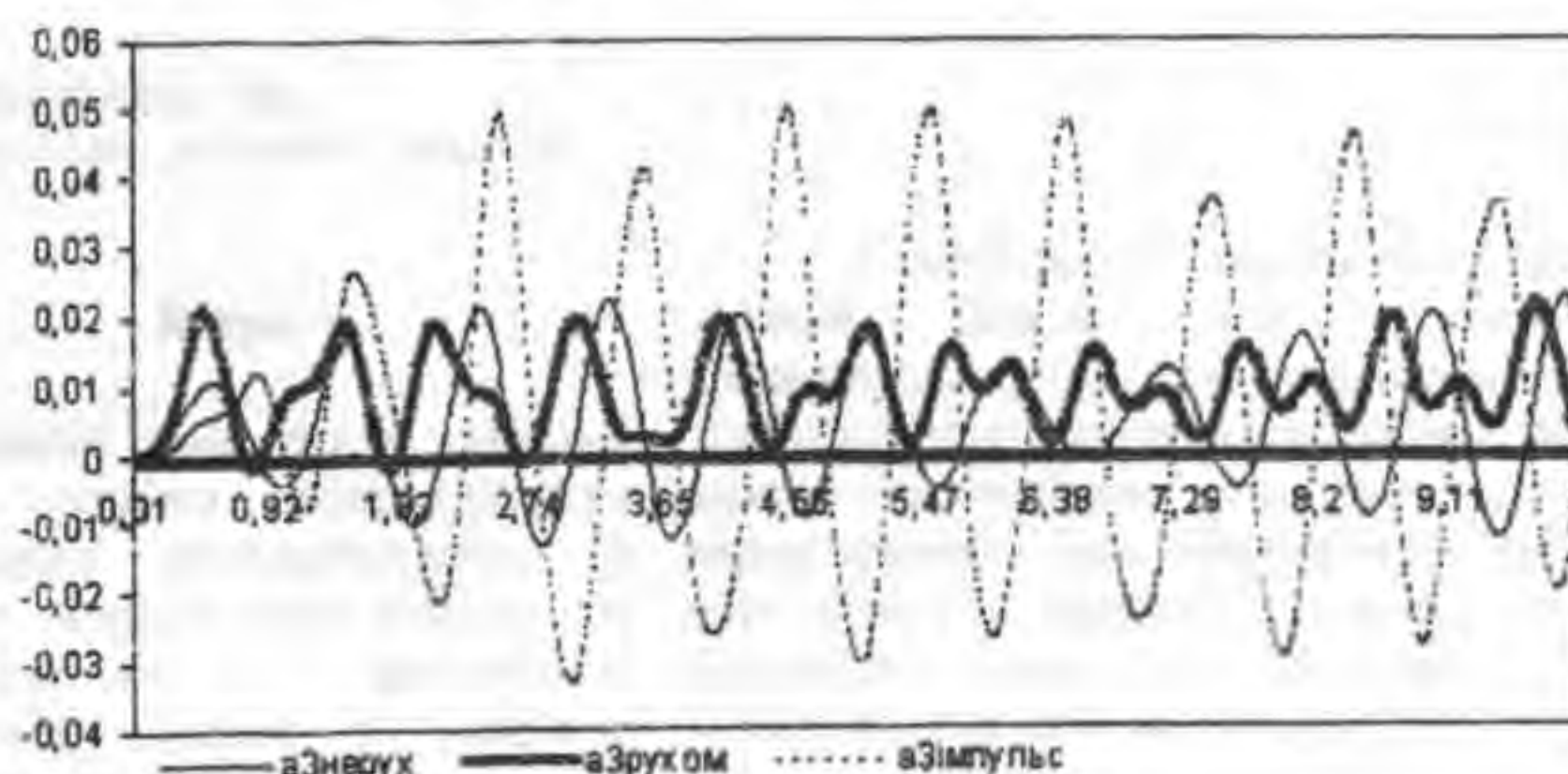


Рис.2. Зміна амплітуди a_3 в часі.

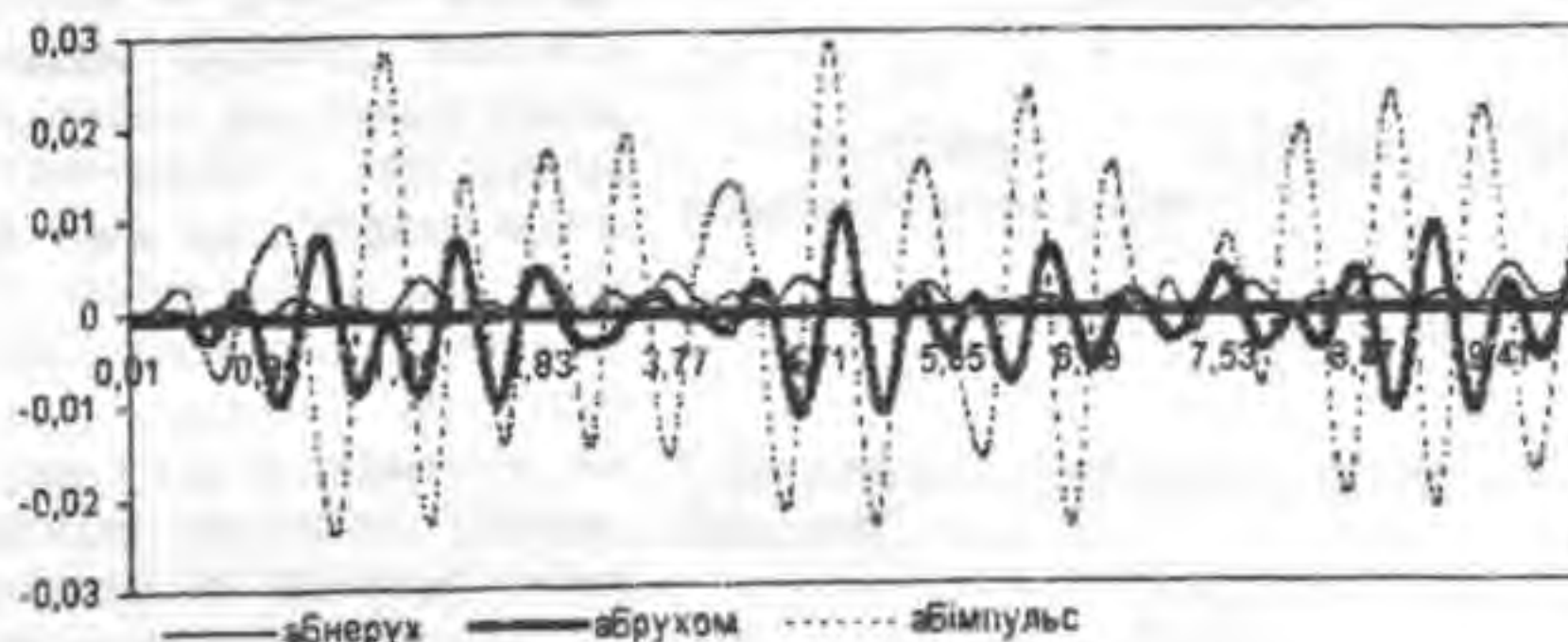


Рис.3 Зміна амплітуди a_6 в часі.

УДК 517.9

Маринетс К. В., студентка.

Дослідження розв'язків триточкових задач типу Коші–Ніколетті та зведення їх до двоточкових.

Отримані результати при дослідженні триточнової нелінійної крайової задачі типу Коші–Ніколетті. Показано доцільність зведення вихідної задачі до відповідної їй двоточнової та параметризацію одержаної крайової задачі. Для дослідження перетвореної крайової задачі розроблено модифікацію чисельно-аналітичного методу, який і використовується при побудові наближених розв'язків.

Ключові слова: чисельно-аналітичний метод, триточкова крайова задача, регулюючий параметр.

*E-mail: kaiya_marinets@ukr.net

Статтю представив член редколегії академік
Пересток М. О.

Вступ

На сьогоднішній день теорія крайових задач є одним з розділів диференціальних рівнянь, що широко використовується у прикладних задачах. Існують різні методи, які дозволяють встановити розв'язність досліджуваної задачі. Одним з найбільш універсальних являється чисельно-аналітичний метод послідовних наближень [1, 2]. Суть методу полягає в тому, що вихідна крайова задача зводиться до відповідної їй збуреної крайової задачі, яка містить невідомі параметри. Розв'язок одержаної задачі шукається у аналітичній формі, використовуючи послідовні наближення спеціального вигляду. Крім того, збурена задача розглядається разом із, так званою, визначальною алгебраїчною або трансцендентною системою рівнянь, яка дозволяє чисельно обчислити початкові значення розв'язків та параметри, що їм відповідають. Вивчаючи цю систему рівнянь, встановлюються необхідні та достатні умови існування розв'язку вихідної крайової задачі.

Схема побудови послідовних наближень на основі чисельно-аналітичного методу суттєво залежить від типу заданих диференціального рівняння та крайових умов.

Marynets K. V., student.

The investigation of the Cauchy–Nicoletti type three point boundary value problem.

We obtain some results concerning the investigation of the Cauchy–Nicoletti type three point boundary value problem. We show that it is useful to reduce the given boundary value problem to the two point one and to parametrize the last one. To study the transformed problem, we made the modification of numerical–analytic method that is used for getting approximations.

Key Words: numerical–analytic method three point boundary value problem, regulating parameter.

У даній роботі досліджується триточкова крайова задача типу Коші–Ніколетті. Обґрунтовано доцільність зведення цієї задачі до задачі з більш простими крайовими умовами, а саме — двоточковими, за допомогою спеціальної параметризації. Для встановлення розв'язності перетвореної крайової задачі розроблено відповідну модифікацію чисельно-аналітичного методу послідовних наближень.

Постановка задачі та її зведення до двоточнової

Розглядаємо систему нелінійних диференціальних рівнянь

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad t \in [0, T] \quad (1)$$

з розділеними крайовими умовами типу Коші–Ніколетті

$$x_1(0) = x_{10},$$

$$x_p(0) = x_{p0},$$

$$x_{p+1}(t_1) = d_{p+1}$$

$$\begin{aligned} & \dots \\ & x_{p+q}(t_1) = d_{p+q}, \\ & x_{p+q+1}(T) = d_{p+q+1}, \\ & \dots \\ & x_n(T) = d_n. \end{aligned} \quad (2)$$

Використовуючи рівності (4), перепишемо триточкові крайові умови (3) у вигляді двоточкових

$$Ax(0) + Cx(T) = d - A_1x(t_1) + \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \dots \\ \lambda_p \\ \lambda_{p+1} \\ \dots \\ \lambda_{p+q} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

де $t_1 \in (0, T)$, $f \in C([0, T] \times D, R^n)$, $D \subset R^n$, D — замкнена обмежена область.

Триточкові крайові умови (2) можна записати у матричній формі

$$Ax(0) + A_1x(t_1) + C_1x(T) = d, \quad (3)$$

$$\text{де } A = \begin{pmatrix} I_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_q & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_{n-(p+q)} \end{pmatrix}, \quad d = \begin{pmatrix} x_{10} \\ \dots \\ x_{p0} \\ d_{p+1} \\ \dots \\ d_{p+q} \\ d_{p+q+1} \\ \dots \\ d_n \end{pmatrix}, \quad I_p = I_q,$$

$$\text{де } C = \begin{pmatrix} I_p & 0 & 0 \\ 0 & I_q & 0 \\ 0 & 0 & I_{n-(p+q)} \end{pmatrix} = I_n.$$

Введемо позначення

$$d(\lambda) = d - A_1x(t_1) + \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \dots \\ \lambda_p \\ \lambda_{p+1} \\ \dots \\ \lambda_{p+q} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{10} + \lambda_1 \\ \dots \\ x_{p0} + \lambda_p \\ \lambda_{p+1} \\ \dots \\ \lambda_{p+q} \\ d_{p+q+1} \\ \dots \\ d_n \end{pmatrix},$$

де $\lambda = \text{col}(\lambda_1, \dots, \lambda_{p+q})$.

Перетворені крайові умови (5) можна подати у вигляді

$$Ax(0) + Cx(T) = d(\lambda). \quad (6)$$

У рівності (6), на відміну від (3), замість виродженої матриці C_1 , фігурує невироджена матриця C .

Зауваження 1. Нелінійна задача з триточковими крайовими умовами типу Коші-Ніколетті (1), (2) еквівалентна двоточковій крайовій задачі (1), (6) разом з умовою (4).

Для дослідження одержаної крайової задачі (1), (6) застосуємо відповідну модифікацію чисельно-аналітичного методу послідовних наближень.

$I_{n-(p+q)}$ — одиничні матриця розмірності $p \times p$, $q \times q$, $n - (p+q) \times n - (p+q)$ відповідно. Очевидно, що матриці, які входять у крайові умови (3), є виродженими. У зв'язку з цим зауважимо, що безпосереднє застосування відомих схем чисельно-аналітичного методу [1, 2] неможливе або пов'язане зі значними труднощами обчислювального характеру [3, 4].

Для того, щоб обійти виродженість матриці C_1 , замінимо значення перших $(p+q)$ компонент розв'язку крайової задачі (1), (3) в точці T параметрами $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{p+q}$.

$$\begin{aligned} & x_1(T) = \lambda_1, \\ & \dots \\ & x_p(T) = \lambda_p, \\ & x_{p+1}(T) = \lambda_{p+1}, \\ & \dots \\ & x_{p+q}(T) = \lambda_{p+q}. \end{aligned} \quad (4)$$

Збіжність послідовних наближень

Припустимо, що для крайової задачі (1), (2) виконуються наступні умови:

А) функція $f(t, x)$ неперервна в області $[0, T] \times D$ і задовольняє умову Ліпшиця вигляду

$$|f(t, x) - f(t, y)| \leq K|x - y|, \quad (7)$$

для всіх $t \in [0, T]$, $\{x, y\} \subset D$, де $K = (k_{ij})_{i,j=1}^n$ — деяка стала матриця з невід'ємними компонентами,

$|f(t, x)| = \text{col}(|f_1(t, x)|, |f_2(t, x)|, \dots, |f_n(t, x)|)$, а також нерівності та операції максимуму та мінімуму між векторами, тут і надалі, розуміються покомпонентно;

В) множина

$$D_\beta := \{z \in D : B(z, \beta(z, \lambda)) \subset D, \forall \lambda \in I_1 \times I_2 \times \dots \times I_{p+q}\}$$

є непорожньою, де область

$$B(z, \beta(z, \lambda)) := \{x \in R^n : |x - z| \leq \beta(z, \lambda), \forall \lambda \in I_1 \times I_2 \times \dots \times I_{p+q}\},$$

де

$$\beta(z, \lambda) := \frac{T}{2} \delta_D(f) + |d(\lambda) - (A + E)z|, \quad (8)$$

де I_n — одинична матриця і

$$\delta_D(f) := \frac{1}{2} \left[\max_{(t,x) \in [0,T] \times D} f(t, x) - \min_{(t,x) \in [0,T] \times D} f(t, x) \right] \quad (9)$$

де $\Lambda := \{\lambda = \text{col}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{p+q}) \in R^{p+q} :$

$$\text{col}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{p+q}, d_{p+q+1}, \dots, d_n) \in D_\beta\};$$

С) найбільше власне значення $\lambda_{\max}(K)$ матриці K задовольняє нерівність $\lambda_{\max}(K) < \frac{10}{3T}$.

Визначимо множину $U \subset R^{n-p}$ наступним чином:

$$U := \{u \in R^{n-p} : \text{col}(x_{10}, \dots, x_{p0}, u_1, u_2, \dots, u_{n-p}) \in D_\beta\}.$$

Розглянемо послідовність функцій $\{x_m(t, u, \lambda)\}$, задану формулою:

$$x_m(t, u, \lambda) := z + \int_0^t f(s, x_{m-1}(s, u, \lambda)) ds - \frac{t}{T} \int_0^T f(s, x_{m-1}(s, u, \lambda)) ds + \frac{t}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z], \quad (10)$$

де $m = 1, 2, 3, \dots$

$$x_0(t, u, \lambda) = \text{col}(x_{10}, \dots, x_{p0}, u_1, u_2, \dots, u_{n-p}) := z \in D_\beta,$$

$$u \in U, \lambda = \text{col}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{p+q}).$$

Зауваження 2. Легко бачити, що функції послідовності (10) містять $n+q$ невідомих скалярних параметрів: $u_1, u_2, \dots, u_{n-p}, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{p+q}$. Крім того, функції $x_m(t, u, \lambda)$ задовольняють двоточкові крайові умови (6) при довільних значеннях перерахованих вище параметрів.

Теорема 1. Нехай функція $f : [0, T] \times D \rightarrow R^n$ задовольняє умови А) — С). Тоді:

1) послідовність функцій вигляду (10) рівномірно збігається до граничної функції $x^*(t, u, \lambda)$ при $m \rightarrow \infty$ для всіх $(t, u, \lambda) \in [0, T] \times U \times \Lambda$;

2) гранична функція

$$x^*(t, u, \lambda) := \lim_{m \rightarrow \infty} x_m(t, u, \lambda) \quad (11)$$

є єдиним розв'язком інтегрального рівняння

$$x(t) = z + \int_0^t f(s, x(s)) ds - \frac{t}{T} \int_0^T f(s, x(s)) ds + \frac{t}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z] \quad (12)$$

або, що те ж саме, розв'язком збуреної двоточної крайової задачі

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x) + \Delta(u, \lambda), \\ Ax(0) + Cx(T) &= d(\lambda) \end{aligned} \quad (13)$$

з початковою умовою при $t = 0$:

$$x^*(0, u, \lambda) = z = \text{col}(x_{10}, \dots, x_{p0}, u_1, u_2, \dots, u_{n-p}),$$

де

$$\Delta(u, \lambda) := -\frac{1}{T} \int_0^T f(s, x(s, u, \lambda)) ds + \frac{1}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z] \quad (14)$$

3) справедлива оцінка відхилення функції $x^*(t, u, \lambda)$ від її m -того наближення $x_m(t, u, \lambda)$ для всіх значень параметрів $u \in U$, $\lambda \in \Lambda$

$$\begin{aligned} |x^*(t, u, \lambda) - x_m(t, u, \lambda)| &\leq \\ &\leq \frac{20}{9} t \left(1 - \frac{1}{T}\right) Q^{m-1} (I_n - Q^{-1}) h, \end{aligned} \quad (15)$$

де $Q = \frac{3T}{10} K$ і $h := Q \delta_{11}(f) + K |d(\lambda) - (A + I_n)z|$.

Доведення. Доведемо, що послідовність (10) є послідовністю Коші у банаховому просторі $C([0, T], R^n)$. Спочатку покажемо, що $x_m(t, u, \lambda) \in D$, для всіх $(t, u, \lambda) \in [0, T] \times U \times \Lambda$, $m \in N$.

Справді, використовуючи оцінку леми 4 з [5]

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t \left[f(\tau) - \frac{1}{T} \int_0^T f(s) ds \right] d\tau \right| &\leq \\ &\leq \frac{1}{2} \alpha_1(t) \left[\max_{t \in [0, T]} f(t) - \min_{t \in [0, T]} f(t) \right], \end{aligned} \quad (16)$$

$$\text{де } \alpha_1(t) := 2t \left(1 - \frac{1}{T}\right), \quad |\alpha_1(t)| \leq \frac{T}{2}, \quad t \in [0, T], \quad (17)$$

співвідношення (10) при $m = 0$ отримуємо:

$$\begin{aligned} |x_1(t, u, \lambda)| &\leq \left| \int_0^t \left[f(\tau) - \frac{1}{T} \int_0^T f(s) ds \right] d\tau \right| + \\ &+ |d(\lambda) - (A + I_n)z| \leq \alpha_1(t) \delta_{11}(f) + \beta_1(z, \lambda) \leq \beta(z, \lambda), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\text{де } \beta_1(z, \lambda) := |d(\lambda) - (A + I_n)z|. \quad (19)$$

Виходячи з (8), бачимо, що $x_1(t, u, \lambda) \in D$, коли $(t, u, \lambda) \in [0, T] \times U \times \Lambda$.

За індукцією можна показати, що всі функції (10) також належать множині D , $m = 1, 2, \dots$, $t \in [0, T]$, $u \in U$, $\lambda \in \Lambda$.

Розглянемо різницю функцій

$$\begin{aligned} x_{m+1}(t, u, \lambda) - x_m(t, u, \lambda) &= \\ &= \int_0^t [f(s, x_m(s, u, \lambda)) - f(s, x_{m-1}(s, u, \lambda))] ds - \\ &- \frac{1}{T} \int_0^T [f(s, x_m(s, u, \lambda)) - f(s, x_{m-1}(s, u, \lambda))] ds, \end{aligned} \quad (20)$$

$m = 1, 2, \dots$

Позначимо

$$d_m(t, u, \lambda) := |x_m(t, u, \lambda) - x_{m-1}(t, u, \lambda)|, \quad m = 1, 2, \dots$$

Використовуючи оцінку леми 2.3 з [2] та беручи до уваги умову Ліпшиця, отримаємо

$$\begin{aligned} d_{m+1}(t, u, \lambda) &\leq K \left[\left(1 - \frac{1}{T}\right) \int_0^t d_m(s, u, \lambda) ds + \right. \\ &\left. + \frac{1}{T} \int_0^T d_m(s, u, \lambda) ds \right], \quad \forall m = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (21)$$

На підставі нерівності (18)

$$\begin{aligned} d_1(t, u, \lambda) &= |x_1(t, u, \lambda) - z| \leq \\ &\leq \alpha_1(t) \delta_{11}(f) + \beta_1(z, \lambda) \end{aligned} \quad (22)$$

де $\beta_1(z, \lambda)$ задано формулою (19).

Використовуючи оцінки леми 2.4 з [2]

$$\begin{aligned} \alpha_{m+1}(t) &\leq \left(\frac{3}{10} T\right) \alpha_m(t), \\ \alpha_{m+1}(t) &\leq \left(\frac{3}{10} T\right)^m \bar{\alpha}_1(t), \end{aligned} \quad (23)$$

для послідовності функцій

$$\alpha_{m+1}(t) = \left(1 - \frac{1}{T}\right) \int_0^t \alpha_m(s) ds + \frac{1}{T} \int_0^T \alpha_m(s) ds, \quad (24)$$

$$m = 0, 1, 2, \dots, \quad \alpha_0(t) = 1, \quad \alpha_1(t) = 2t \left(1 - \frac{1}{T}\right),$$

де $\bar{\alpha}_1(t) = \frac{10}{9} \alpha_1(t)$, а також нерівності (22) і рівність (24), із (21) при $m = 1$ випливає

$$d_2(t, u, \lambda) \leq K \delta_{11}(f) \left[\left(1 - \frac{t}{T}\right) \int_0^t \alpha_1(s) ds + \frac{t}{T} \int_t^T \alpha_1(s) ds \right] + K \beta_1(z, \lambda) \left[\left(1 - \frac{t}{T}\right) \int_0^t ds + \frac{t}{T} \int_t^T ds \right] \leq K [\alpha_2(t) \delta_{11}(f) + \alpha_1(t) \beta_1(z, \lambda)].$$

За індукцією можна показати, що

$$d_{m+1}(t, u, \lambda) \leq K^m [\alpha_{m+1}(t) \delta_{11}(f) + \alpha_m(t) \beta_1(z, \lambda)] \quad (25)$$

$m = 0, 1, 2, \dots$, де $\alpha_{m+1}(t), \alpha_m(t)$ обчислюються за формулою (24), а $\delta_{11}(f), \beta_1(z, \lambda)$ визначені згідно (9) і (19).

Використовуючи другу оцінку в нерівності (23), із співвідношення (25) одержимо:

$$d_{m+1}(t, u, \lambda) \leq \overline{\alpha_1}(t) [Q^m \delta_{11}(f) + K Q^{m-1} \beta_1(z, \lambda)] \quad (26)$$

$m = 1, 2, \dots$, де матриця

$$Q = \frac{3}{10} TK \quad (27)$$

Тоді, використовуючи нерівність (26), оцінимо наступну різницю

$$\begin{aligned} & |x_{m+1}(t, u, \lambda) - x_m(t, u, \lambda)| \leq \\ & \leq |x_{m+1}(t, u, \lambda) - x_{m+1-1}(t, u, \lambda)| + \\ & + |x_{m+1-1}(t, u, \lambda) - x_{m+1-2}(t, u, \lambda)| + \dots + \\ & + |x_{m+1}(t, u, \lambda) - x_m(t, u, \lambda)| = \\ & = \sum_{i=1}^m d_{m+1-i}(t, u, \lambda) \leq \overline{\alpha_1}(t) \left[\sum_{i=1}^m (Q^{m+1-i} \delta_{11}(f) + K Q^{m-i} \beta_1(z, \lambda)) \right] = \overline{\alpha_1}(t) \left[Q^m \sum_{i=0}^{m-1} Q^i \delta_{11}(f) + K Q^{m-1} \sum_{i=0}^{m-1} Q^i \beta_1(z, \lambda) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

На підставі умови С), максимальне власне значення матриці Q вигляду (27) не перевищує 1. Тоді маємо

$$\sum_{i=0}^{m-1} Q^i \leq (I_n - Q)^{-1}, \quad \lim_{m \rightarrow \infty} Q^m = [0]$$

Тому із нерівності (28) можемо зробити висновок, що, згідно із критерієм Коші, послідовність $\{x_m(t, u, \lambda)\}$, що задається формулою (10), рівномірно збігається в області $(t, u, \lambda) \in [0, T] \times U \times \Lambda$ до деякої граничної функції $x^*(t, u, \lambda)$.

Оскільки функції $x_m(t, u, \lambda)$ послідовності (10) задовольняють крайові умови (6) при довільних значеннях параметрів, гранична функція $x^*(t, u, \lambda)$ також задовольняє ці умови. Переходячи у формулі (10) до границі при $m \rightarrow \infty$, отримуємо, що гранична функція задовольняє інтегральне рівняння (12), а отже, інтегро-диференціальне рівняння (13).

Оцінка (15) є безпосереднім наслідком нерівності (28).

Існування розв'язків

Вияснимо зв'язок граничної функції $x^*(t, u, \lambda)$ з розв'язком крайової задачі (1), (3).

Теорема 2. Нехай виконуються всі умови теореми 1. Тоді розв'язок $x = x(t, u, \lambda)$ задачі Коші

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) + \mu, \quad t \in [0, T], \quad \mu \in R^n \quad (29)$$

$$x(0) = z = \text{col}(x_{10}, \dots, x_{r0}, u_1, \dots, u_{n-r}) \quad (30)$$

задовольняє крайові умови (6) тоді і тільки тоді, коли контрольний параметр $\mu = \Delta(u, \lambda)$, де $\Delta: U \times \Lambda \rightarrow R^n$ відображення, визначене формулою (14).

Доведення. Згідно із теоремою Пікара-Ліндельофа легко переконатися, що оскільки має місце умова Ліпшиця (7), то початкова задача (29), (30) має єдиний розв'язок для всіх $(\mu, u) \in R^n \times U$. З доведення теореми 1 бачимо,

що для всіх $(u, \lambda) \in U \times \Lambda$, гранична функція $x^*(t, u, \lambda) = \lim_{m \rightarrow \infty} x_m(t, u, \lambda)$ послідовності (10) задовольняє інтегральне рівняння (12), а також крайові умови (6). Тобто $x = x^*(t, u, \lambda)$ вигляду (11) є єдиним розв'язком початкової задачі

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(t, x(t)) + \Delta(u, \lambda), \quad t \in [0, T], \quad (32)$$

$$x(0) = z, \quad (33)$$

де $\Delta(u, \lambda)$ задається формулою (14). Отже, (32), (33) співпадає з (29), (30) при умові, що

$$\mu = \Delta(u, \lambda) = -\frac{1}{T} \int_0^T f(s, x(s)) ds + \frac{1}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z]. \quad (34)$$

Те, що функція (11) не є розв'язком (29), (30) ні при яких інших значеннях μ , не рівних (34), випливає з рівності $\mu = \Delta(u, \lambda)$, а це і доводить розглядувану теорему.

Наступне твердження показує відношення граничної функції $x = x^*(t, u, \lambda)$ до розв'язку параметризованої крайової задачі (1), (6) або еквівалентної їй задачі (1), (2).

Теорема 3. Нехай для крайової задачі (1), (2) виконуються умови А) — С). Тоді функція $x^*(\cdot, u^*, \lambda^*)$ є розв'язком крайової задачі (1), (6) з вектором параметрів λ тоді і тільки тоді, коли $u^* = \text{col}(u_1^*, \dots, u_{n-p}^*)$ задовольнятиме систему рівнянь

$$\Delta(u, \lambda) = -\frac{1}{T} \int_0^T f(s, x^*(s, u, \lambda)) ds + \frac{1}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z] = 0. \quad (35)$$

Функція $x^*(\cdot, u^*, \lambda^*)$ буде розв'язком вихідної крайової задачі (1), (2) тоді і тільки тоді, коли параметри (u^*, λ^*) задовольнятимуть умову (35) і, крім того,

$$x_{p+1}^*(t_1, u, \lambda) = d_{p+1},$$

$$\dots$$

$$x_{p+q}^*(t_1, u, \lambda) = d_{p+q},$$

Зауваження 3. На практиці, фіксуємо деяке натуральне m і замість системи (35) розглядаємо наближену визначальну систему

$$\Delta_m(u, \lambda) = -\frac{1}{T} \int_0^T f(s, x_m(s, u, \lambda)) ds + \frac{1}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z] = 0,$$

$$x_{m,p+1}(t_1, u, \lambda) = z + \int_0^T f(s, x_{m-1,p+1}(s, u, \lambda)) ds - \frac{t_1}{T} \int_0^T f(s, x_{m-1,p+1}(s, u, \lambda)) ds + \frac{t_1}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z] = d_{p+1},$$

$$\dots$$

$$x_{m,p+q}(t_1, u, \lambda) = z + \int_0^T f(s, x_{m-1,p+q}(s, u, \lambda)) ds - \frac{t_1}{T} \int_0^T f(s, x_{m-1,p+q}(s, u, \lambda)) ds + \frac{t_1}{T} [d(\lambda) - (A + I_n)z] = d_{p+q},$$

звідки можна отримати наближені значення невідомих параметрів $u^* \approx \text{col}(u_{m1}, \dots, u_{m,n-p})$, $\lambda^* \approx \text{col}(\lambda_{m1}, \dots, \lambda_{m,p+q})$ та m -тє наближення до точного розв'язку вихідної триточкової нелінійної крайової задачі $x^*(t, u^*, \lambda^*) \approx x_m(t, u_m, \lambda_m)$.

Список використаних джерел

1. Самоїленко А. М., Ронто М. Й., Численно-аналитические методы в теории краевых задач обыкновенных дифференциальных уравнений. — Київ: Наукова думка, 1992. — 279 с.
2. Ronto M., Samoilenko A. M. Numerical analytic methods in the theory of boundary value problems. — River Edge, NJ: World Scientific Publishing Co. Inc, 2000. — 455 p.
3. Ronto M. and Savina T. V. Numerical-analytic method for three-point boundary-value problems // Math. Zh. — 1994. — No. 3. — P. 393–403.
4. Ronto M., Tegen R. M. Successive approximation method for investigating three point boundary value problem with singular matrices // Mathematica Pannonica. — 1994. — 5, 1. — P. 15–28.
5. Ronto M. On non-linear boundary value problems containing parameters // Arch. Math. (Brno). — 2000. — 36. — P. 585–593.

Надійшла до редколегії 02.06.2009

УДК 539.3

Катерина М. Некислих, аспірант,
Володимир І. Острик, д. ф.-м. н., доцент

Розклинювання пружного клина

Розглянуто задачу про розклинювання пружного клина жорсткою платівкою уздовж крайової тріщини, яка знаходиться на осі симетрії клина і виходить до його вершини. Із застосуванням метода Вінера – Гопфа отримано аналітичний розв'язок задачі. Знайдено коефіцієнт інтенсивності напружень, розподіл напружень на продовженні тріщини та в області контакту.

Ключові слова: розклинювання, клин, тріщина, напруження, факторизація.

*E-mail: ostrik_v@rambler.ru

Статтю представив член редколегії д. ф.-м. н., проф. Мелешко В. В.

1 Вступ

Серед задач механіки руйнування певний інтерес представляють задачі про розклинювання пружних тіл уздовж внутрішніх або крайових тріщин при зануренні в них жорстких клинів або платівок [1, 2, 4-6, 8, 9]. Розклинювання пружної півплощини жорстким клином уздовж крайової тріщини, перпендикулярної до межі півплощини, досліджено в роботах [2, 5] асимптотичним методом. В [6] знайдено наближений розв'язок цієї задачі шляхом спеціальної апроксимації ядра сингулярного інтегрального рівняння. В роботі [9] побудовано асимптотичний розв'язок задачі про розклинювання пружного клина жорсткою платівкою сталої товщини. Огляд інших робіт, в яких розглядається розклинювання пружної площини, смуги та півсмуги, міститься у довіднику [8].

Нижче задача про розклинювання пружного клина уздовж крайової тріщини жорсткою платівкою сталої товщини, яка досліджувалася у роботах [1, 9] асимптотичним методом, розв'язана аналітично із застосуванням метода Вінера – Гопфа і підходу роботи [3]. З'ясовано, що для пружного клина з кутом піврозхилу α , меншим $\pi/2$, відбувається відставання берегів тріщини поблизу вершини клина від поверхонь жорсткої платівки, що не передбачено постановкою задачі. Тобто у випадку $\alpha < \pi/2$ постановка задачі потребує уточнення, а отриманий розв'язок у спрощеній постановці слід вважати невірним. Останній висновок, який не було зроблено у попередніх дослідженнях [1, 9], впливає із аналізу контактних напружень між платівкою і пружним клином. Якщо ж пружний клин є півплощиною ($\alpha = \pi/2$),

K. M. Nekislykh, PhD student,
V. I. Ostriak, D. Sci. (Phys.-Math.), Associate Prof.

Splitting of Elastic Wedge

The problem of elastic wedge splitting along its edge crack by a hard plate is solved. Using the Wiener – Hopf method, an analytical solution of the problem was obtained. The stress intensity factor, distribution of tensions on continuation of crack and distribution of tensions in contact domain are found.

Key Words: splitting, wedge, crack, tensions, factorization.

або його кут піврозхилу перевищує $\pi/2$, має місце повний контакт берегів тріщини і платівки, як і передбачено постановкою задачі.

2 Постановка задачі

Розглянемо пружний клин $0 \leq r < \infty$, $-\alpha \leq \theta \leq \alpha$, який розклинюється жорсткою платівкою товщиною $2h$ уздовж тріщини $0 \leq r < l$, $\theta = 0$ (рис. 1). Глибина занурення платівки l_1 ($l_1 < l$). Вважаємо, що уздовж відрізка $0 \leq r \leq l_1$ береги тріщини $\theta = \pm\alpha$ контактують з поверхнею платівки. Сили тертя в області контакту не враховуємо. Грані пружного клина $0 \leq r < \infty$, $\theta = \pm\alpha$ та береги тріщини поза областю контакту ($l_1 < r < l$) вільні від напружень.

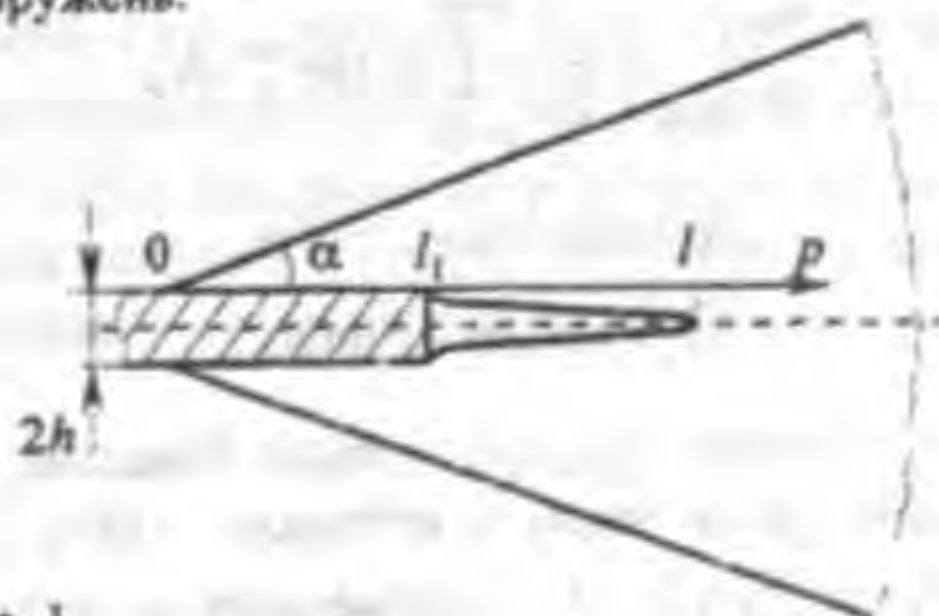


Рис. 1

Оскільки напружено-деформований стан клина симетричний відносно його осі, обмежимося розглядом верхнього півклина $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \alpha$. Нехай у процесі деформації початок полярної системи координат залишається зв'язаним з вершиною півклину, а полярна вісь r – паралельною осі симетрії клина. Таке введення системи коор-

динат обумовлено вимогою обернення в нуль нормальних переміщень у вершині клина, необхідною при використанні інтегрального перетворення Мелліна.

Змішані крайові умови на межі верхнього півклина запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} u_{\theta}|_{\theta=0} &= 0 \quad (0 \leq r \leq l_1), \quad \sigma_{\theta}|_{\theta=0} = 0 \quad (l_1 < r < l), \\ u_{\theta}|_{\theta=0} &= -h \quad (l \leq r < \infty), \quad \tau_{r\theta}|_{\theta=0} = 0 \quad (0 \leq r < \infty), \\ \sigma_{\theta}|_{\theta=\alpha} &= 0, \quad \tau_{r\theta}|_{\theta=\alpha} = 0 \quad (0 \leq r < \infty). \end{aligned} \quad (1)$$

3 Інтегральне рівняння задачі

Введемо невідому функцію радіальної похідної нормальних переміщень верхнього берега тріщини

$$g(r) = \frac{\partial u_{\theta}}{\partial r} \Big|_{\theta=0} \quad (l_1 < r < l). \quad (2)$$

Розв'язок крайової задачі для півклина $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \alpha$ з крайовими умовами

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{\theta}}{\partial r} \Big|_{\theta=0} &= \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq l_1, \quad l \leq r < \infty, \\ g(r), & l_1 < r < l, \end{cases} \\ \tau_{r\theta}|_{\theta=0} &= 0 \quad (0 \leq r < \infty), \\ \sigma_{\theta}|_{\theta=\alpha} &= 0, \quad \tau_{r\theta}|_{\theta=\alpha} = 0 \quad (0 \leq r < \infty) \end{aligned} \quad (3)$$

отримасмо із застосуванням інтегрального перетворення Мелліна. Маємо

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{\theta}}{2G} \Big|_{\theta=0} &= -\frac{m}{m-1} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\lambda(s)}{\Delta(s)} a(s) r^{-s-1} ds, \\ \frac{\partial u_{\theta}}{\partial r} \Big|_{\theta=0} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} a(s) r^{-s-1} ds, \\ \lambda(s) &= \sin^2 s\alpha - s^2 \sin^2 \alpha, \\ \Delta(s) &= \sin 2s\alpha + s \sin 2\alpha, \end{aligned} \quad (4)$$

де G — модуль зсуву, m — число Пуассона, c — будь-яке дійсне число з інтервалу $-\operatorname{Re} \delta_1 < c < \operatorname{Re} \delta_1$, де δ_1 ($\delta_1 \neq 1$) — найменший за модулем корінь рівняння $\Delta(s) = 0$ із півплощини $\operatorname{Re} s > 0$ ($\operatorname{Re} \delta_1 > 1$ при $\alpha \leq \pi/2$; $0 < \delta_1 < 1$, $\operatorname{Im} \delta_1 = 0$ при $\pi/2 < \alpha < \pi$).

Застосовуючи до другої рівності (4) обернене перетворення Мелліна, з урахуванням першої умови (3) знаходимо

$$a(s) = \int_{l_1}^l g(y) y^s dy. \quad (5)$$

Підставивши останній вираз у перше співвідношення (4) і виконавши заміни

$$s = -it; \quad r = le^{-\xi}, \quad y = le^{-\eta};$$

$$g(le^{-\eta})e^{-\eta} = \varphi(\eta) \quad (0 < \eta < a), \quad a = \ln(l/l_1), \quad (6)$$

будемо мати

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{\theta}}{2G} \Big|_{\theta=0} &= -\frac{m}{m-1} e^{\xi} \int_0^a k(\xi - \eta) \varphi(\eta) d\eta, \\ k(\xi - \eta) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) e^{-\tau(\xi - \eta)} d\tau, \\ K(\tau) &= \frac{\lambda(-it)}{\Delta(-it)}. \end{aligned} \quad (7)$$

При цьому, зважаючи на відсутність полюсів функції $K(\tau)$ у смугі $|\operatorname{Im} \tau| < \operatorname{Re} \delta_1$, контур інтегрування $-\infty + ic < \tau < \infty + ic$ зміщено на дійсну вісь ($c = 0$).

Задовольнивши другу крайову умову (1) за допомогою виразів (7), отримуємо інтегральне рівняння задачі відносно функції $\varphi(\eta)$:

$$\int_0^a k(\xi - \eta) \varphi(\eta) d\eta = 0 \quad (0 < \xi < a). \quad (8)$$

Завдяки умовам парності $\lambda(s) \equiv \lambda(-s)$, $\Delta(s) \equiv -\Delta(-s)$, $K(\tau) \equiv -K(-\tau)$, $k(\xi - \eta) = -k(\eta - \xi)$ заключаємо, що інтегральне рівняння (8) має симетричний розв'язок

$$\varphi(\eta) \equiv \varphi(a - \eta) \quad (0 < \eta < a). \quad (9)$$

Можливість антисиметричності розв'язку ($\varphi(\eta) \equiv -\varphi(a - \eta)$, $0 < \eta < a$) виключається, оскільки нормальні переміщення верхнього берега тріщини монотонно спадають на інтервалі $l_1 < r < l$, тобто $\varphi(\eta) < 0$ ($0 < \eta < a$).

4 Розв'язання інтегрального рівняння

Інтегральне рівняння (8) розв'яжемо зведенням його до нескінченної системи алгебричних рівнянь. Приймаючи $\varphi(\eta) = 0$ при $\eta < 0$, $\eta > a$, розповсюдимо інтегральне рівняння (8) на всю числову вісь і застосуємо до нього інтегральне перетворення Фур'є.

Відносно невідомих функцій

$$\Phi^+(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^a \varphi(\xi) e^{iz\xi} d\xi,$$

$$\Phi^-(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^0 \varphi(\xi + a) e^{iz\xi} d\xi,$$

$$\Psi^+(z) = -\frac{e^{-iza}}{\sqrt{2\pi}} \int_0^a e^{iz\xi} d\xi \int_0^a k(\xi - \eta) \varphi(\eta) d\eta,$$

$$\Psi^-(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{iz\xi} d\xi \int_0^a k(\xi - \eta) \varphi(\eta) d\eta, \quad (10)$$

аналітичних відповідно у півплощинах $\text{Im} z > c^+$, $\text{Im} z < c^-$ ($c^+ < 0$, $c^- > 0$) комплексної площини, приходимо до системи функціональних рівнянь Вінера – Гопфа [7]

$$K(z)\Phi^+(z) + e^{iza}\Psi^+(z) - \Psi^-(z) = 0,$$

$$\Phi^+(z) = e^{iza}\Phi^-(z) \quad (c^+ < \text{Im} z < c^-). \quad (11)$$

Крім того, з умови (9) маємо

$$\Phi^+(z) = \Phi^-(z), \quad \Psi^+(z) = \Psi^-(z). \quad (12)$$

Для розв'язання системи функціональних рівнянь (11) факторизуємо її коефіцієнт $K(z)$ у вигляді

$$K(z)/z = K^+(z)K^-(z), \quad (13)$$

де $K^\pm(z)$ – відмінні від нуля функції, аналітичні у верхній ($\text{Im} z > c^+$) та нижній ($\text{Im} z < c^-$) півплощинах відповідно. Факторизацію (13) здійснюємо у нескінченних добутках

$$K^+(z) = K'(0) \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{is_n}\right) \left(1 + \frac{z}{i\delta_n}\right)^{-1},$$

$$K^-(z) = \frac{K^+(-z)}{K'(0)}, \quad K'(0) = -i \frac{\alpha^2 - \sin^2 \alpha}{2\alpha + \sin 2\alpha}, \quad (14)$$

де s_n, δ_n ($n = 1, 2, \dots$; $s_1 = 1$, якщо $\alpha \neq \pi/2$) – корені рівнянь $\lambda(s) = 0$ і $\Delta(s) = 0$ відповідно із півплощини $\text{Re} s > 0$.

Перше функціональне рівняння (11) з урахуванням рівності (13) залишимо у вигляді

$$zK^+(z)\Phi^+(z) + \frac{e^{iza}}{K^-(z)}\Psi^+(z) - \frac{\Psi^-(z)}{K^-(z)} = 0. \quad (15)$$

Другу складову лівої частини рівняння (15) подамо у вигляді різниці аналітичних у верхній та нижній півплощинах функцій

$$\frac{e^{iza}}{K^-(z)}\Psi^+(z) = \chi^+(z) - \chi^-(z). \quad (16)$$

Розкладаючи відповідні інтеграли типу Коші [7] в ряд за теорією лишків, отримуємо

$$\chi^-(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha_k}{s_k + iz} \Psi^+(is_k) e^{-is_k a},$$

$$\alpha_k = \frac{is_k \Delta(s_k) K^+(is_k)}{\lambda'(s_k)} \quad (k = 1, 2, \dots). \quad (17)$$

В результаті проведених перетворень маємо

$$zK^+(z)\Phi^+(z) + \chi^+(z) = \Psi^-(z)/K^-(z) + \chi^-(z). \quad (18)$$

Обидві частини рівняння (18) аналітично продовжують одна одну на всю комплексну площину і, отже, є довільною цілою функцією. З умов на нескінченності

$$K^+(z) \sim -i \sqrt{\frac{K'(0)}{2z}}, \quad \Phi^+(z) = o(1)$$

$$\chi^+(z) = O(z^{-1}), \quad |z| \rightarrow \infty \quad (19)$$

виливає, що вказана ціла функція є константа, яку позначимо C .

Таким чином, з (18) знаходимо

$$\Phi^+(z) = \frac{C - \chi^+(z)}{zK^+(z)},$$

$$\Psi^-(z) = K^-(z)[C - \chi^-(z)], \quad (20)$$

Із другої рівності (20) і рівностей (12), (16) випливає співвідношення $C = \chi^+(0)$, яке знищує полюс у точці $z = 0$ у першому виразі (20) і забезпечує аналітичність функції $\Phi^+(z)$ у смугі $c^+ < \text{Im} z < c^-$.

Рівність для визначення сталої C випливає з умови відсутності стрибка переміщень у вершині тріщини ($r = l$) і заданого стрибка в точці $r = l_1$:

$$\int_{l_1}^l \frac{\partial u_3}{\partial r} \bigg|_{\theta=0} dr = -h, \quad (21)$$

яка завдяки (2), (6), (10) еквівалентна рівності $\Phi^+(0) = -h/(\sqrt{2\pi}l)$. Звідси, враховуючи перше співвідношення (20) і умову $C = \chi^+(0)$, отримуємо

$$\frac{d}{dz} \chi^+(z) \bigg|_{z=0} = \frac{K'(0)}{\sqrt{2\pi}l} h, \quad (22)$$

що еквівалентно рівності

$$C = \chi^-(0) - \frac{2}{\gamma} K'(0) \frac{d}{dz} \chi^-(z) \Big|_{z=0} + \frac{1}{\gamma} \frac{[K'(0)]^2}{\sqrt{2\pi} l} h, \\ \gamma = iK'(0)(a + 2\gamma_0), \quad \gamma_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\delta_n} - \frac{1}{s_n} \right). \quad (23)$$

Позначимо

$$C_0 = \frac{2}{\gamma} \frac{d}{dz} \chi^-(z) \Big|_{z=0} - \frac{1}{\gamma} \frac{K'(0)}{\sqrt{2\pi} l} h. \quad (24)$$

Тоді

$$C = \chi^-(0) - K'(0)C_0. \quad (25)$$

Співвідношення (12), (20), (24), (25) не визначають повністю функції $\Phi^\pm(z)$, $\Psi^\pm(z)$, а виражають їх через невідомі значення $\Psi^+(is_k)$ ($k=1,2,\dots$) із (17). Для визначення останніх у другій рівності (20) візьмемо $z = -is_n$ ($n=1,2,\dots$) і врахуємо друге співвідношення (12). Отримаємо нескінченну систему алгебричних рівнянь

$$z_n + \beta_n \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k}{s_k + s_n} z_k \lambda^k = g_n \quad (n=1,2,\dots) \quad (26)$$

відносно невідомих

$$z_k = \Psi^-(is_k)/C_0 \quad (k=1,2,\dots), \quad (27)$$

у якій

$$\lambda = e^{-\pi\omega/(2\alpha)} = (l_1/l)^{\pi/(2\alpha)}, \quad \tilde{\alpha}_k = \frac{\alpha_k}{s_k} e^{(\pi\omega/(2\alpha) - s_k)l_1}$$

$$\beta_n = -s_n K^-(is_n),$$

$$g_n = -K^+(is_n), \quad (k, n=1,2,\dots). \quad (28)$$

Розв'язок системи рівнянь (26) відшукуємо у вигляді

$$z_k = \sum_{m=0}^{\infty} \xi_{km} \lambda^m \quad (k=1,2,\dots). \quad (29)$$

Підставляючи (29) в (26), методом невизначених коефіцієнтів знаходимо

$$\xi_{n0} = g_n \quad (n=1,2,\dots) \quad (30)$$

і отримуємо рекурентні співвідношення

$$\xi_{nm} = -\beta_n \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k}{s_k + s_n} \xi_{k, m-k} \quad (n, m=1,2,\dots) \quad (31)$$

для визначення коефіцієнтів ξ_{nm} розвинень (29).

Із (24) знаходимо

$$C_0 = \bar{C}_0 \frac{h}{l},$$

$$\bar{C}_0 = -\frac{1}{\gamma} \frac{K'(0)}{\sqrt{2\pi}} \left(1 + \frac{2i}{\gamma} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k}{s_k} z_k \lambda^k \right)^{-1}. \quad (32)$$

Оберненим перетворенням Фур'є першої рівності (10) з урахуванням (20) знаходимо розв'язок інтегрального рівняння (8):

$$\varphi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C - \chi^+(\tau)}{\tau K^+(\tau)} e^{-i\tau\xi} d\tau. \quad (33)$$

5 Розподіл напружень і переміщень на лінії симетрії пружного клина

Із (7), враховуючи (10), знаходимо

$$\frac{\sigma_g}{2G} \Big|_{g=0} = -\frac{m}{m-1} e^{\xi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) \Phi^+(\tau) e^{-i\tau\xi} d\tau. \quad (34)$$

На підставі рівностей (9), (12) із співвідношень (34), (2), (6) для функцій нормальних напружень $\sigma(r) = \sigma_g|_{g=0}$ і колових переміщень $u(r) = u_g|_{g=0}$ ($0 < r < \infty$) на лінії симетрії клина маємо тотожності

$$r\sigma(r) = -\frac{l_1}{r} \sigma\left(\frac{l_1}{r}\right), \quad u(r) = h - u\left(\frac{l_1}{r}\right), \quad (35)$$

які показують, що напруження $\sigma_g|_{g=0}$, помножені на радіальну координату r , і переміщення $u_g|_{g=0}$ антисиметричні при перетворенні інверсії відносно точки $r = \sqrt{l_1}$.

Перетворивши інтеграл із (34) в ряд за теорією лишків при $\xi < 0$ з використанням рівностей (20), (16), (27) та заміни (6), отримаємо нормальні напруження на лінії продовження тріщини

$$\frac{\sigma_g}{2G} \Big|_{g=0} = -\frac{m}{m-1} \sqrt{2\pi} \bar{C}_0 \frac{h}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda(\delta_n)}{i\Delta'(\delta_n) K^+(i\delta_n)} \times \\ \times \left(\frac{K'(0)}{\delta_n} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{\alpha}_k}{s_k - \delta_n} z_k \lambda^k \right) \left(\frac{r}{l} \right)^{-\delta_n-1} \quad (r > l). \quad (36)$$

Застосовуючи до рівності (34) обернене перетворення Фур'є і враховуючи другу крайову умову (і), знаходимо

$$K(z) \Phi^+(z) = -\frac{m-1}{m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \times \\ \times \left[\left(\int_{-\infty}^0 + \int_0^{\infty} \right) e^{-\xi} \frac{\sigma_g}{2G} \Big|_{g=0} e^{i\tau\xi} d\xi \right]. \quad (37)$$

Звідси, з використанням розв'язку (20), оцінок (19), а також леми Ватсона [10] отримуємо поведінку нормальних напружень поблизу вершини тріщини

$$\sigma_{\theta}|_{\theta=0} \sim \frac{2Gm}{m-1} \frac{\tilde{C}_0 h}{\sqrt{iK'(0)l(r-l)}} \times \left(K'(0) - \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{\alpha}_k z_k \lambda^k \right), \quad r \rightarrow l+0. \quad (38)$$

і визначаємо коефіцієнт інтенсивності напружень

$$K_1 = \lim_{r \rightarrow l+0} \sqrt{2\pi(r-l)} \sigma_{\theta}|_{\theta=0} = \frac{2Gm}{m-1} \frac{\tilde{C}_0 \sqrt{2\pi} h}{\sqrt{iK'(0)l}} \left(K'(0) - \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{\alpha}_k z_k \lambda^k \right). \quad (39)$$

Нормальні напруження $\sigma_{\theta}|_{\theta=0}$ в області контакту $0 < r < l_1$ виражаються за допомогою першої рівності (35) через нормальні напруження (36) на лінії продовження тріщини. Контактні напруження обертаються в нуль у вершині клина, якщо $\alpha \leq \pi/2$ ($\text{Re} \delta_1 > 1$) і необмежені при $r \rightarrow 0$, якщо $\pi/2 < \alpha < \pi$ ($0 < \delta_1 < 1$). Із (35) і (38) заключаємо, що на краю $r = l_1$ області контакту нормальні напруження необмежені з кореневою особливістю.

Розвиваючи інтеграл із (33) за теорією лишків в ряд і враховуючи рівності (2), (6), після інтегрування отримуємо нормальні переміщення верхнього берега тріщини ($l_1 < r < l$)

$$u_{\theta}|_{\theta=0} = \frac{h}{2} + \sqrt{2\pi} i \tilde{C}_0 h \left\{ \ln \frac{r}{\sqrt{l l_1}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i \Delta(s_n)}{s_n \lambda'(s_n)} z_n \left[\left(\frac{r}{l_1} \right)^{-s_n} - \left(\frac{r}{l} \right)^{s_n} \right] \right\} \quad (l_1 < r < l). \quad (40)$$

При цьому функція нормальних переміщень $u(r) = u_{\theta}|_{\theta=0}$ задовольняє другу тотожність (35).

6 Результати обчислень

Безрозмірні напруження $\bar{\sigma} = \sigma_{\theta}|_{\theta=0} l / (2Gh)$ обчислені за різних кутів α піврозхилу пружного клина при відносному розмірі області контакту (глибини занурення жорсткої платівки) $l_1 = l/2$.

На рис. 2, 3 зображено розподіл нормальних напружень в області контакту $0 < r < l_1$. Криві 1-4 на рис. 2 відповідають значенням кута $\alpha = \pi/4$, $3\pi/10$, $\pi/3$, $2\pi/5$, криві 1-3 на рис. 3 – значенням $\alpha = \pi/2$, $2\pi/3$, $5\pi/6$. Як видно з рис. 2, для пружного клина з півкутом $\alpha < \pi/2$, на частині області контакту $0 < r < \delta$ ($0 < \delta < l_1$), прилеглої до вершини клина, контактні напруження стають додатними, що вказує на часткове відставання берегів тріщини від поверхні жорсткої платівки. У цьому

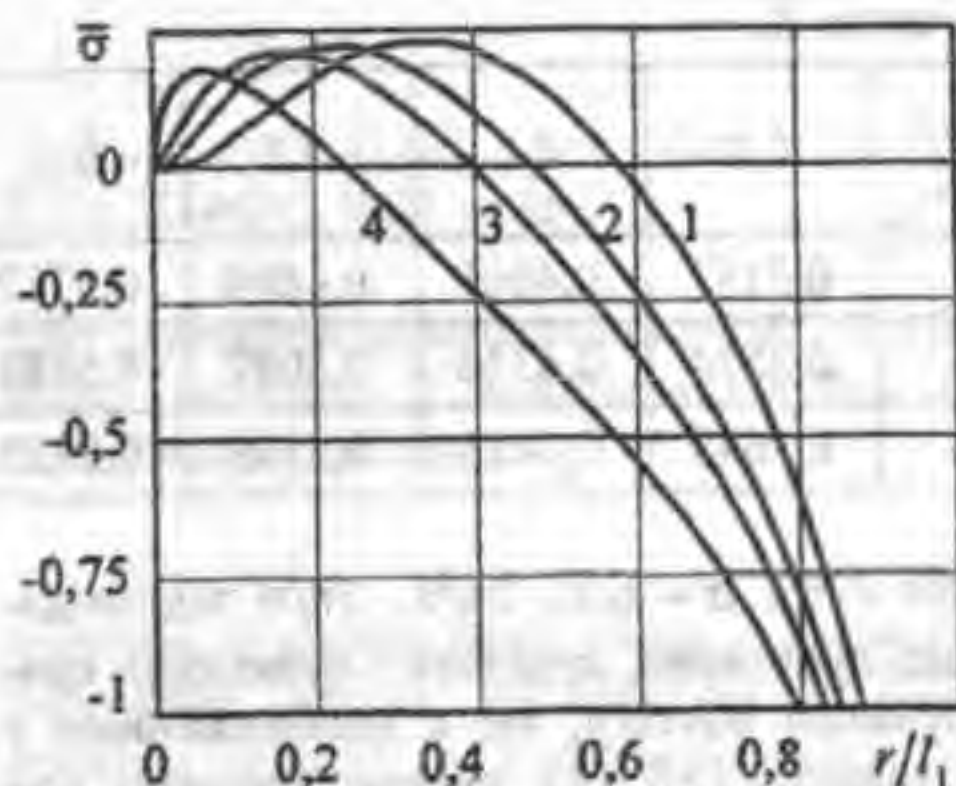


Рис. 2

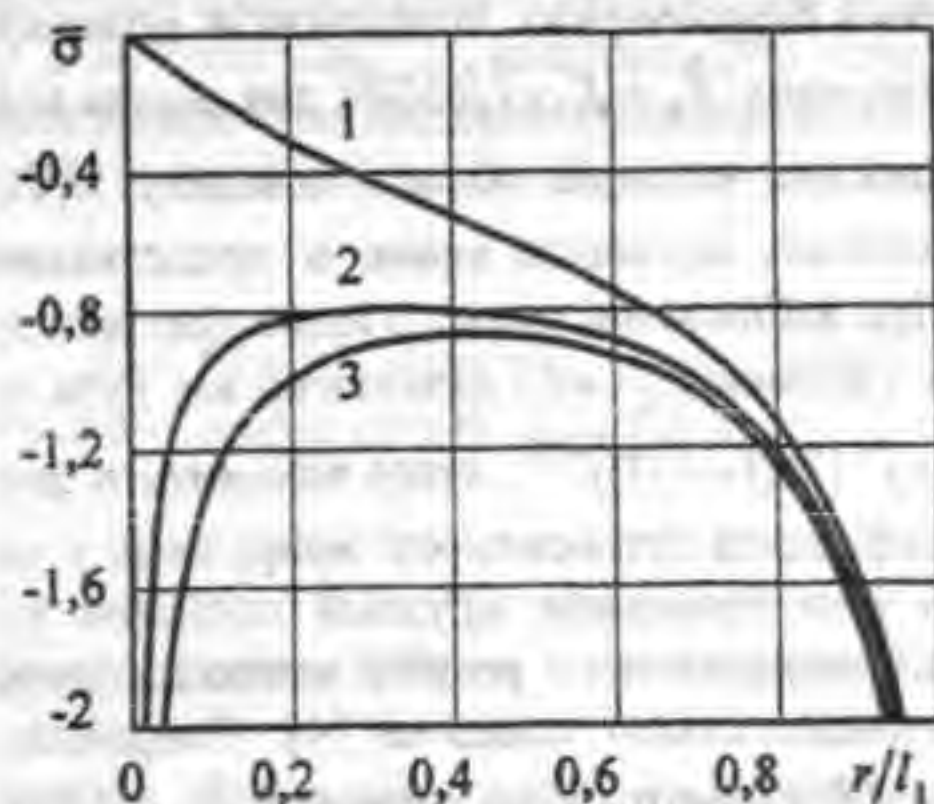


Рис. 3

разі (при $\alpha < \pi/2$) побудований тут розв'язок є невірним, і для отримання фізично змістовного розв'язку необхідно переглянути постановку задачі (при цьому друга крайова умова із (1) розповсюджується і на зону відставання $0 < r < \delta$). Якщо ж $\alpha \geq \pi/2$ (рис. 3), нормальні напруження є напруженнями стиску ($\bar{\sigma} < 0$) у всій області контакту $0 < r < l_1$, тобто відставання не має місця і знайдений розв'язок задачі є фізично змістовним.

Розподіл нормальних напружень на лінії продовження тріщини за її вершину показано на рис. 4.

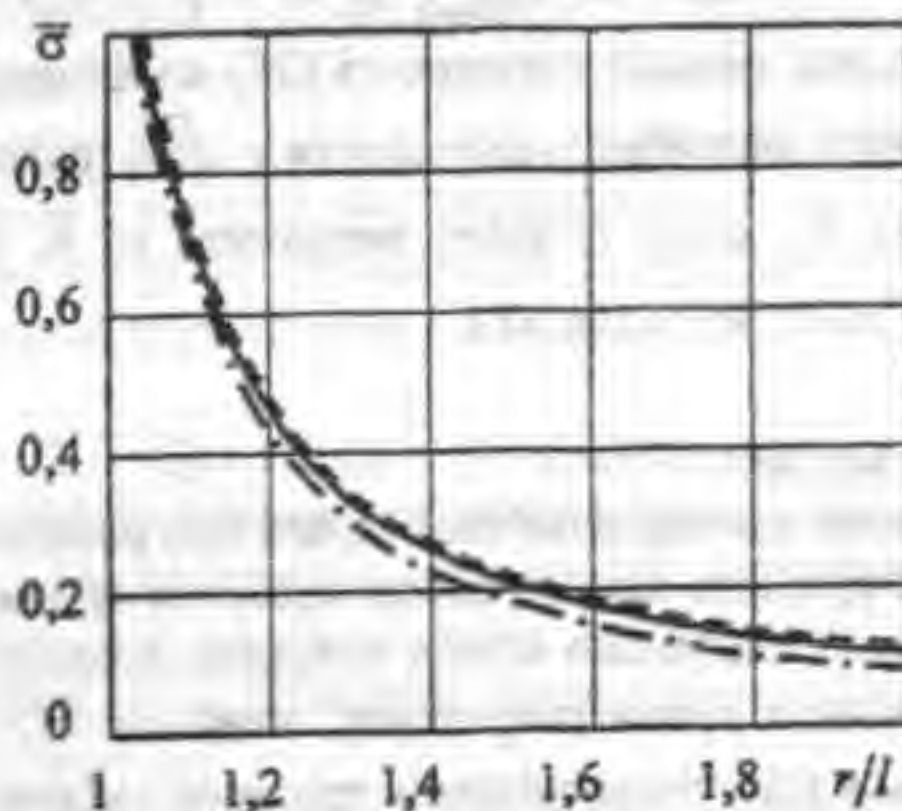


Рис. 4

Значення $\bar{K}_1$

Таблиця

$\alpha \backslash l_1/l$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$\pi/2$	0,3142	0,4041	0,4864	0,5717	0,6680	0,7862	0,9468	1,2001	1,7480
$2\pi/3$	0,3534	0,4346	0,5092	0,5882	0,6795	0,7938	0,9514	1,2033	1,7488
$5\pi/6$	0,3649	0,4426	0,5149	0,5922	0,6822	0,7955	0,9525	1,2040	1,7498

Значенням кутів $\alpha = \pi/2, 2\pi/3, 5\pi/6$ відповідають штрих-пунктирна, суцільна і пунктирна криві. Напруження розтягу, які є необмеженими у вершині тріщини ($r/l=1$), швидко згасають при віддаленні від вершини.

Значення безрозмірних коефіцієнтів інтенсивності напружень $\bar{K}_1 = K_1 \sqrt{l}/(2Gh)$ для різних значень відносних розмірів області контакту l_1/l і кута піврозхилу пружного клина α представлені у табл. При наближенні правого краю платівки до вершини тріщини ($l_1 \rightarrow l$) незалежно від кута α $\bar{K}_1 \sim (1-\nu)^{-1} (2\pi(1-l_1/l))^{-1/2}$, якщо виходити із значення коефіцієнта інтенсивності напружень у задачі про розклинювання пружної площини уздовж напівнескінченного розрізу напівнескінченною платівкою сталої товщини [4]. Наприклад, при $l_1/l = 0,9$ асимптотичне значення $\bar{K}_1$ є 1,802, що на 3,4% перевищує значення $\bar{K}_1$, наведені в останньому стовпчику таблиці.

7 Зауваження

Побудований розв'язок безпосередньо переноситься на задачу про розклинювання пружного клина уздовж напівнескінченної тріщини $l_1 < r < \infty$ платівкою $l < r < \infty$ ($l_1 < l$). При цьому знак при h у першій крайовій умові (1), а отже, і у розв'язку, слід змінити на протилежний. Від такої заміни напруження (36) і переміщення (40) змінять знак; крім того переміщення $u_3|_{z=0}$ ($l_1 < r < l$) зростає на h . Завдяки першій тотожності (35) коефіцієнт інтенсивності напружень (39) зростає у $\sqrt{l/l_1}$ разів, а значення $\bar{K}_1$, якщо їх тепер визначити як $\bar{K}_1 = K_1 \sqrt{l_1}/(2Gh)$, не зміняться.

8 Висновки

Знайдений точний розв'язок задачі про розклинювання пружного клина уздовж крайової тріщини жорсткою платівкою сталої товщини показує, що для клина з кутом піврозхилу, меншим $\pi/2$, відбувається відставання берегів тріщини поблизу

вершини клина від поверхонь жорсткої платівки, що не передбачено постановкою задачі, і отриманий розв'язок втрачає зміст. Якщо ж пружний клин є півплощиною, або його кут піврозхилу перевищує $\pi/2$, має місце повний контакт берегів тріщини і платівки, і розв'язок задачі є фізично обґрунтованим.

Список використаних джерел

1. Александров В. М., Коваленко Е. В. Задачи механики сплошных сред со смешанными граничными условиями. – М.: Наука, 1986. – 334 с.
2. Александров В. М., Сметанин Б. И., Соболь Б. В. Тонкие концентраторы напряжений в упругих телах. – М.: Физматлит, 1993. – 224 с.
3. Антипов Ю. А. Точное решение задачи о вдавлении кольцевого штампа в полупространство // Докл. АН УССР. Сер. А. Физ.-мат. и техн. науки. – 1987. – № 7. – С. 29-33.
4. Баренблатт Г. И. О равновесных трещинах, образующихся при хрупком разрушении. Прямоллинейные трещины в плоских пластинках // Прикл. математика и механика. – 1959. – 23, вып. 4.
5. Галаджева М. Р., Сирунян В. Х., Сметанин Б. И. О расклинивании упругой полуплоскости // Изв. АН АрмССР. Механика. – 1974. – 27, № 2. – С. 38-45.
6. Луцкиш Р. М. О расклинивании трещины в упругой полуплоскости // Мат. методы и физ.-мех. поля. – Киев, 1979. – № 10. – С. 58-62.
7. Нобл Б. Метод Винера – Хопфа. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962. – 280 с.
8. Саврук М. П. Коэффициенты интенсивности напряжений в телах с трещинами // Механика разрушения и прочность материалов / Справ. пособие под ред. В. В. Панасюка. – Киев: Наук. думка, 1988. – 2. – 620 с.
9. Сметанин Б. И. О расклинивании упругого бесконечного клина // Прикл. математика и механика. – 1969. – 33, вып. 5. – С. 935-940.
10. Федорюк М. В. Асимптотика: Интегралы и ряды. – М.: Наука, 1987. – 544 с.

Надійшла до редколегії 28.05.2009

УДК 519.9

Євген Ю. Таран*, д.ф.-м.н., професор,
Роман Я. Кондрат, аспірант

Структурно-феноменологічна реологія розведених розчинів недеформівних вільнопротічних ланцюгових макромолекул

Одержано реологічні рівняння стану розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул з ньютонівським розчинником. Як гідродинамічна модель макромолекул використовується перлинне намисто Сайто. Для виведення визначальних рівнянь напруженого стану у розчинах використано структурно-феноменологічний підхід. Одержана реологічна модель використовується для вивчення поведінки таких розчинів у простій зсувній течії.

Ключові слова: реологія, розведений розчин, ланцюгові макромолекули, проста зсувна течія

*E-mail: taran@univ.kiev.ua

Статтю представив член редколегії докт. ф.-м. н., проф. Мелешко В.В.

1 Вступ

У роботі вивчається реологічна поведінка розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул полімерів з низькомолекулярними розчинниками за допомогою структурно-феноменологічного підходу [1].

Згідно з [2] при обчисленні ефективною в'язкості розчину деформівних ланцюгових макромолекул у слабкому градієнтному потоці макромолекули у першому наближенні можуть розглядатися як недеформівні статистичні клубки, форма яких відповідає найбільш вірогідній ("замороженій") конформації деформівних молекулярних ланцюгів.

Крім того, відомі приклади макромолекул, які мають здавалось би дві суперечливі якості – вони проникні для розчинника і мають високу ступінь жорсткості. Їх конформації є незмінними не тільки при малих градієнтах швидкості розчинника. До таких макромолекул відносяться макромолекули целюлози та деяких її похідних – тринітроцелюлози, етилцелюлози [2]. Підвищена жорсткість цих макромолекул ґрунтується на специфічних взаємодіях різної природи між ланками макромолекул [2]. Ці взаємодії призводять до утворення внутрішньомолекулярної недеформівної мікроструктури.

Ye.Yu. Taran*, D.Sci. (Phys.-Math.), Professor,
R.Ya. Kondrat, PhD student

The structure-phenomenological rheology of dilute solutions of undeformable free draining chain macromolecules

Rheological equations of state of dilute solutions of undeformable chain macromolecules in Newtonian solvent are obtained. A Saito pearl necklace is used as a hydrodynamical model of macromolecules. The structure-phenomenological approach is used to obtain the constitutive equations of a stressed state in solutions. The behaviour of such solutions in a simple shearing flow is studied by the derived rheological model.

Key Words: rheology, dilute solution, chain macromolecules, simple shearing flow.

Для гідродинамічного моделювання таких вільнопротічних недеформівних ланцюгових макромолекул у даній роботі використовується недеформівний "складаний метр" – перлинне намисто Сайто [3, 4], недеформівне у градієнтному потоці розчину.

У даній статті отримані визначальні рівняння для напруження в розведеному розчині таких макромолекул у ньютонівському розчиннику та їх динаміки під дією гідродинамічних сил потоку і обертального броунівського руху. Для цього використовується структурно-феноменологічний метод [1] і результати структурної теорії в'язкості [3, 4] розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул у простій зсувній течії.

Одержані визначальні рівняння для напруження у розчині використовуються у даній роботі для вивчення реологічної поведінки розчину у простій зсувній течії.

2 Динаміка макромолекул. Зсувна в'язкість розведеного розчину

Недеформівні ланцюгові макромолекули, розведені розчини яких вивчаються у даній роботі, гідродинамічно моделюються "складаним метром" [2].

Згідно структурної теорії Сайто [3] така гідродинамічна модель складається з $2l+1$

однакових бусинок, які пронумеровані від $-n$ до n та з'єднані в жорстку систему за допомогою $2n$ векторів зв'язку однакової довжини.

При цьому недеформівні макромолекули характеризуються величинами R, P, Q ($P=Q$) [3]

$$R = \sum_{k=-n}^{+n} \rho_k^2, \quad P = \sum_{k=-n}^{+n} \eta_k^2, \quad Q = \sum_{k=-n}^{+n} \zeta_k^2,$$

де $(\rho_k, \eta_k, \zeta_k)$ – координати k -ої бусинки модельної макромолекули в системі координат $O\rho\eta\zeta$, яка зв'язана з головними осями інерції макромолекули.

Вибираючи початок лабораторної системи координат $Oxyz$ у центрі мас такої модельної макромолекули, Сайто [3] показав, що у наближенні Стокса рівняння руху недеформівного наміста у простій зсувній течії розчинника

$$v_x = Ky, \quad v_y = 0, \quad v_z = 0, \quad K = \text{const} \quad (2.1)$$

без врахування внутрішньомолекулярної гідродинамічної взаємодії та теплового ротаційного руху мають вигляд

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dt} &= \frac{K}{2} \left(1 + \frac{R-P}{R+P} \cos 2\varphi \right), \\ \frac{d\theta}{dt} &= \frac{K}{4} \frac{R-P}{R+P} \sin 2\varphi \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (2.2)$$

У рівняннях (2.2) φ і θ – азимутальний і широтний кути (Рис. 1), які характеризують кутове положення осі $O\rho$ у системі координат $Oxyz$; t – час.

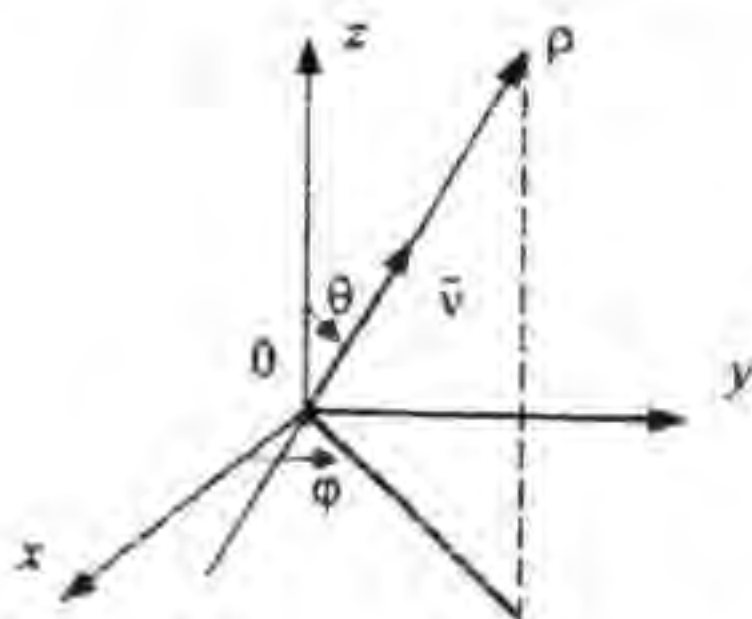


Рис. 1 Лабораторна система координат, початок якої співпадає з центром мас модельної макромолекули

Обчислення швидкості дисипації механічної енергії в одиниці об'єму розведеного розчину недеформівних ланцюгових вільнопротічних макромолекул дозволило Сайто [4] отримати

вираз для ефективної в'язкості μ_a^+ такого розчину в течії (2.1)

$$\begin{aligned} \mu_a^+ &= \mu_0 \left(1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right) + 3n_0 \xi (R-P) D_r \times \\ &\times \frac{\langle \sin 2\varphi \sin^2 \theta \rangle}{2K} + \frac{1}{4} n_0 \xi \frac{(R-P)^2}{R+P} \times \\ &\times \langle \sin^2 2\varphi \sin^4 \theta \rangle + n_0 \xi \frac{P(R-P)}{R+P} \langle \sin^2 \theta \rangle, \end{aligned} \quad (2.3)$$

де μ_0 – в'язкість розчинника; n_0 – кількість молекул розчиненого полімеру в одиниці об'єму розчину; ξ – стоксівський коефіцієнт поступального тертя у розчиннику бусинок наміста, яке моделює недеформівну макромолекулу; D_r – коефіцієнт обертальної броунівської дифузії недеформівного вільнопротічного наміста.

$$D_r = \frac{kT}{\xi(R+P)}; \quad (2.4)$$

кутові дужки $\langle \rangle$ означають осереднення у просторі можливих орієнтацій зважених недеформівних макромолекул.

У роботах [3, 4] враховується вплив обертального броунівського руху на динаміку зважених макромолекул і на ефективну в'язкість їх розведеного розчину.

Осереднення у (2.3) здійснюється [4] за допомогою функції розподілу $F(\varphi, \theta)$ орієнтацій макромолекул по кутових положеннях, яка визначається [3] з рівняння обертальної дифузії

$$\begin{aligned} D_r \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \right] = \\ = \text{div}(\bar{\omega} F), \end{aligned} \quad (2.5)$$

де $\bar{\omega} = \left\{ \frac{d\varphi}{dt}, \frac{d\theta}{dt} \right\}$ – вектор кутової швидкості макромолекули, координати якої визначаються співвідношеннями (2.2).

3 Структурно-феноменологічне моделювання реологічної поведінки розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул

Математичне моделювання градієнтних течій розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто є двомасштабним. Так, вивчення у межах структурної теорії [3, 4] динаміки окремої макромолекули, в результаті чого були отримані рівняння (2.2), є мікро-

масштабним, оскільки це вивчення виконувалося у масштабі зваженої модельної макромолекули. Одержані рівняння (2.2) показують, що динаміка недеформівного молекулярного намиста Сайто є динамікою одновісної недеформівної мікрочастинки. При

$$\frac{R-P}{R+P} = \lambda \quad (3.1)$$

рівняння обертального руху (2.2) такого намиста співпадають з відповідними рівняннями обертального руху одновісного еліпсоїда [1], який обертається під дією гідродинамічних сил у простій зсувній течії (2.1) ньютонівської несучої рідини розведеної суспензії еліпсоїдальних зважених мікрочастинок. Тут

$$\lambda = \frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1}, \quad (3.2)$$

де $p_0 = a/b$; a і b – півосі еліпсоїдальної мікрочастинки. Це означає, що орієнтація недеформівного намиста Сайто може характеризуватися одиничним вектором v_i , напрям якого співпадає з віссю Ox (Рис. 1), а його координати визначаються співвідношеннями

$$v_x = \cos\varphi \sin\theta, \quad v_y = \sin\varphi \sin\theta, \quad v_z = \cos\theta. \quad (3.3)$$

Ефективна в'язкість (2.3) розведеного розчину недеформівних ланцюгових макромолекул у ньютонівській рідині з врахуванням (3.3) може бути представлена у вигляді

$$\mu_s^+ = \mu_0 \left(1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right) + \frac{3n_0 \xi}{K} (R-P) D_r \langle v_x v_x \rangle + + n_0 \xi \frac{(R-P)^2}{R+P} \langle v_x^2 v_y^2 \rangle + n_0 \xi \frac{P(R-P)}{2(R+P)} \langle v_x^2 + v_y^2 \rangle.$$

Вивчення у роботі [3] швидкості дисипації механічної енергії при гідродинамічній взаємодії окремого молекулярного намиста з ньютонівським розчинником також є мікромасштабним. Разом з тим, така реологічна характеристика розведеного розчину модельних макромолекул Сайто, як його ефективна в'язкість μ_s^+ , є макрохарактеристикою. Вираз (2.3) для μ_s^+ було знайдено в результаті осереднення швидкості дисипації механічної енергії при гідродинамічній взаємодії з розчинником n_0 модельних макромолекул, які містяться в одиниці об'єму розведеного розчину таких макромолекул. Це

осереднення повинно виконуватися [3, 4] у тривимірному просторі x, y, z та у просторі можливих орієнтацій зважених недеформівних макромолекул Сайто. Вираз (2.3), представлений у даній роботі, є результатом просторового осереднення.

Моделювання розчинів полімерів класичним континуумом і виведення їх реологічних рівнянь методами механіки суцільного середовища не дозволяють врахувати вплив окремої макромолекули на реологічну поведінку розчину. Це є суттєвим недоліком такого – феноменологічного – методу вивчення реологічної поведінки розчинів макромолекул, оскільки саме від особливостей зважених макромолекул залежать реологічні властивості розчину в цілому.

Щоб уникнути цього недоліку, при математичному моделюванні реологічної поведінки розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул у даній роботі використано структурно-феноменологічний метод [1] виведення визначальних реологічних рівнянь, який об'єднує переваги структурного (мікромасштабного) і феноменологічного методів вивчення таких розчинів. Згідно з цим методом розчини макромолекул замість класичного континууму моделюються структурним континуумом з внутрішніми мікропараметрами, які мають описувати кінематику елементів мікроструктури розчину – зважених макромолекул – у лабораторній системі координат. Аналіз результатів мікромасштабного вивчення Сайто розведеного розчину недеформівних ланцюгових макромолекул показує, що структурний континуум, який слід використовувати для моделювання такого розчину, повинен містити єдиний внутрішній мікропараметр – одиничний вектор v_i , який характеризує орієнтацію недеформівної макромолекули.

За методикою структурно-феноменологічного вивчення розчинів полімерів [1] у ньютонівському розчиннику з в'язкістю μ_0 визначальне рівняння для тензора напруження T_{ij} у градієнтних течіях розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул слід шукати у вигляді

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu d_{ij} + \mu_1 (\langle v_i v_j \rangle - \frac{1}{3} \delta_{ij}) + \mu_2 d_{ikm} \times \times \langle v_k v_m v_i v_j \rangle + 2\mu_3 (d_{ij} \langle v_k v_k \rangle + d_{ik} \langle v_i v_j \rangle). \quad (3.4)$$

Структурно-феноменологічне рівняння, яке визначає обертальний рух зважених неде-

формівних макромолекул Сайто під дією гідродинамічних сил потоку, повинно мати вигляд [1]

$$\frac{dv_i}{dt} = \omega_{ik} v_k + \Lambda (d_{ik} v_k - d_{km} v_k v_m v_i). \quad (3.5)$$

У рівняннях (3.4), (3.5) p – тиск у ньютонівському розчиннику; d_{ij} – тензор швидкостей деформації, $d_{ij} = 1/2(v_{i,j} + v_{j,i})$, де $v_{i,j}$ – тензор градієнта швидкості, кома в індексах означає диференціювання у напрямку координатної осі, яка позначена індексом, що йде за комою; ω_{ik} – тензор вихору швидкості, $\omega_{ik} = 1/2(v_{i,k} - v_{k,i})$; δ_{ij} – символ Кронекера; $\mu, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \Lambda$ – феноменологічні сталі, які потребують визначення.

Кутові дужки $\langle \rangle$ у (3.4) означають осереднення у просторі орієнтацій вектора v_i за допомогою функції розподілу F , яка є розв'язком рівняння [1]

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial v_i} \left(F \frac{dv_i}{dt} \right) = D_r \left(\Delta F - 2v_k \frac{\partial F}{\partial v_k} + v_k v_m \frac{\partial^2 F}{\partial v_k \partial v_m} \right), \quad (3.6)$$

У (3.6) D_r – коефіцієнт обертальної броунівської дифузії недеформівної макромолекули Сайто, визначений співвідношенням (2.4); Δ – оператор Лапласа.

При структурно-феноменологічному вивченні розведеного розчину недеформівних макромолекул, який розглядається, феноменологічні сталі $\mu, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \Lambda$ визначальних рівнянь (3.4), (3.5) знаходяться за допомогою результатів структурної (мікромасштабної) теорії. Так, порівняння рівнянь, які отримуються із (3.5) для течії (2.1) з врахуванням (3.3),

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{K}{2}(1 + \Lambda \cos 2\varphi),$$

$$\frac{d\theta}{dt} = K\Lambda \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi$$

з рівняннями руху (2.2), отриманими Сайто [3], дозволяє отримати сталу Λ :

$$\Lambda = \frac{R-P}{R+P}. \quad (3.7)$$

При цьому рівняння динаміки недеформівної ланцюгової макромолекули Сайто у довільній

градієнтній течії без врахування теплового ротаційного руху набуває вигляду

$$\frac{dv_i}{dt} = \omega_{ik} v_k + \frac{R-P}{R+P} (d_{ik} v_k - d_{km} v_k v_m v_i). \quad (3.8)$$

Феноменологічні сталі μ, μ_1, μ_2, μ_3 реологічного рівняння (3.4) знаходяться з порівняння зсувної в'язкості, яка отримується за допомогою (3.4) для течії (2.1)

$$\mu_a \equiv \frac{T_{11}}{K} = \mu + \mu_1 \frac{\langle \sin 2\varphi \sin^2 \theta \rangle}{2K} + \mu_2 \frac{\langle \sin^2 2\varphi \sin^2 \theta \rangle}{4} + \mu_3 \langle \sin^2 \theta \rangle,$$

з виразом (2.3) для ефективної зсувної в'язкості розведеного розчину недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто, який знайдено в рамках структурного підходу [4]. При цьому

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_0 \left(1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right), \\ \mu_1 &= 3n_0 \xi (R-P) D_r, \\ \mu_2 &= n_0 \xi \frac{(R-P)^2}{R+P}, \\ \mu_3 &= n_0 \xi \frac{P(R-P)}{2(R+P)}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Підстановка (3.9) у (3.4) дозволяє записати остаточний вигляд тензора напружень у розведеному розчині недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто у ньютонівській рідині

$$\begin{aligned} T_{ij} &= -p\delta_{ij} + 2\mu_0 \left(1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right) d_{ij} + 3n_0 \xi (R-P) D_r \times \\ &\times \left(\langle v_i v_j \rangle - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) + n_0 \xi \frac{(R-P)^2}{R+P} d_{km} \langle v_k v_m v_i v_j \rangle + \\ &+ n_0 \xi \frac{P(R-P)}{2(R+P)} (d_{ik} \langle v_k v_j \rangle + d_{jk} \langle v_k v_i \rangle). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Осереднення у (3.10) здійснюється за допомогою функції розподілу орієнтацій макромолекул по кутових положеннях, яка визначається згідно (3.6), (3.8) як розв'язок рівняння

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \left[\omega_{ik} v_k + \frac{R-P}{R+P} (d_{ik} v_k - d_{km} v_k v_m v_i) \right] F \right\} = \\ = D_r \left(\Delta F - 2v_k \frac{\partial F}{\partial v_k} + v_k v_m \frac{\partial^2 F}{\partial v_k \partial v_m} \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

4 Реологічна поведінка розчину

Реологічне рівняння стану (3.10) дозволяє досліджувати реологічну поведінку розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто в довільних градієнтних течіях. У даному розділі це рівняння використовується для вивчення простої зсувної течії (2.1) такого розчину. Функція розподілу $F(\varphi, \theta)$ орієнтацій макромолекул по їх кутових положеннях у простій зсувній течії (2.1) розчину, яка необхідна для осереднення при обчисленні компонентів тензора T_{ij} , задовольняє рівняння (2.5), яке є частинним випадком рівняння (3.11) для течії (2.1). Підстановка компонентів вектора кутової швидкості $\vec{\omega}$ макромолекул, які визначаються рівняннями (2.2), у (2.5) перетворює його на рівняння

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) = \alpha \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{R-P}{R+P} \cos 2\varphi \right) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \frac{R-P}{R+P} \sin 2\theta \sin 2\varphi \sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \frac{R-P}{R+P} \times \right. \\ \left. \times \sin 2\varphi (3 \sin^3 \theta - 2 \sin \theta + 2) F \right], \quad (4.1)$$

де $\alpha = K/D_r$.

Розв'язок рівняння (4.1) знаходиться у вигляді подвійного ряду

$$F(\varphi, \theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{R-P}{R+P} \right)^j \left[\frac{1}{2} \sum_{n=0}^j a_{n0,j} P_{2n}(\cos \theta) + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^j \sum_{m=1}^n (a_{nm,j} \cos 2m\varphi + b_{nm,j} \sin 2m\varphi) P_{2n}^{2m}(\cos \theta) \right], \quad (4.2)$$

де $P_{2n}(\cos \theta)$ – многочлени Лежандра; $P_{2n}^{2m}(\cos \theta)$ – приєднані функції Лежандра. Для коефіцієнтів $a_{n0,j}, a_{nm,j}, b_{nm,j}$ отримані рекурентні співвідношення, які дозволяють визначити функцію розподілу F з довільним ступенем точності.

Мікрохарактеристики R, P, Q ($P=Q$) модельної макромолекули Сайто в роботі виражаються через параметри a і p_0 , які характеризують геометрію еліпсоїда обертання, гідродинамічно еквівалентного молекулярному намисту. Для цього використовуються рівності

$$\frac{R-P}{R+P} = \frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1}, \quad (4.3)$$

$$W_{rot} = W_c \quad (4.4)$$

Рівність (4.3) одержується з (3.1) з урахуванням (3.2). Рівність (4.4) випливає з припущення, що коефіцієнт обертального тертя W_{rot} недеформівної макромолекули Сайто [3] дорівнює коефіцієнту обертального тертя W_c еквівалентного еліпсоїда у ньютонівському розчиннику з в'язкістю μ_0 [2].

Виконуючи осереднення у співвідношеннях, які визначають компоненти напруження $T_{xy}, T_{xx}, T_{yy}, T_{zz}$ у простій зсувній течії (2.1) розчину, за формулою

$$\langle a(\varphi, \theta) \rangle = \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi \int_{\theta=0}^{\pi} a(\varphi, \theta) F(\varphi, \theta) \sin \theta d\theta$$

з використанням трьох перших членів розвинення (4.2) для функції розподілу $F(\varphi, \theta)$ отримаємо вирази, що визначають приведені інкремент

$$[\mu_a^+] = \frac{\mu_a^+ - \mu_a^+(0)}{\mu_0 \phi}$$

ефективної зсувної в'язкості $\mu_a \equiv T_{xy}/K$ розчину, та різниці нормальних напружень $\sigma_1 \equiv T_{yy} - T_{zz}$ і $\sigma_2 \equiv T_{xx} - T_{zz}$ у ньому

$$[\mu_a^+] = p_0^2 g(p_0) \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right)^3 \times \\ \times \left\{ \frac{18}{5(\alpha^2 + 36)} + \frac{1}{10} + \frac{1}{14} \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right) \left(\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + 36} \right) \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{1}{5} - \frac{2}{25} \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right) - \frac{1}{3} \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right) \left(\frac{\alpha^2 - 60}{\alpha^2 + 100} \right) \right] \right\}, \\ \sigma_1 = \frac{3\phi}{2\pi r^3} kT \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right) \left(\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + 36} \right) \times \\ \times \left[\frac{3}{5} + \frac{4}{21} \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right)^2 \left(\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + 100} \right) \right], \\ \sigma_2 = -\frac{2\phi}{7\pi r^3} kT \left(\frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1} \right)^3 \frac{\alpha^4}{(\alpha^2 + 36)(\alpha^2 + 100)}.$$

Тут $\mu_a^+(0) = \mu_a^+|_{\phi=0}$; ϕ – об'ємна концен-

трація макромолекул у розчині; $r = \sqrt[3]{ab^2}$. Залежності $[\mu_a^+]$, σ_1 і σ_2 від $\alpha = K/D_r$ наведені на Рис. 2, 3.

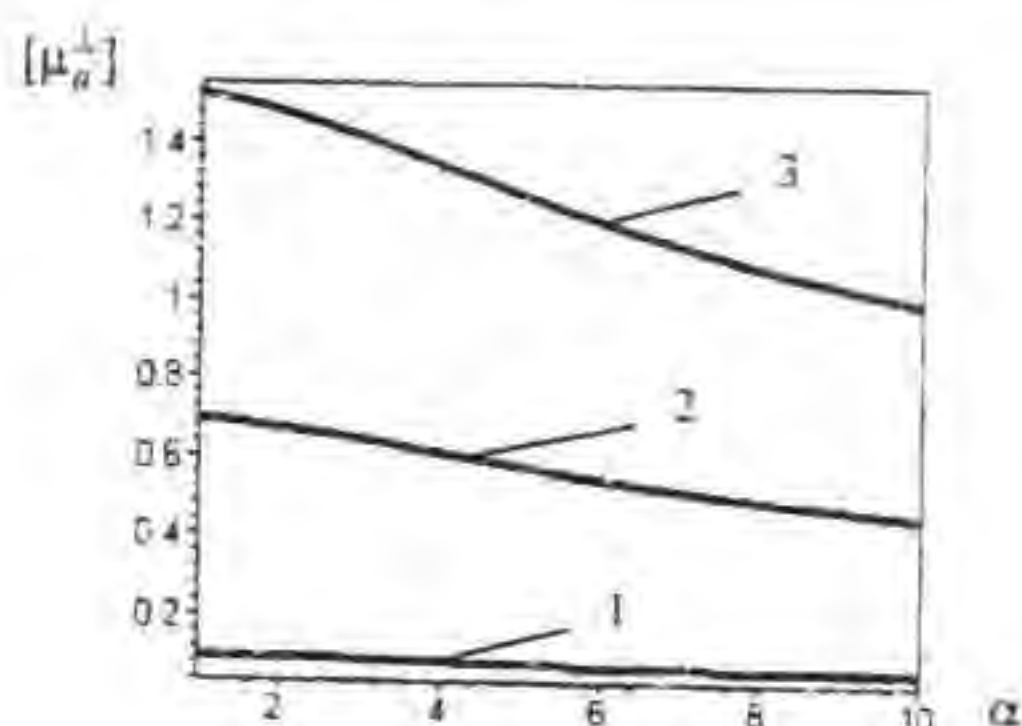


Рис. 2 Залежність $[\mu_a]$ розведеного розчину у ньютонівському розчиннику недеформівних ланцюгових макромолекул від $\alpha = K/D$; криві 1,2,3 відповідають значенням $p_0 = 2,4,6$.

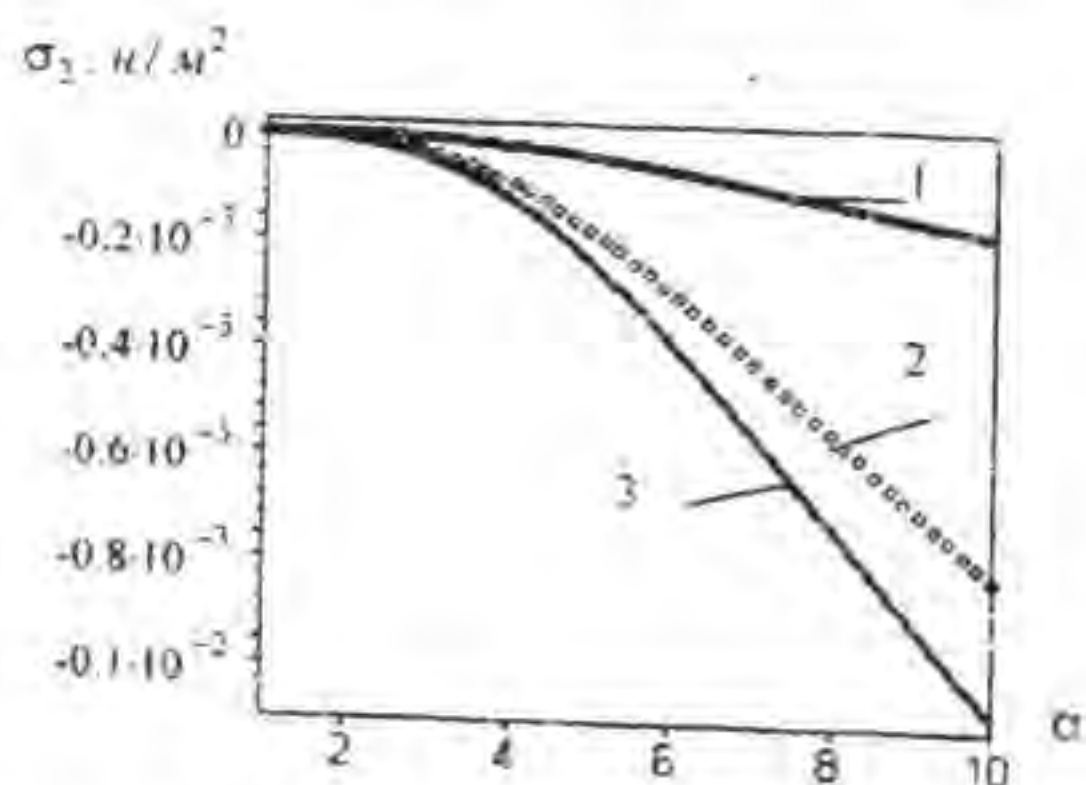
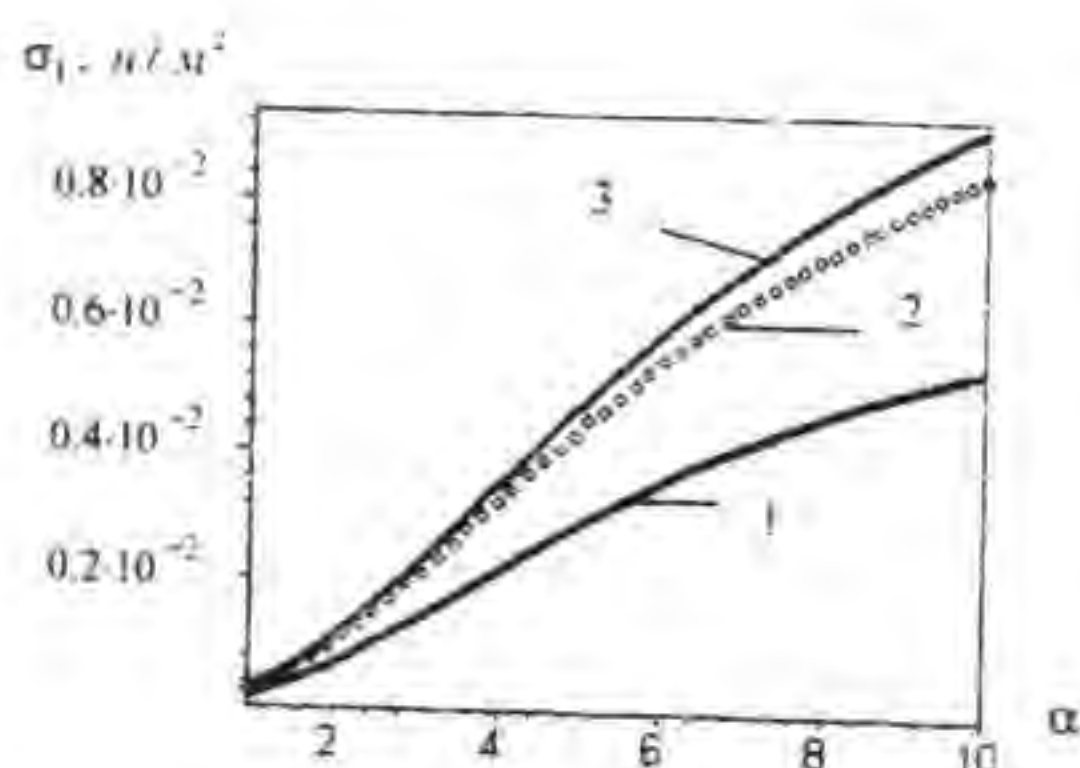


Рис. 3 Залежності σ_1 і σ_2 в розведеному розчині ($\phi = 0.01$) при абсолютній температурі $T = 293K$ недеформівних ланцюгових макромолекул з ефективним радіусом $r = 10^{-7}m$ від $\alpha = K/D$; криві 1,2,3 відповідають значенням $p_0 = 2,4,6$.

5 Висновки

Застосування структурно-феноменологічного методу дозволило отримати у даній роботі реологічну модель розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул з ньютонівськими розчинниками. Визначальні рівняння побудованої моделі використовуються для вивчення реологічної поведінки таких розчинів у простій зсувній течії.

Проведені розрахунки свідчать, що розведені розчини, які вивчаються у роботі, виявляють псевдопластичну залежність ефективної в'язкості розчину μ_a від швидкості зсуву K (Рис. 2) – вона зменшується зі збільшенням K . Обчислення показують також, що розведені розчини недеформівних ланцюгових макромолекул виявляють ефект Вайссенберга, про що свідчить наявність ненульових різниць нормальних напружень σ_1 і σ_2 (Рис. 3). Для розчинів, що розглядаються у роботі, цей ефект є результатом сумісної дії на зважені макромолекули як гідродинамічних сил, так і броунівського руху.

Одержані числові значення для $[\mu_a]$ є характерними для розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул [2]. Числові значення для σ_1 і σ_2 отримані вперше.

Список використаних джерел

1. Таран Е.Ю. Структурно-феноменологическая реология разбавленных суспензий: Дис. ... доктора физ.-мат. наук: 01.02.05. – Харьков, 1994. – 346с.
2. Цветков В.Н., Эскин В.Е., Френкель С.Я. Структура макромолекул в растворах. – М.: Наука, 1964. – 720с.
3. Saito N. Viscosity of high polymer solutions. II. Rigid skein model // J. Phys. Soc. Japan. – 1949. – 4. – P. 85 – 88.
4. Saito N. The effect of the Brownian motion on the viscosity of solutions of macromolecules II. Rigid chain molecules // J. Phys. Soc. Japan. – 1951. – 6, № 2. – P. 302 – 314.
5. Peterlin A. Über die Viskosität von verdünnten Lösungen und Suspensionen in Abhängigkeit von Teilchenform // Z. Physik. – 1938. – 111. – P. 232 – 244.

Надійшла до редколегії 28.09.09.

УДК 534.1:519.6

Олександр Ю. Швець, д.ф.-м.н., професор
Володимир А. Печерний, аспірант

**Особливості хаотичної динаміки однієї
маятникової системи при неідеальному
збудженні**

Досліджується динамічна система, утворена сферичним маятником, коливання якого збуджуються електроприводом обмеженої потужності. Для даної системи побудовані карти динамічних режимів. Встановлені основні сценарії переходу від регулярних режимів взаємодії до хаотичних. Побудовані та детально вивчені фазові портрети, перерізи та відображення Пуанкаре, розподіли інваріантної міри та спектральної густоти регулярних та хаотичних аттракторів системи.

Ключові слова: хаотичний аттрактор, карта динамічних режимів, неідеальне збудження.

Aleksandr Yu. Shvets, Dr Sci. (Phys.-Math.),
Professor

Volodymyr A. Pechernyi, PhD student

**Specificity of chaotic dynamics in some
pendulum system with non-ideal
excitation**

Dynamical system is formed by spherical pendulum which oscillations are initiated by electromotor of limited power is investigated. For such system map of dynamical regimes was constructed. Main scenarios of transition from regular regimes to chaotic ones were established. Phase portraits, Poincaré's sections, distributions of invariant measure and spectral density of regular and chaotic attractors of the system were constructed and investigated in details.

Key Words: chaotic attractor, map of dynamical regimes, non-ideal excitation.

E-mail: alex.shvets@bigmir.net, pevlan@online.ua

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., професор Мелешко В.В.

1 Вступ

Дослідження різноманітних аспектів динамічної поведінки маятникових систем завжди викликали особливий науковий інтерес. Головним чином він пов'язаний з тим, що такі системи широко використовуються для математичного моделювання складних коливальних процесів найрізноманітнішої природи [1]. При цьому маятникові системи залишаються надзвичайно простими за своєю фізичною природою та дозволяють досить легко виконувати експериментальну перевірку виявлених у теоретичних дослідженнях коливальних ефектів.

В переважній більшості досліджень динаміки маятникових систем нехтується зворотнім впливом маятників на джерело збудження їх коливань. Такий підхід виправданий в тих випадках, коли потужність джерела збудження коливань значно перевищує потужність, що споживається маятниковою си-

стемою. Такі випадки називаються ідеальними за Зоммерфельдом-Кононенко [2], а саме збудження називається ідеальним. Але в сучасних умовах дуже актуальною стає проблема максимальної мінімізації тих чи інших джерел збудження. Це призводить до того, що потужність джерела збудження виявляється порівнянною з потужністю, яку споживає коливальне навантаження, наприклад маятникова система. В таких випадках врахування зворотного впливу коливального навантаження на функціонування джерела збудження стає нагальною необхідністю. Ці випадки називаються неідеальними за Зоммерфельдом-Кононенко, а саме збудження – неідеальним або обмеженим [2]. Нехтування неідеальністю збудження призводить до грубих помилок при вивченні динаміки маятникових систем. Зокрема може бути повністю втрачена інформація про реально існуючі детерміновані хаотичні режими системи [1, 3, 4].

Дослідження складної нелинійної динаміки

сферичного маятника при неідеальному збудженні були розпочаті в роботах [1, 3, 4]. Для динамічної системи, утвореної сферичним маятником, точка підвісу якого збуджується електродвигуном, в [3, 4] побудована математична модель, яка враховує неідеальність збудження коливань. Вказаних роботах встановлено існування детермінованого хаосу в досліджуваній системі та визначені деякі ефекти нелінійної взаємодії маятника та електродвигуна.

2 Постановка задачі

Розглянемо динамічну систему, яка утворена фізичним маятником, який може здійснювати просторові коливання, та електродвигуном, вал якого через кривошпинно-шатунний механізм у вертикальній площині збуджує точку підвісу маятника (рис. 1). Потужність електродвигуна є обмеженою за величиною та порівняна з енергією, що витрачається при коливаннях маятника. Тобто, розглядається маятникова система при неідеальному збудженні коливань.

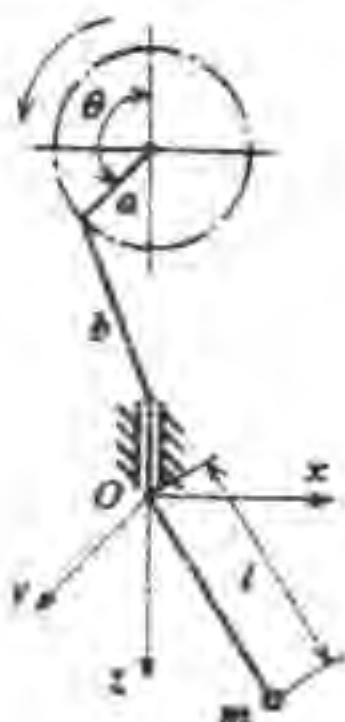


Рис. 1 Динамічна система "сферичний маятник-електродвигун"

Основною метою роботи є побудова карти динамічних режимів, яка дозволить узагальнити особливості нелінійної взаємодії маятника та електродвигуна. Така карта дозволяє дослідити регулярні та хаотичні режими системи "сферичний маятник - електродвигун", які виникають при зміні управляючих параметрів.

3 Математична модель системи і методи її дослідження

Для системи "сферичний маятник - електродвигун" у роботах [3, 4] побудована математична модель, яка враховує неідеальність збудже-

ння коливань. У відповідності до вказаних рабiт введемо декартову систему координат $Oxyz$, як показано на рис. 1. Тоді для невідомих функцій $\alpha(t)$, $\beta(t)$ – кутів відхилення маятника від відповідних координатних площин, та $\Theta(t)$ – кута повороту вала електродвигуна, математична модель може бути записана системою нелінійних диференціальних рівнянь (1) [1, 3, 4]. В систему (1) входять наступні фізичні параметри: I – момент інерції ротора електродвигуна; $L(\dot{\Theta})$ – рухомий момент електродвигуна; $H(\dot{\Theta})$ – внутрішній момент сил опору обертання ротора електродвигуна; $\omega_0 = \sqrt{g/l}$ – власна частота маятника; δ_1 – коефіцієнт демпфування сили опору середовища, в якому рухається маятник.

$$\begin{aligned} I\ddot{\Theta} = & L(\dot{\Theta}) - H(\dot{\Theta}) - mla[\ddot{\Theta}\frac{a}{l}\sin^2\Theta + \\ & + \dot{\Theta}^2\frac{a}{l}\sin\Theta\cos\Theta + \frac{g}{l}\sin\Theta - (\dot{\alpha}^2 + \\ & + \dot{\beta}^2)\sin\Theta - (\alpha\dot{\alpha} + \beta\dot{\beta})\sin\Theta], \\ \ddot{\alpha} + \omega_0^2(\alpha - \frac{\alpha^3}{6} + \frac{\alpha\beta^2}{2}) + \delta_1\dot{\alpha} + \alpha(\dot{\beta}^2 + \\ & + \beta\dot{\beta}) - \frac{a}{l}\alpha(\dot{\Theta}^2\cos\Theta + \ddot{\Theta}\sin\Theta) = 0, \\ \ddot{\beta} + \omega_0^2(\beta - \frac{\beta^3}{6} + \frac{\alpha^2\beta}{2}) + \delta_1\dot{\beta} + \beta(\dot{\alpha}^2 + \\ & + \alpha\dot{\alpha}) - \frac{a}{l}\beta(\dot{\Theta}^2\cos\Theta + \ddot{\Theta}\sin\Theta) = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Припускається, що реалізуються умови основного параметричного резонансу, коли швидкість обертання вала двигуна $\dot{\Theta}$ близька до подвоєної власної частоти маятника $2\omega_0$ - а саме

$$\dot{\Theta}(t) = 2\omega_0 + \varepsilon\omega_0\nu(t), \text{ де } \varepsilon = \frac{a}{l}, a \leq l. \quad (2)$$

Для дослідження резонансних коливань маятника у рівняннях (1) проводиться заміна змінних за формулами

$$\begin{aligned} \alpha(t) = & \varepsilon^{\frac{1}{2}}[y_1(\tau)\cos\frac{\Theta(t)}{2} + y_2(\tau)\sin\frac{\Theta(t)}{2}], \\ \beta(t) = & \varepsilon^{\frac{1}{2}}[y_4(\tau)\cos\frac{\Theta(t)}{2} + y_5(\tau)\sin\frac{\Theta(t)}{2}], \\ \tau = & \frac{\varepsilon}{4}\Theta(t). \end{aligned} \quad (3)$$

та виконується процедура усереднення за швидким часом [1, 3, 4]. В результаті чого отримується наступна система диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= Cy_1 - [y_3 + \frac{1}{8}(y_1^2 + y_2^2 + y_4^2 + y_5^2)]y_2 - \\ &\quad - \frac{3}{4}(y_1y_5 - y_2y_4)y_4 + 2y_2, \\ \dot{y}_2 &= Cy_2 + [y_3 + \frac{1}{8}(y_1^2 + y_2^2 + y_4^2 + y_5^2)]y_1 - \\ &\quad - \frac{3}{4}(y_1y_5 - y_2y_4)y_5 + 2y_1, \\ \dot{y}_3 &= D(y_1y_2 + y_4y_5) + Ey_3 + F, \\ \dot{y}_4 &= Cy_4 - [y_3 + \frac{1}{8}(y_1^2 + y_2^2 + y_4^2 + y_5^2)]y_5 + \\ &\quad + \frac{3}{4}(y_1y_5 - y_2y_4)y_1 + 2y_5, \\ \dot{y}_5 &= Cy_5 + [y_3 + \frac{1}{8}(y_1^2 + y_2^2 + y_4^2 + y_5^2)]y_4 + \\ &\quad + \frac{3}{4}(y_1y_5 - y_2y_4)y_2 + 2y_4. \end{aligned} \quad (4)$$

Отримана система диференціальних рівнянь (4) використовується в якості математичної моделі детермінованої коливальної системи "сферичний маятник - електродвигун". В (4) введено позначення:

$$F = (\frac{N_0}{\omega_0} - 2E)\frac{l}{a}, \quad D = -\frac{2ml^2}{I + \frac{1}{2}ma^2},$$

$$C = -\frac{\delta_1}{\omega_0}, \quad y_3 = \nu.$$

Система рівнянь (4) явно містить чотири управляючих параметри: C , D , E та F , які визначаються через електричні та механічні характеристики досліджуваної системи. Параметр E безпосередньо визначається кутом нахилу статичної характеристики електродвигуна, параметр C пропорційний опору середовища. D та F є мультипараметрами динамічної системи (4). Вони залежать від довжини та маси маятника, його власної частоти, коефіцієнта демпфування, лінійних розмірів кривошипно-шатунного механізму, моменту інерції ротора і також від параметрів статичної характеристики електродвигуна.

Загальна методика виконання досліджень нелінійної динаміки коливальних систем визначена в [1]. Вона спирається на аналіз спектрів ляпуновських характеристичних показників, фазових портретів регулярних та хаотичних аттракторів, їх поретів та відображень Пуанкаре, розподілів інваріантної міри та спектральної густини. Оскільки математична модель (4) системи "сферичний маятник - електродвигун" є нелінійною, з розмірністю фазового простору рівною п'яти, тому для вивчення

регулярних та хаотичних режимів використовувався комплекс чисельних методів [1].

Проведення такого дослідження вимагає надзвичайно великого обсягу чисельних експериментів, які можуть бути проведені тільки з застосуванням сучасної обчислювальної техніки. Для комп'ютерної реалізації вказаних методів було розроблено спеціалізований пакет програмних модулів.

4 Карта динамічних режимів

Карта динамічних режимів представляє собою діаграму на площині, на осях якої відкладені довільні два параметри системи (біфуркаційні параметри) та вказані області усталених динамічних режимів різних типів. На основі практичних критеріїв існування детермінованого хаосу [1] розроблено алгоритм побудови карти динамічних режимів. Він полягає в діагностиці режимів взаємодії, які встановлюються між маятником та електродвигуном, на деякій множині значень біфуркаційних параметрів.

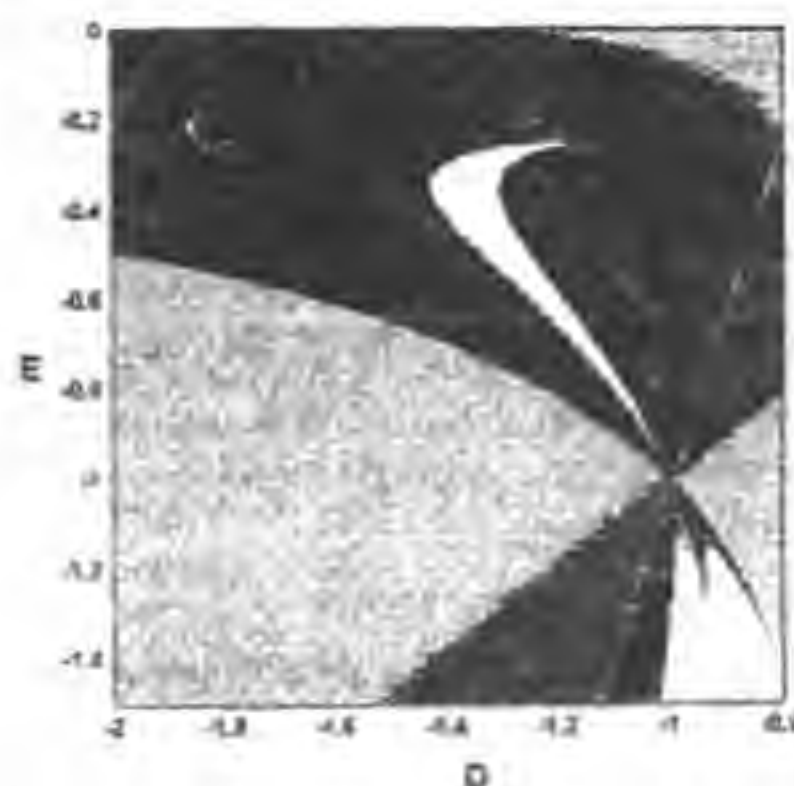


Рис. 2 Карта динамічних режимів

На рис. 2 наведено, отриманий в результаті аналізу та обробки даних комп'ютерних експериментів, один із листів карти динамічних режимів системи "сферичний маятник - електродвигун". Він побудований відносно параметрів D, E при значеннях $C = -0.5$, $F = 0.5$. Початкові умови варіювалися в околі початку координат фазового простору.

На даному листі карти наведені області чотирьох різних типів динамічних режимів. Сірим кольором нанесені області значень параметрів D, E , при яких в системі встановлюватимуться положення рівноваги. Сигнатура спектру ЛХП в даному випадку матиме вигляд

$(-, -, -, -, -)$. Білим кольором нанесені області значень параметрів D, E , при яких в системі існують граничні цикли з сигнатурою спектру ЛХП $(0, -, -, -, -)$. Чорним кольором нанесені області детермінованого хаосу, коли в фазовому просторі системи встановлюються хаотичні аттрактори із сигнатурою $(+, 0, -, -, -)$. Як видно з рис.2, чорні області карти динамічних режимів мають білі включення, так звані вікна періодичності. Нарешті, на області значень параметрів D, E , яка на рис.2 заштрихована вертикальними сірими лініями, не встановлено існування жодного аттрактора у фазовому просторі системи. Траєкторії системи (4) в даному випадку прямують на нескінченність.

Наведений лист карти динамічних режимів показує (рис. 2), що хаотичні режими займають значні області в просторі параметрів досліджуваної системи. Періодичні режими навпаки, встановлюються на значно менших за площею областях параметрів системи.

5 Дослідження усталених режимів взаємодії

Для дослідження особливостей виникнення детермінованого хаосу в системі "сферичний маятник - електродвигун" зробимо переріз карти динамічних режимів (рис.2) при $E = -0.5$. Проаналізуємо зміни динамічних режимів, які відбуваються вздовж даного перерізу при зміні величини параметра D .

На рис.3 побудований графік залежності старшого відмінного від нуля характеристичного показника системи (4). Як відомо, основний практичний критерій існування детермінованого хаосу в системі полягає у присутності в спектрі ЛХП принаймні одного додатного показника [1]. На рис.3 показано, що існує ряд інтервалів значень параметра D , при яких побудований графік знаходиться в додатній напівплощині. Такі інтервали відповідають чорним областям карти динамічних режимів (рис.2), на яких у фазовому просторі системи (4) існують хаотичні аттрактори.

На рис.4 наведена фазопараметрична характеристика досліджуваної системи, так зване біфуркаційне дерево. Насичено чорним областям даної характеристики відповідають інтервали значень параметра D , при яких граничними множинами у фазовому просторі системи

будуть хаотичні аттрактори. На тих інтервалах значень параметра D , де біфуркаційне дерево складається з фіксованої кількості ліній, у фазовому просторі системи існують граничні цикли.

Розглянемо найширше вікно періодичності наявне в околі точки $D = -1.3$. Уважний розгляд структури біфуркаційного дерева в околі точки $D = -1.3$ дозволяє виявити розщеплення його "гілок" при зменшенні параметра D . Це свідчить про перехід до хаосу через каскад біфуркацій подвоєння періоду за сценарієм Фейгенбаума [5]. При зменшенні параметра D перехід до хаосу здійснюється внаслідок однієї біфуркації через переміжність [6].

Вивчаючи динаміку системи "сферичний маятник - електродвигун" при переході від регулярних режимів до хаотичних були встановлені реалізації сценаріїв двох основних типів. Це перехід до хаосу через переміжність [6] та через каскад біфуркацій подвоєння періоду [5]. Проаналізуємо особливості кожного із сценаріїв.

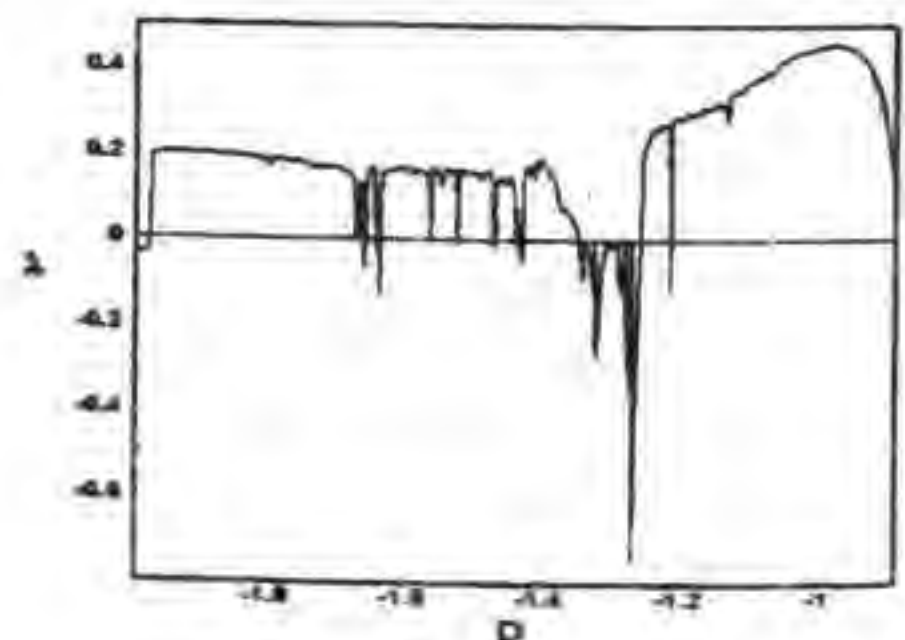


Рис. 3 Графік залежності старшого відмінного від нуля характеристичного показника

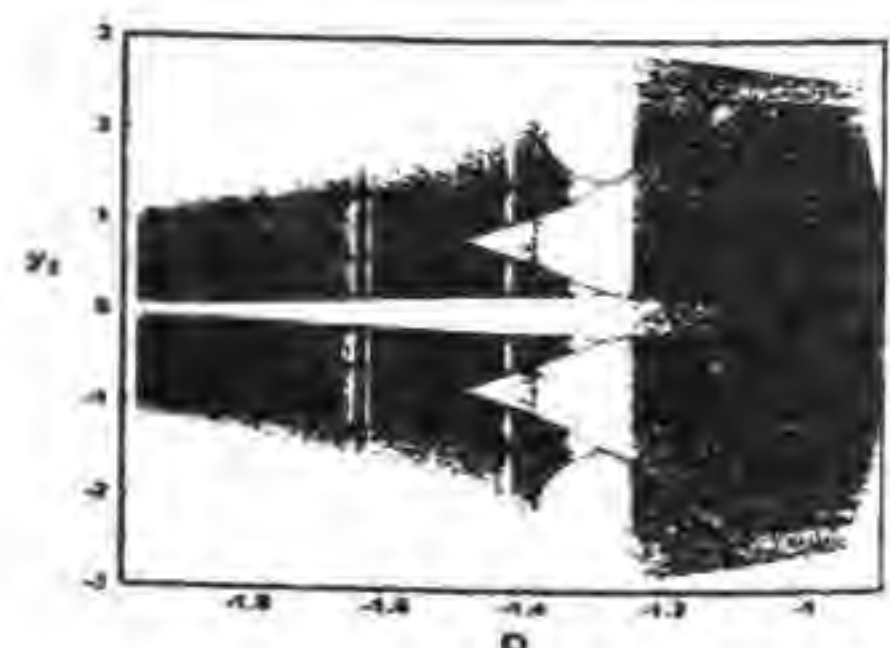


Рис. 4 Фазопараметрична характеристика

На рис.5(а) наведено проєкцію фазового

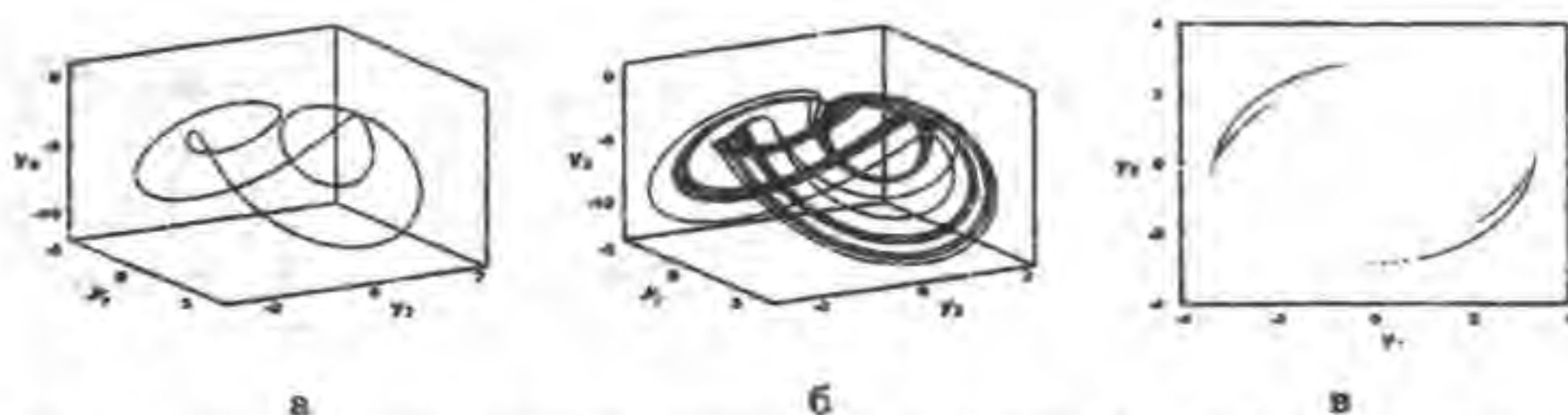


Рис. 5 Проекція фазового портрета граничного циклу при $D = -1.252$ (а) та хаотичного аттрактора при $D = -1.250$ (б); переріз Пуанкаре хаотичного аттрактора при $D = -1.250$ (в)

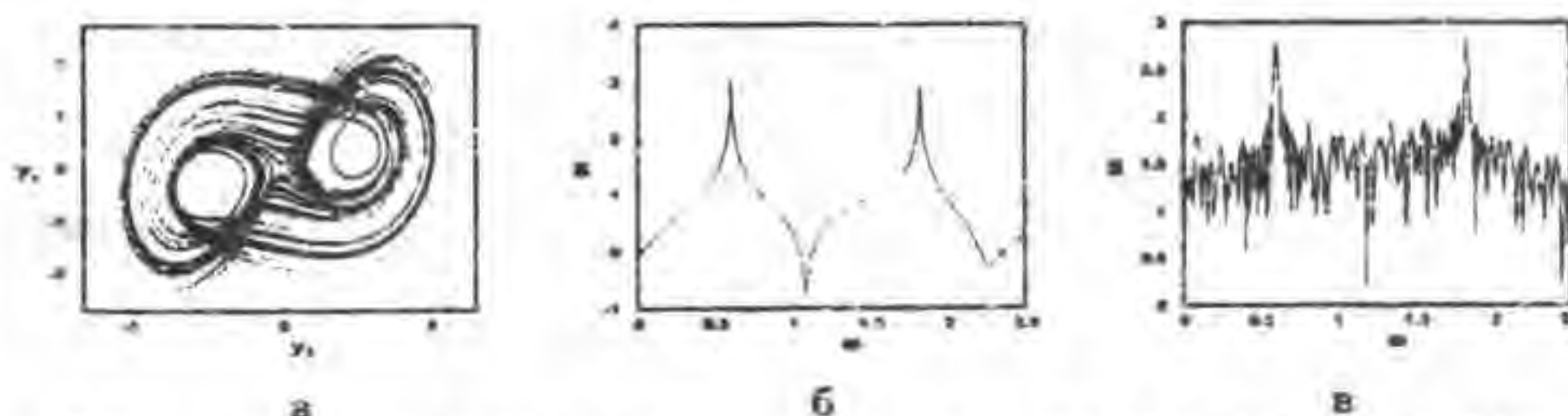


Рис. 6 Рхніоділ інваріантної міри хаотичного аттрактора при $D = -1.250$ (а); Фур'є-спектри граничного циклу при $D = -1.252$ (б) та хаотичного аттрактора при $D = -1.250$ (в)

портрету стійкого граничного циклу, побудованого при $D = -1.252$. Аналогічну структуру мають і інші граничні цикли з околу D , а в системі "сферичний маятник – електродвигун" встановлюється регулярний режим взаємодії, при якому маятник здійснює періодичні коливання. При зменшенні за модулем величини параметра D внаслідок дотичної біфуркації в системі виникає хаотичний аттрактор, проекція фазового портрету якого наведена на рис.5(б). Переріз Пуанкаре утвореного хаотичного аттрактора побудований на рис.5 (в). Даний переріз представляє собою деяку хаотичну множину, кількість точок якої збільшуватиметься із збільшенням часу чисельного інтегрування системи (4).

В даному випадку реалізується сценарій переходу до хаосу через переміжність за Помо та Маневіллем [6]. Особливість реалізації даного сценарію полягає у присутності в динаміці хаотичного режиму системи двох якісно різних фаз. Перша з них, більш тривала в часі, ламінарна фаза, в якій траєкторії системи здійснюють рух в околі зниклого після біфуркації граничного циклу. Друга, коротко тривала в часі, турбулентна фаза, в якій відбуваються непередбачені відходи траєкторій у віддалені області фазового простору.

Важливою характеристикою утвореного хаотичного аттрактора є розподіл інваріантної міри. Такий рхніоділ показує відношений час перебування зображуючої точки системи (4) у деякій області фазового простору. Більш темно нанесені точки на рис. 6(а) близькі до контуру зниклого граничного циклу та відповідають ламінарній фазі переміжності. Точки нанесені більш світлим кольором на рис. 6(а) відповідають турбулентній фазі.

На рис. 6(б) та 6(в) наведені Фур'є-спектри граничного циклу та утвореного хаотичного аттрактора. Для граничного циклу, якому відповідають періодичні коливання маятника, Фур'є-спектр є дискретним та гармонічним. У хаотичного аттрактора Фур'є-спектр суцільний та неперервний, але в його структурі також проявляється особливість реалізації даного сценарію. Як видно з рис. 6(в) в Фур'є-спектрі хаотичного аттрактора присутні спектральні складові, які наближено повторюють гармоніки зниклого граничного циклу.

Інший сценарій, який реалізується в системі "сферичний маятник – електродвигун", це сценарій Фейгенбаума або перехід до хаосу через каскад біфуркацій подвоєння періоду [5]. На рис. 7(а-б) наведені проекції фазових портретів граничних циклів, утворених внаслідок першої,

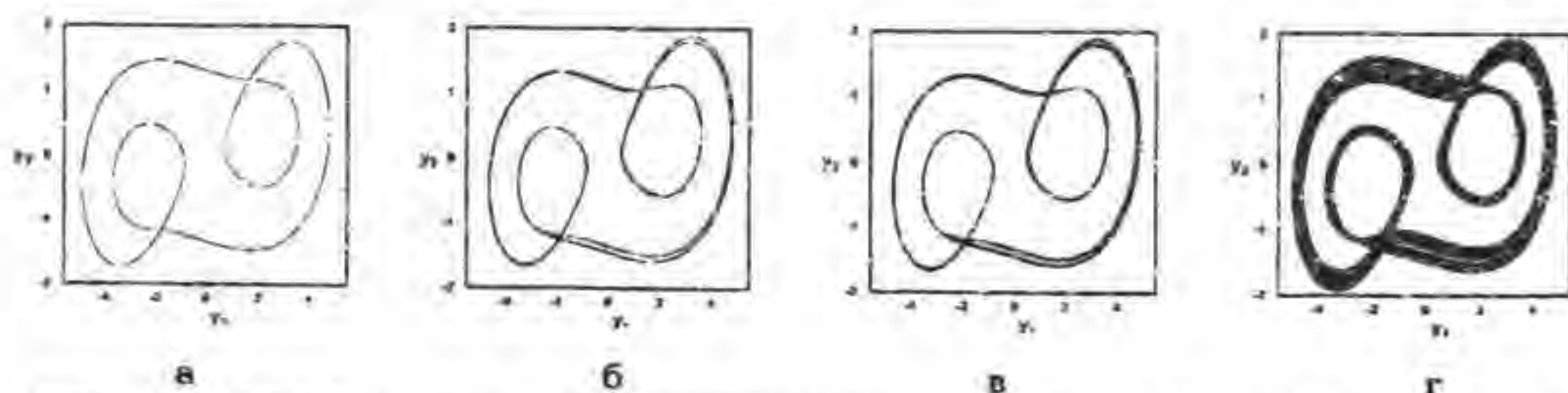


Рис. 7 Проекції фазових портретів граничних циклів при $D = -1.329$ (а), $D = -1.337$ (б), $D = -1.339$ (в) та хаотичного атрактора при $D = -1.350$ (г)

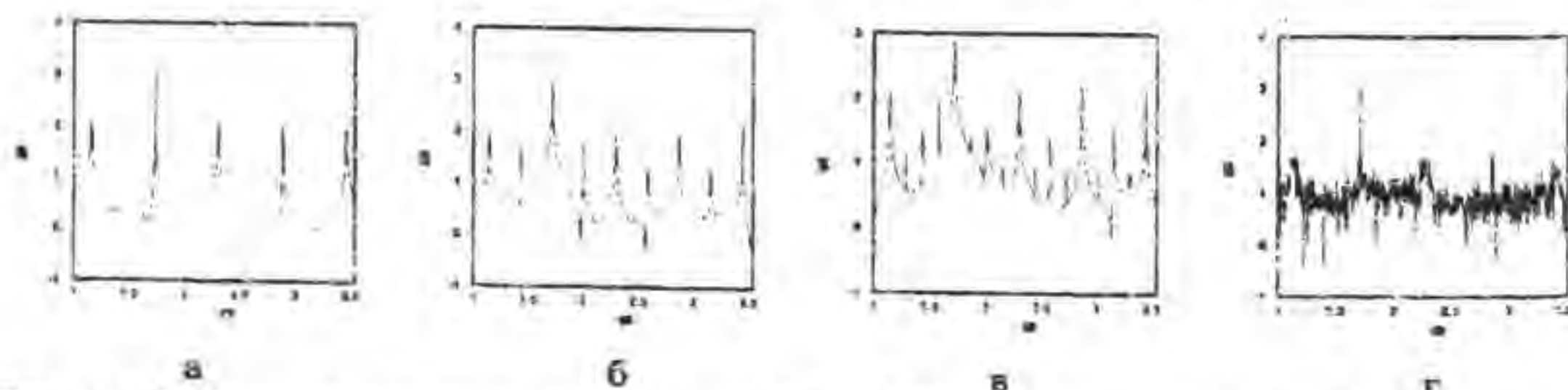


Рис. 8. Фур'є-спектри граничних циклів при $D = -1.329$ (а), $D = -1.337$ (б), $D = -1.339$ (в) та хаотичного атрактора при $D = -1.350$ (г)

другої та третьої біфуркації подвоєння періоду. Такий процес повторюється до критичної точки накопичення біфуркацій подвоєння періоду після якої відбувається руйнування тонкої структури граничного циклу та виникає хаотичний атрактор (рис. 7(г)).

Проаналізуємо еволюцію Фур'є-спектрів даного каскаду біфуркацій подвоєння періоду. Після кожної такої біфуркації в спектрі з'являється субгармонійна складова рівно посередній між гармоніками основного періоду. В за критичній області відбувається зворотний процес руйнування субгармонік та виникнення шпильок суцільного спектру (рис. 8).

6 Висновки

Таким чином, детермінована система "сферичний маятник – електродвигун" демонструє досить велику різноманітність регулярної та хаотичної поведінки. Побудована карта динамічних режимів показує можливість реалізації чотирьох різних типів взаємодії маятника та електродвигуна. При цьому хаотичні режими, які встановлюються у системі, не є впіятковими, а навпаки займають великі області в просторі параметрів системи. Зауважимо, що при ідеальному збудженні в такій системі взагалі не існує хаотичних режимів [1].

Список використаних джерел

1. Краснопольская Т.С., Швец А.Ю. Регулярная и хаотическая динамика систем с ограниченным возбуждением. – М.-Ижевск: R&CD. 2008 – 280 с.
2. Кононенко В.О. Колебательные системы с ограниченным возбуждением. – М., Наука, 1964. – 256 с.
3. Краснопольская Т.С., Швец А.Ю. Хаотические колебания сферического маятника как эффект взаимодействия с источником энергии // Прикл. механика – 1992. – 28, №10. – С. 61–68.
4. Швец А.Ю. Детерминированный хаос сферического маятника при ограниченном возбуждении // Укр. мат. журн. – 2007. – 59, №4. – С. 534–548.
5. Feigenbaum M.J. Quantative universality for a class of nonlinear transformations // J. Stat. Phys. – 1978. – 19. – P. 25–52.
6. Manneville P., Pomeau Y. Different ways to turbulence in dissipative dynamical systems // Physica D. – 1980. – 1. – P. 219–226.

Надійшло до редакції 12.05.2009

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 519.816(075.8)

Волошин О.Ф., професор, д.т.н.,
Пошелюжний О.В., студент.

Побудова та дослідження нечіткої моделі поведінки однопродуктової фірми

Розглядається задача оптимізації прибутку
фірми при нечітко заданих цінах на ресурси.
Застосовується метод послідовних поступок
для пошуку компромісного розв'язку.

Ключові слова: мікроекономіка, теорія
виробництва, нечіткість, компроміс.

E-mail: ovoloshin@unicyb.kiev.ua, oleg_posh@mail.ru.

Статтю представив доктор технічних наук, професор Акіменко В.В.

В теорії виробництва мікроекономічної
теорії розглядається три основних задачі: так
звана неокласична задача поведінки
однопродуктової фірми (максимізація прибутку),
задача мінімізації витрат і максимізації випуску
продукції. Основною з цих задач є модель
поведінки однопродуктової фірми за певний
проміжок часу, котра полягає у максимізації
прибутку при заданій виробничій функції,
заданих цінах на продукцію та цінах на фактори
виробництва [1].

Розв'язується довгострокова задача щодо
можливості придбати ресурси. Така задача має
вигляд:

$$\pi(x) = pF(x) - xw \rightarrow \max, \quad x = (x_i)_{i=1, \dots, n} \geq 0, \quad (1)$$

де $F(x)$ - виробнича функція, w - вектор цін на
фактори виробництва, x - попит на об'єм
факторів, p - ціна готової продукції.

Оскільки ціни на фактори виробництва при
прогнозуванні прибутку фірми (скажімо, через
рік) точно не визначені, то в якості їх опису
пропонується використовувати "нечітко" задані
ціни, тобто ціна на i -ий фактор знаходиться в
діапазоні $[w_{i1}; w_{i2}]$, $i = \overline{1, n}$, із заданням пріоритету
(функції належності) [2].

Крім цього, враховується залежність
 $p = f(w)$, де $f(w)$ функція, що належить
деякому класу (наприклад, лінійна, логарифмічна
тощо), для якої оцінювання невідомих параметрів
проводиться методом найменших квадратів.

Для побудови "більш адекватної" моделі (1)
використовується математичний апарат теорії
нечітких множин. Нечіткі інтервали W^i , $i = \overline{1, n}$,

O. F. Voloshin professor,
O. V. Posheluznuy student.

Construction and research fuzzy model of single-component company

The problem of optimization of company profit,
when prices for resources are fuzzy, was
considered. The method of successive compromise
was applied for searching compromise solution.

Key words: microeconomics, theory of
production, fuzzy set, compromise.

визначаються як множина аргументів, на яких
функція належності має рівень не нижчий за λ .
Існують різноманітні механізми формування
рівня λ . Наприклад, якщо мається множина
експертів $P = \{1, 2, \dots, p\}$, кожен з яких формує
свою неперервну функцію належності $\mu'_p(w')$,

$i = \overline{1, n}$, $p = \overline{1, P}$, і встановлює рівень значення
 $\lambda_p \in [0, 1]$, $p = \overline{1, P}$. Тоді при заданих рівнях λ_p

($1 \geq \mu'_p(w') \geq \lambda_p$) кожним експертом визначається

інтервал зміни значень W'_p , $p = \overline{1, P}$, де

$W'_p = [w'_{p(1)}, w'_{p(2)}]$. Значення величини інтервалу

W'_p коректується з врахуванням особливостей

експерта: "оптимістичність", "реалістичність",

"песимістичність" (психологічний тип можна

визначити відповідним тестуванням) [2].

Результуючий інтервал зміни i -ї ціни W^i ,

$W^i \neq \emptyset$, $i = \overline{1, n}$, з функцією належності $\mu^i(w')$:

$1 \geq \mu^i(w') \geq \lambda$, $\lambda = \min_{p \in P} \lambda_p$, "узгоджений"

групою експертів, визначається як $W^i = \bigcap_{p=1}^P W'_p$.

Якщо $W^i = \emptyset$ хоча б для одного i , то процес

узгодження продовжується за допомогою методів

обробки експертної інформації [2].

Ступінь компетентності експертів

визначають на основі статистичного аналізу

участі експерта у попередніх експертизах,

отримуючи так звані ваги експертів α_i , $i = \overline{1, n}$.

Означення 1. Множиною рівня λ нечіткої

множини W^i , $i = \overline{1, n}$ зветься множина $L_\lambda(W^i)$.

для якої ступінь належності всіх елементів не нижчий за величину λ , тобто:
 $L_\lambda(W') = \{W \in W' \mid \mu'(w') \geq \lambda, i = \overline{1, n}\}.$

Для заданого ступеня λ отримуємо наступну задачу:

$$\pi(x) = pF(x) - xw \rightarrow \max, p = f(w), \quad (2)$$

$$w \in L_\lambda(w), x = (x_i)_{i=\overline{1, n}} \geq 0.$$

Процедура розв'язання задачі за аналогією [3] полягає в наступному.

Крок 1. Обчислити максимум для цільової функції при заданих обмеженнях для $\lambda = 0$ та $\lambda = 1$.

Крок 2. Особа, що приймає рішення (ОПР) обирає узгоджене експертами значення λ , для якого розв'язується задача (2).

Крок 3. Аналіз отриманого розв'язку. Для відповідного значення λ обраховується "ймовірність" $P_\lambda = (1 - \lambda) \times 100\%$, з якою $\pi_\lambda(x^*) \in [\pi_{\min}, \pi_{\max}]$, де $\pi_{\min}$ відповідає w_H , $\pi_{\max} - w_{II}$. Якщо ОПР задовольняє величина "інтервалу невизначеності" для $\pi_\lambda(x^*)$ та значення P_λ , то кінець, інакше задається новий рівень λ .

Крок 4. Пошук компромісного розв'язку. Для пошуку компромісного розв'язку пропонується наступна трьохкритеріальна задача:

$$\begin{aligned} f_1 &= P_\lambda \rightarrow \max, \\ f_2 &= \Delta\pi_\lambda = \pi_{\max}(x, P) - \pi_{\min}(x, P) \rightarrow \min, \\ f_3 &= \pi_\lambda(x, P) \rightarrow \max, \\ x &\geq 0, 0 \leq P \leq 1. \end{aligned} \quad (3)$$

Перший критерій має зміст достовірності величини інтервалу, другий – точності задання інтервалу, третій – оцінки значення прибутку.

Задача (3) розв'язується методом послідовних поступок, для якої критерії впорядковуються за зменшенням їх важливості $f_1 \succ f_2 \succ f_3$.

Для цільової функції $\pi_\lambda(x, P)$ здійснюється монотонне перетворення до нормованого безрозмірного вигляду:

$$f_k(x, P) = \begin{cases} \frac{\pi_\lambda(x, P) - \bar{\pi}_k}{\pi_k^* - \bar{\pi}_k} & \text{при } \bar{\pi}_k \leq \pi_\lambda(x, P) \leq \pi_k^*, \\ 0, & \text{в іншому випадку} \end{cases} \quad (4)$$

де $\bar{\pi}_k = \min \pi_k$, $\pi_k^* = \max \pi_k$, $k = \min, \max$.

Позначимо $L(x) = \min(f_{\min}(x, P), f_{\max}(x, P))$. Тоді компромісний розв'язок отримаємо, розв'язавши задачу:

$$\begin{aligned} L(x) &\rightarrow \max, \\ (\pi_{\min}^* - \bar{\pi}_{\min})L(x) - \bar{\pi}_{\min}(x, P) &\leq -\bar{\pi}_{\min}, \\ (\pi_{\max}^* - \bar{\pi}_{\max})L(x) - \bar{\pi}_{\max}(x, P) &\leq -\bar{\pi}_{\max}, \\ \Delta\pi_\lambda &= \pi_{\max}(x, P) - \pi_{\min}(x, P) \leq \Delta f_2, \\ P &\leq \Delta f_1, x \geq 0, L \geq 0. \end{aligned} \quad (5)$$

В залежності від психосоматичних характеристик ОПР (схильність до ризику) для нього важливішим буде або точність $\Delta\pi_\lambda$, або достовірність P_λ величини інтервалу. Тому поступки Δf_1 , Δf_2 відповідно коригують зміною їх значення.

При побудові нечіткої моделі фірми використовуються різні функції належності - трикутна, трапецеїдальна, дзвіноподібна, гаусівська [3].

Приводяться результати обчислюваного експерименту для $F(x) = x_1^{1/4} x_2^{1/2}$ (мультиплікативна виробнича функція), $P = 4000$.

На рис. 1, 2 задано трапецеїдальну і трикутну функцію належності для цін w_1 та w_2 .

В табл. 1 приводяться результати величин "інтервалів невизначеності" прибутку в залежності від рівня λ .

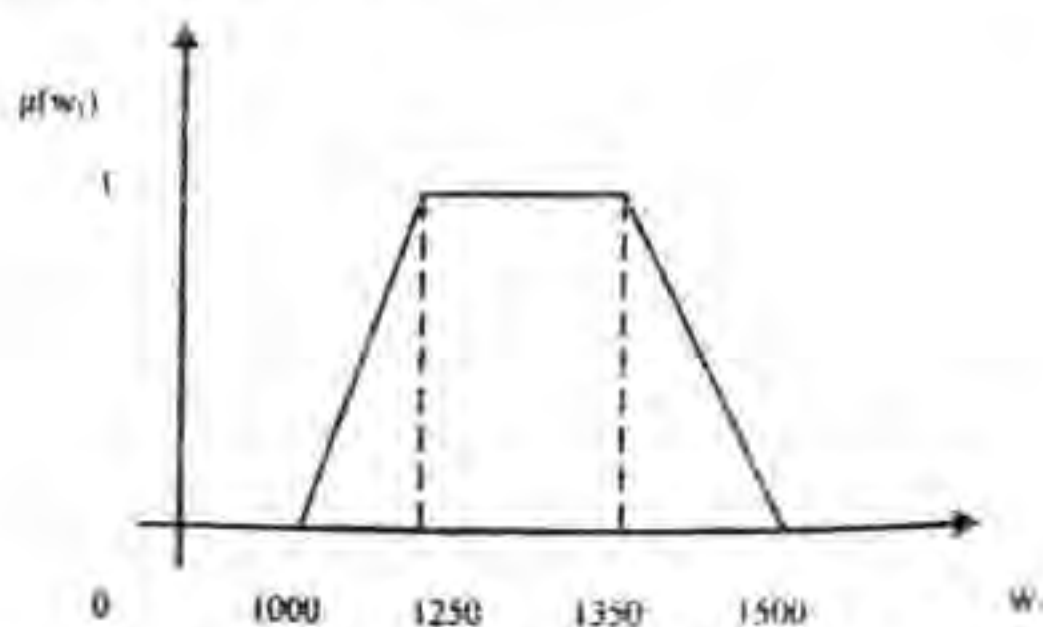


Рис. 1

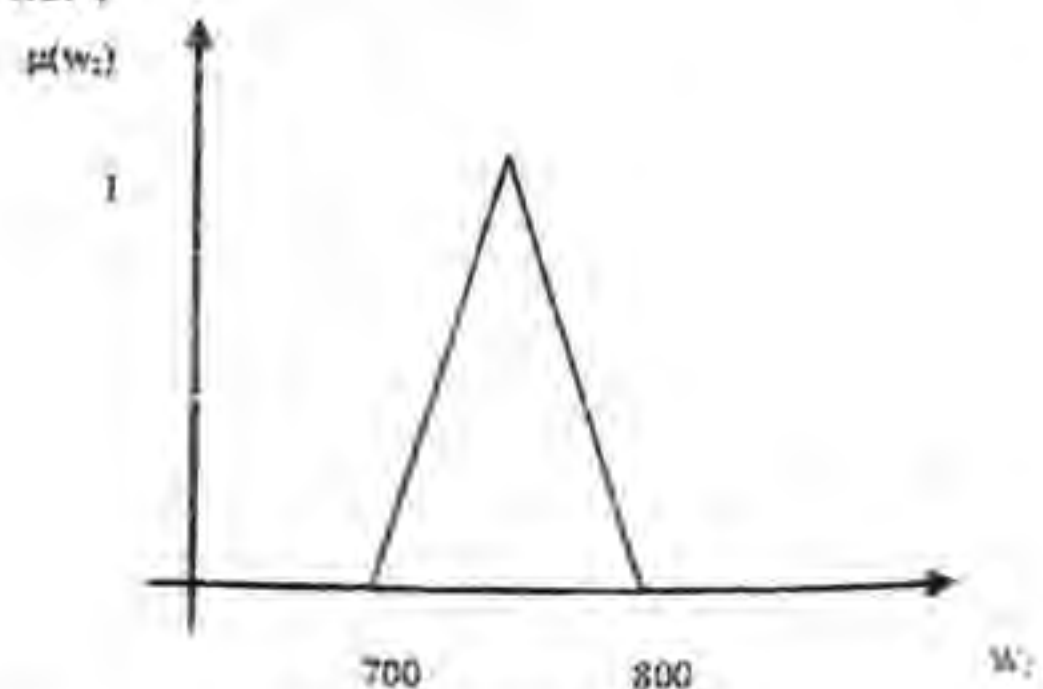


Рис. 2

Таблиця 1

λ	$x_{\min}$	$x_{\max}$	$\pi_{\min}(x_{\max})$	$\pi_{\max}(x_{\min})$	π_{λ}
0	(2.78, 10.41)	(8.16, 23.32)	1750	6600	[1750, 8160]
0.25	(3.00, 11.22)	(7.00, 20.90)	3060	6460	[3062, 7430]
0.5	(3.27, 12.00)	(6.00, 18.67)	4030	6260	[4030, 6770]
0.75	(3.57, 13.00)	(5.21, 16.80)	4740	6000	[4740, 6200]
1	(3.90, 14.00)	(4.56, 15.17)	5230	5600	[5230, 5700]

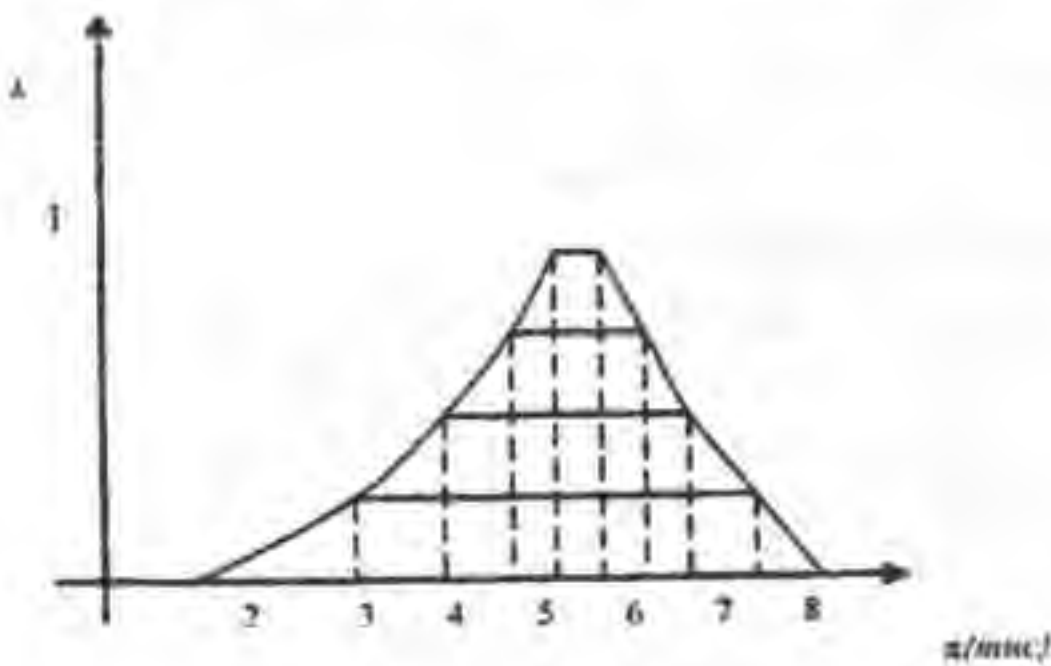


Рис. 3

На рис. 3 графічно представлена інформація приведена в табл 1, про значення π в залежності від λ , $0 \leq \lambda \leq 1$.

Пошук компромісного розв'язку. Будемо вважати, що критерії вже впорядковані за зменшенням їх важливості.

$$\begin{aligned} P &\rightarrow \max, \\ 4x_1P + Px_2 + x_1 &\rightarrow \min, \\ \pi(x, P) &\rightarrow \max, \\ x &\geq 0, \quad 0 \leq P \leq 1. \end{aligned}$$

Знаходиться максимум першого критерію на множині альтернатив:

$$\begin{aligned} P &\rightarrow \max, \\ x &\geq 0, \quad 0 \leq P \leq 1. \end{aligned}$$

На другому кроці мінімізується другий критерій:

$$\begin{aligned} 4x_1P + Px_2 + x_1 &\rightarrow \min, \\ x &\geq 0, \quad 0 \leq P \leq 1. \end{aligned}$$

Розв'язком буде альтернатива $x^* = (0,0)$, яка має оцінку $y^* = (1,0,0)$. Отриманий результат не задовольняє ОНР за третім критерієм. Тоді нехай $\Delta f_3 = -1000$.

На "уточненій" множині альтернатив максимізуємо третій критерій:

$$\begin{aligned} \pi(x, P) &\rightarrow \max, \\ 4x_1P + Px_2 + x_1 &\leq 1000, \\ x &\geq 0, \quad 0.75 \leq P \leq 1. \end{aligned}$$

Здійснивши перетворення (4) отримаємо наступну задачу:

$$\begin{aligned} L &\rightarrow \max, \\ 2560L - (4000 * x_1^{0.25} x_2^{0.5} - (1250 - 250P)x_1 - \\ & - (750 - 50P)x_2) \leq -5600, \\ 3480L - (4000 * x_1^{0.25} x_2^{0.5} - (1350 + 150P)x_1 - \\ & - (750 + 50P)x_2) \leq -1750, \\ 400x_1P + 100Px_2 + 100x_1 &\leq 1000, \\ 0.75 \leq P \leq 1, \quad x &\geq 0, \quad L \geq 0. \end{aligned}$$

ОПР, аналізуючи отримані результати, може повернутись на відповідний крок, де була зроблена (на думку ОПР) невірна поступка.

Ефективність наведеної процедури пошуку компромісного розв'язку зумовлюється теоремою О. Вентцеля [2] щодо методу послідовних поступок, для будь-якого впорядкування критеріїв і будь-якої ефективної альтернативи x^* існує послідовність невід'ємних поступок таких, що на останньому кроці процедури буде отримана множина ефективних альтернатив, всі елементи якої рівноцінні x^* .

Завдання раціонального ведення господарства, яке має вирішувати підприємство в умовах ринкової економіки, полягає у максимізації випуску продукції в довгостроковому періоді із заданим обсягом виробничих видатків s і технологією, що описується виробничою функцією $F(x)$, має вигляд:

$$F(x) \rightarrow \max, \quad xw \leq s, \quad x = (x_i)_{i=1,n} \geq 0. \quad (6)$$

w - вектор цін на фактори виробництва, x - попит на об'єм факторів.

Також розглядається двоїста до задачі (6) задача оптимальної поведінки фірми, орієнтована на мінімізацію виробничих видатків при заданому рівні q пропозиції фірми:

$$xw \rightarrow \min, F(x) \geq q, x = (x_i)_{i=1,n}, \bar{c} \geq 0 \quad (7)$$

На практиці задачу (6) та (7) більш ефективно зводити до нечіткої постановки. Так, вектор цін на фактори виробництва, як правило, задається у вигляді гіперпаралелепіеда $W = \prod [w_{i1}, w_{i2}]$, де w_{i1} - нижня ціна i -го ресурсу, w_{i2} - верхня.

Крім цін на ресурси, у формі нечітких множин слід задавати обсяг виробничих видатків $\bar{c} = (c, \mu(c))$, де $c \in [c_{H1}, c_{Hn}]$ та рівень пропозиції фірми $\bar{q} = (q, \mu(q))$.

Для досягнення компромісного вибору значення $\hat{w}$ з кожного інтервалу W^i , $i = \overline{1, n}$, можна запропонувати критерій Гурвица [2], який забезпечує компроміс між граничним оптимізмом і крайнім песимізмом:

$$\hat{w} = (1 - r)w_{\min} + rw_{\max},$$

де r - коефіцієнт, що характеризує схильність ОПР до ризику. Але метод Гурвица має той недолік, що не враховує всього інтервалу W^i . Тому, задається функція належності $\mu'(w')$, $1 \geq \mu'(w') \geq 0$, $i = \overline{1, n}$, у вигляді експертних рекомендацій на ціну i -го ресурсу.

Процедура формування рівня λ та узгодження інтервалу зміни i -ї ціни і обсягу видатків аналогічна процедурі, для моделі максимізації прибутку фірми.

Для заданого рівня λ отримаємо наступну задачу опуклого програмування:

$$F(x) \rightarrow \max, xw \leq \bar{c}, w \in L_\lambda(w), \quad (8)$$

$$x = (x_i)_{i=1,n}, \bar{c} \geq 0.$$

Необхідно здійснити раціональний вибір вектора $x \in R_+^n$, який максимізує задану виробничу функцію.

Аналізуючи процедуру знаходження розв'язку для моделі (2) матимемо:

1. Розв'язання нечіткої задачі (8) зводиться до розв'язку p (по кількості λ рівнів) звичайних задач, які розв'язуються незалежно методом Лагранжа.
2. Розв'язком нечіткої задачі вважатимемо нечітку множину з функцією належності, утворену лініями рівня для кожної компоненти розв'язку цих p задач.

3. Збільшення рівня λ приводить до погіршення значення критерія $F(x)$, так як скорочується інтервал $L_\lambda(w)$, $i = \overline{1, n}$.

Пошук компромісного розв'язку задачі (8) знаходиться розв'язанням наступної трьохкритеріальної задачі:

$$\begin{aligned} f_1 &= P_\lambda \rightarrow \max, \\ f_2 &= \Delta L_\lambda = L_{\max}(x, P, \alpha) - L_{\min}(x, P, \alpha) \rightarrow \min, \\ f_3 &= L_\lambda(x, P, \alpha) \rightarrow \max, \\ x &\geq 0, \quad 0 \leq P \leq 1. \end{aligned} \quad (9)$$

де $L_\lambda(x, P, \alpha) = F(x) + \alpha(xw - \bar{c})$ - функція Лагранжа для задачі (8).

Алгоритм для знаходження розв'язку задачі (9) аналогічний як і для задачі (3) з застосуванням методу послідовних поступок.

Таким чином, запропоновані нечіткі моделі поведінки однопродуктової фірми, котрі зводяться до трьохкритеріальної детермінованої задачі, для розв'язання якої застосовується модифікований метод послідовних поступок. Особа, що приймає рішення аналізує величину інтервала оптимальних значень прибутку і відповідно значень об'єму випуску продукції і мінімальних витрат в залежності від ступеня достовірності інтервала й задає поступки на критерії достовірності і величини інтервалу.

Список використаних джерел

1. Пономаренко О.І. *то ін.* Мікроекономіка. - Київ: Вища школа, 2004. - 262с.
2. Волошин О.Ф., Машченко С.О. Теорія прийняття рішень. - К.: ВПЦ "Київський університет", 2006. - 304с.
3. Зайченко Ю.П. Нечёткие модели и методы в интеллектуальных системах. - Киев: Киевский политехнический институт, 2008. - 344с.
4. Орловский С.А. Проблемы принятия решений при нечеткой исходной информации. - Москва: Наука, 1981. - 206с.

Надійшла до редколегії 05.06.09

УДК 518.12

Мирослава І. Глебена, викладач,
Григорій Г. Цегелик, д.ф.-м.н., професор.

Чисельний метод відшукування абсолютного екстремуму негладких і розривних функцій двох дійсних змінних.

В роботі запропоновано чисельний метод відшукування абсолютного екстремуму довільних функцій двох дійсних змінних. В основі цього методу лежить ідея проектування поверхні, яка досліджується на координатній площині.

Ключові слова: методи оптимізації, мажоранта та діаграма Ньютона.

E-mail: kafmiser@franko.lviv.ua, HlebenaM@gmail.com.

Статтю представив доктор фіз.-мат. наук, професор Хусаїнов Д.Я.

Вступ

Відшукування екстремуму негладких і розривних функцій є важливою і складною математичною проблемою [1,2]. Тому великий інтерес становить розробка чисельних методів, за допомогою яких можна було б знаходити абсолютний екстремум як неперервно-диференційованих, так і довільних негладких і розривних функцій.

Нами розглядається підхід до оптимізації негладких і розривних функцій, в основі якого лежить використання апарату неklasичних мажорант і діаграм Ньютона функцій заданих таблично. Підхід дає можливість розробляти алгоритми відшукування абсолютного екстремуму будь-якої функції як гладкої, так і негладкої та розривної.

В [3,4] побудовано чисельні методи типу покоординатного підйому відшукування абсолютного екстремуму недиференційованих функцій двох дійсних змінних, в основі якого лежить використання апарату неklasичних мажорант і діаграм Ньютона функцій однієї дійсної змінної [3] та двох [4], заданих таблично [5].

В роботі розглянемо побудову чисельного методу відшукування абсолютного екстремуму довільних функцій двох дійсних змінних, в основі якого лежить ідея проектування поверхні, яка досліджується, на координатній площині і використання методу відшукування абсолютного екстремуму функції однієї змінної.

1. Постановка задачі

Розглянемо функцію $z = f(x, y)$, визначену в

M. I. Hlebena, assistant,
H. H. Tsehelyk, D.Sci. (Phys.-Math.), Professor.

A numerical method of absolute extremum search for non-differential and discontinuous two real variables functions.

A numerical method of finding the absolute extremum for non-differential and discontinuous two real variables functions is suggested. The method is based on the projecting of the surface on the coordinate plain.

Key Words: optimization method, majorant and Newton diagram

деякій області $D = \{a \leq x \leq b, c \leq y \leq d\}$. При цьому вважаємо, що функція $f(x, y) > 0$ для всіх $(x, y) \in D$. Необхідно побудувати чисельний метод відшукування абсолютного максимуму функції $z = f(x, y)$ яка, взагалі кажучи, може бути довільною негладкою чи розривною функцією в D .

Оскільки при побудові чисельного методу використовуються поняття, пов'язані з апаратом неklasичних мажорант і діаграм Ньютона функцій, заданих таблично, та алгоритм відшукування абсолютного екстремуму функції однієї змінної, то спочатку зупинимось на цих питаннях.

2. Мажоранта та діаграма Ньютона функції, заданої таблично, та їх характеристики.

Розглянемо функцію дійсної змінної $y = f(x)$, яка задана своїми значеннями у деяких точках x_i ($i = 0, 1, \dots, n$): $f(x_i) = y_i$ ($i = 0, 1, \dots, n$).

Нехай $|y_i| = a_i \leq M$ ($i = 0, 1, \dots, n$), $a_n \cdot a_0 \neq 0$, де M – деяка стала.

Точка $P_i(x_i, -\ln a_i)$ з координатами $x = x_i$, $y = -\ln a_i$ в площині xOy називається точкою зображення значення функції $y = f(x)$ в точці $x = x_i$.

Припустимо, що точки зображення P_i значень функції $y = f(x)$ в точках x_i ($i = 0, 1, \dots, n$) в площині xOy побудовані. З кожної точки P_i проведемо напівпрямку в додатному напрямку осі

Оу, перпендикулярно до осі Ох. Множину точок цих напівпрямих позначимо через S , а її опуклу оболонку через $C(S)$. Для кожного $x \in [x_0, x_n]$ визначимо точку $B_x(x, \kappa_x)$, де $\kappa_x = \inf_{(x,y) \in C(S)} y$.

Множина точок $B_x(x, \kappa_x)$, $x \in [x_0, x_n]$, утворюють лінію δ_f , яка обмежує $C(S)$ знизу. Ця лінія є неперервною, опуклою ламаною лінією і її рівняння має вигляд $y = \kappa(x)$, $x \in [x_0, x_n]$.

де $\kappa(x) = \kappa_x$.

Ламана лінія δ_f , визначена на проміжку $[x_0, x_n]$, називається неklasичною діаграмою Ньютона функції $y = f(x)$ на цьому проміжку.

Діаграма Ньютона δ_f функції $y = f(x)$ має такі властивості:

- кожна вершина δ_f розміщена в одній із точок зображення P_i значення функції $y = f(x)$ в точці x_i ($i = 0, 1, \dots, n$);
- кожна точка зображення P_i ($i = 0, 1, \dots, n$) знаходиться на δ_f або вище неї.

Позначимо

$$M_f(x) = \exp(-\kappa(x)), \quad x \in [x_0, x_n].$$

Тоді для кожного x_i ($i = 0, 1, \dots, n$) виконується нерівність $|f(x_i)| = a_i \leq M_f(x_i)$. Із побудови δ_f випливає, що $-\ln|f(x_i)| \geq \kappa(x_i)$, або $|f(x_i)| \leq \exp(-\kappa(x_i)) = M_f(x_i)$. Крім того,

$$M_f(x_0) = |f(x_0)|, \quad M_f(x_n) = |f(x_n)|$$

Функція $y = M_f(x)$, визначена на проміжку $[x_0, x_n]$, називається неklasичною мажорантою Ньютона функції $y = f(x)$ на цьому проміжку.

Нехай $M_f(x_i) = T_i$ ($i = 0, 1, \dots, n$). Величини

$$R_i = \left(\frac{T_{i-1}}{T_i} \right)^{x_i - x_{i-1}} \quad (i = 1, 2, \dots, n; \quad R_0 = 0) \quad \text{і}$$

$$D_i = \frac{R_{i+1}}{R_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n-1; \quad D_0 = D_n = \infty)$$

називаються відповідно i -им числовим нахилом і i -им відхиленням діаграми Ньютона δ_f .

Якщо точка зображення P_i ($i = 0, 1, \dots, n$) знаходиться в вершині δ_f , то індекс i називається вершинним індексом, якщо ж на δ_f , то – діаграмним індексом δ_f . Індеси $i = 0$ та

$i = n$ відносяться до вершинних індесів. Множину всіх вершинних індесів позначимо через I , а множину діаграмних індесів – через G . Очевидно, $I \subset G$ і $T_i = a_i$ для всіх $i \in G$.

Нехай φ_i – кут між відрізком $B_{x_{i-1}}B_{x_i}$ діаграми Ньютона δ_f і додатним напрямком осі абсцис. Тоді кутовий коефіцієнт k_i відрізка $B_{x_{i-1}}B_{x_i}$ визначається за формулою

$$k_i = \frac{\kappa_{x_i} - \kappa_{x_{i-1}}}{x_i - x_{i-1}} = \frac{-\ln T_i + \ln T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} = \ln \left(\frac{T_{i-1}}{T_i} \right)^{x_i - x_{i-1}}$$

Тому $k_i = \ln R_i$. Звідси випливає, що

$$R_i = \exp(\lg \varphi_i), \quad D_i = \exp(\lg \varphi_{i+1} - \lg \varphi_i)$$

Якщо $\{i_k\}$ ($k = 1, 2, \dots, s; s \leq n$) – послідовність вершинних індесів δ_f , то

$$0 = R_0 = R_{i_1} < R_{i_2} < \dots < R_{i_s} = R_n;$$

$$R_{i_{k+1}} = R_{i_k+1} = \dots = R_{i_{k+1}-1};$$

$$D_i \geq 1 \quad (i = 0, 1, \dots, n); \quad D_{i_k} > 1 \quad (k = 1, 2, \dots, s)$$

Якщо p і q – два послідовні вершинні індеси δ_f , то мажоранта Ньютона $M_f(x)$ на проміжку $[x_p, x_q]$ виражається формулою

$$M_f(x) = \left(a_p^{x_q - x} a_q^{x - x_p} \right)^{x_q - x_p}.$$

Алгоритм відшукування абсолютного максимуму функції однієї змінної, який розглянемо нижче, використовує алгоритми відшукування зростаючої і спадної послідовності вершинних індесів і числових нахилів діаграми Ньютона.

3. Алгоритм відшукування зростаючої (спадної) послідовності вершинних індесів і числових нахилів діаграми Ньютона.

Припустимо, що за допомогою r кроків вже знайдені послідовні вершинні індеси $\{i_0, i_1, \dots, i_{r-1}\}$ де $0 = i_0 < i_1 < \dots < i_{r-1}$, і числові нахили $R_{i_0}, R_{i_1}, \dots, R_{i_{r-1}}$.

де $0 = R_0 < R_{i_1} < \dots < R_{i_{r-1}}$. Тоді на $(r+1)$ -му кроці

$$\text{знаходимо } R = \min_{i_{r-1} < i \leq n} \left(\frac{a_{i_{r-1}}}{a_i} \right)^{x_i - x_{i_{r-1}}}. \quad (1)$$

Визначаємо індекс i_r для якого в (1) досягається мінімум, і позначаємо його через i_r . Якщо мінімум в (1) досягається для декількох індесів $i_{r1}, i_{r2}, \dots, i_{rs}$, то i_r є більшим з них: $i_r = \max_{1 \leq k \leq s} i_{rk}$.

Покладасмо $R_{i_r} = R$.

Аналогічно розглядається випадок спадної послідовності вершинних індексів.

4. Алгоритм відшукування абсолютного максимуму довільної функції $f(x)$ на проміжку $[a, b]$.

Вважаємо, що $f(x) > 0$ для всіх $x \in [a, b]$. Якщо ця умова не виконується, то розглядаємо функцію $f(x) + C$, де C – довільна стала, така, що $f(x) + C > 0$ для всіх $x \in [a, b]$.

Виберемо на проміжку $[a, b]$ систему точок $x_0, x_1, \dots, x_n$, де $x_k = x_0 + kh$ ($k = 0, 1, \dots, n$), $x_0 = a$, $h = (b - a)/n$, і знайдемо значення функції $y = f(x)$ в цих точках. Нехай $f(x_i) = a_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

Алгоритм пошуку максимального значення функції складається з двох етапів. На першому етапі шукаємо початкову точку. На другому відбувається пошук екстремальної точки, використовуючи послідовність вершинних індексів і числових нахилів діаграми Ньютона для функції $f(x)$, заданої в точках x_k ($k = 0, 1, \dots, n$) (зростаючу або спадну).

Виберемо середній індекс із проміжку $[0, n]$. Нехай цим індексом буде $i = m$. Тоді знаходимо r_m^-, r_m^+, d_m за формулами [5]:

$$r_m^+ = \min_{1 \leq i \leq n-m} \left(\frac{a_m}{a_{m+i}} \right)^{\frac{1}{x_{m+i} - x_m}},$$

$$r_m^- = \max_{1 \leq i \leq m-1} \left(\frac{a_m}{a_{m-i}} \right)^{\frac{1}{x_m - x_{m-i}}},$$

$$d_m = \frac{r_m^+}{r_m^-}.$$

Можливі такі три випадки (теорема 4 із [6]):

1. $d_m > 1$. В цьому випадку за початковий вершинний індекс діаграми Ньютона беремо індекс $i = m$, початковою точкою буде точка $x = x_m$.
2. $d_m = 1$. Індекс $i = m$ є діаграмним індексом, але не вершинним.
3. $d_m < 1$. Індекс $i = m$ не належить множині діаграмних індексів.

Розглянемо перший випадок. Якщо $r_m^- \leq 1$ і $r_m^+ \geq 1$, то точку x_m приймаємо за точку абсолютного максимуму функції $y = f(x)$ і на цьому робота алгоритму завершується. Якщо $r_m^- < 1$ і $r_m^+ < 1$, то індекс $i = m$ беремо за

початковий вершинний індекс діаграми Ньютона, покладемо $R_m = r_m^-$ і на другому етапі шукаємо зростаючу послідовність вершинних індексів і числових нахилів діаграми Ньютона доти, доки для деякого індекса $i = k$ не виконається умова $R_k \leq 1$, $R_{k+1} \geq 1$ при $k < n$, або $R_k < 1$ при $k = n$. Тоді точку x_k приймаємо за точку абсолютного максимуму функції на проміжку $[a, b]$. Якщо $r_m^- > 1$ і $r_m^+ > 1$, то індекс $i = m$ беремо за початковий вершинний індекс діаграми Ньютона, покладемо $R_m = r_m^-$ і на другому етапі шукаємо спадну послідовність вершинних індексів і числових нахилів діаграми Ньютона доти, доки для деякого індекса $i = k$ не виконається умова $R_k \leq 1$, $R_{k-1} \geq 1$ при $k > 0$, або $R_{k-1} > 1$ при $k = 0$. Тоді точку x_k приймаємо за точку абсолютного максимуму функції на проміжку $[a, b]$.

Нехай має місце другий випадок. Якщо $r_m^- = r_m^+ = 1$, то точку x_m приймаємо за точку абсолютного максимуму функції $y = f(x)$. Якщо $r_m^- = r_m^+ < 1$, то шукаємо найбільший із індексів v , для якого досягається

$$\min_{v > m} \left(\frac{a_m}{a_v} \right)^{\frac{1}{x_v - x_m}}. \quad (3)$$

Якщо таким індексом є $v = r$, то за початкову точку приймемо x_r , індекс r беремо за початковий вершинний індекс діаграми Ньютона, покладемо $R_r = r_m^+$ і на другому етапі шукаємо зростаючу послідовність вершинних індексів і числових нахилів діаграми Ньютона доти, доки для деякого індекса $i = k$ не виконається умова $R_k \leq 1$, $R_{k+1} \geq 1$ при $k < n$, або $R_k < 1$ при $k = n$. Тоді точку x_k приймаємо за точку абсолютного максимуму функції на проміжку $[a, b]$. Якщо $r_m^- = r_m^+ > 1$, то шукаємо найменший із індексів v , для якого досягається

$$\max_{v < m} \left(\frac{a_v}{a_m} \right)^{\frac{1}{x_m - x_v}}. \quad (4)$$

Якщо таким індексом є $v = r$, то за початкову точку приймемо x_r , індекс r беремо за початковий вершинний індекс діаграми Ньютона, покладемо $R_r = r_m^+$ і на другому етапі шукаємо

спадну послідовність вершинних індексів і числових нахилів доти, доки для деякого індекса $i=k$ не виконається умова $R_k \leq 1$, $R_{k+1} \geq 1$ при $k > 0$, або $R_{k+1} > 1$ при $k=0$. Тоді точку x_k приймаємо за точку абсолютного максимуму функції $y=f(x)$.

У третьому випадку, якщо $r'_m < 1$, то максимальне значення функція $y=f(x)$ досягає на проміжку $[x_q; x_n]$, де q – найбільший з індексів v , для якого досягається мінімум в (3). Якщо $r'_m > 1$, то абсолютний максимум функції досягається на проміжку $[x_0; x_p]$, де p – найменший з індексів v , для якого досягається максимум в (4). Визначивши проміжок, на якому функція досягає свого найбільшого значення, для відшукування точки абсолютного максимуму використовуємо алгоритм, наведений в [7], або даний алгоритм.

У разі $r'_m > 1$ і $r'_m < 1$ знаходимо найменший з індексів v , для яких досягається максимум в (4), і найбільший з індексів v , для яких досягається мінімум в (3). Нехай цими індексами будуть відповідно $v=p$ і $v=q$. Тоді за початкову точку приймаємо x_p або x_q і використовуємо приведений алгоритм.

5. Метод розв'язування задачі.

Позначимо через S_1 і S_2 множини точок, які є проекцією поверхні $z=f(x,y)$ відповідно на площини xOz і yOz , а через $C(S_1)$ і $C(S_2)$ їх опуклі оболонки. Нехай $z=\varphi(x)$ і $z=\psi(y)$ – частини границь відповідно опуклих оболонок $C(S_1)$ і $C(S_2)$, які їх обмежують зверху. Очевидно, якщо $\max_{x \in [a,b]} \varphi(x)$ досягається в точці $x=\bar{x}$, а $\max_{y \in [c,d]} \psi(y)$ досягається в точці $y=\bar{y}$, то точка $(\bar{x}, \bar{y})$ є точкою абсолютного екстремуму функції $z=f(x,y)$. Для наближеного відшукування точки $(\bar{x}, \bar{y})$ поступимо так.

В площині xOz і yOz побудуємо апроксимуючі функції для $z=\varphi(x)$ і $z=\psi(y)$. Для цього в області D побудуємо прямокутну сітку:

$$x=x_i=a+ih, \quad i=0,1,\dots,n, \quad h=(b-a)/n,$$

$$y=y_j=c+jk, \quad j=0,1,\dots,m, \quad k=(d-c)/m,$$

і розглянемо множину точок $(x_i, y_j) \in D$. Тоді для кожного фіксованого $x=x_i$ знайдемо

$$\bar{z}_i = \max_{0 \leq j \leq m} f(x_i, y_j) \quad \text{і для кожного фіксованого } y=y_j \text{ знайдемо } \bar{z}_j = \max_{0 \leq i \leq n} f(x_i, y_j).$$

В площині xOz і yOz побудуємо опуклі оболонки відповідно множин точок $\bar{z}_0, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n$ і $\bar{z}_0, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_m$. Частини границь цих опуклих оболонок, які обмежують їх зверху, позначимо відповідно через $z=\bar{\varphi}(x)$ і $z=\bar{\psi}(y)$. Тоді функції $z=\bar{\varphi}(x)$ і $z=\bar{\psi}(y)$ будуть апроксимуючими функціями відповідно для $z=\varphi(x)$ і $z=\psi(y)$. Тому якщо $\bar{x}_0 = \max_{x \in [a,b]} \bar{\varphi}(x)$, $\bar{y}_0 = \max_{y \in [c,d]} \bar{\psi}(y)$, то точка $(\bar{x}_0, \bar{y}_0)$ буде наближеною точкою до екстремальної точки $(\bar{x}, \bar{y})$.

Для знаходження точок абсолютного максимуму функцій $z=\bar{\varphi}(x)$ і $z=\bar{\psi}(y)$, які задані відповідно таблицями своїх значень $\bar{z}_0, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n$ і $\bar{z}_0, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_m$ можна використати алгоритм відшукування абсолютного екстремуму довільної функції однієї дійсної змінної, наведений вище.

У випадку розривних функцій вимагається, щоб точки розриву не потрапляли до точок, за якими будуються апроксимуючі функції.

6. Приклади

6.1. Розглянемо задачу відшукування абсолютного максимуму функції

$$f(x,y) = -\sqrt{|x \cdot y|} - x + 100$$

Графік цієї функції зображено на рис.1.

$D = \{-2 \leq x \leq 2, -2 \leq y \leq 2\}$. Покладемо $h=0.1$ і для кожного $x_i = -2 + 0.1 \cdot i$, $i=0,1,\dots,40$ знайдемо значення $\bar{z}_i$. В результаті одержимо таблицю значень функції $z=\bar{\varphi}(x)$ (табл.1).

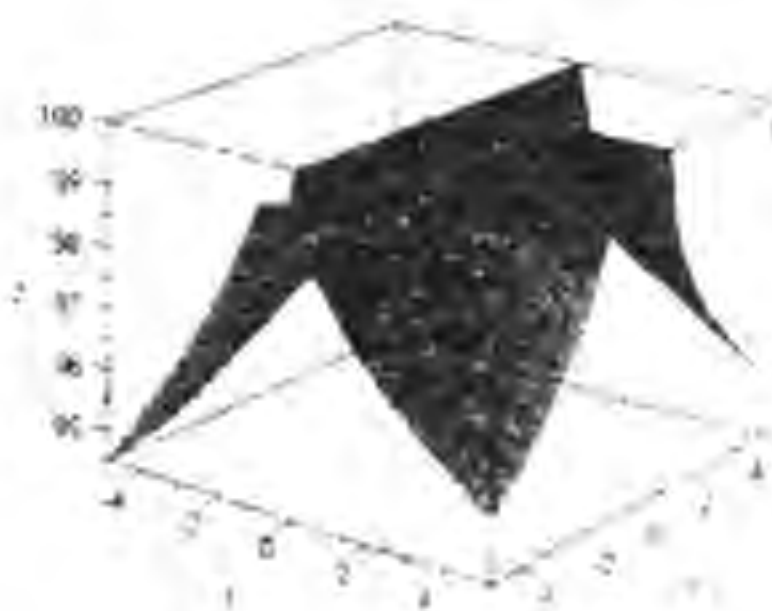


Рис.1.

Тоді за алгоритмом [6] шукаємо абсолютний максимум функції $z=\bar{\varphi}(x)$, яка представлена

таблицею своїх значень. Одержуємо точку $x_{20} = 0$ абсолютного максимуму функції.

Апроксимуючою функцією $z = \tilde{\varphi}(y)$ є пряма $z = 100$, тобто максимум функції $z = \tilde{\varphi}(y)$ досягається в будь-якій точці $y \in [-2, 2]$. Отже, абсолютний максимум функції $f(x, y) = 100$.

6.2. Знайти абсолютний максимум функції [1].

$$f(x, y) = \begin{cases} -\sqrt{|x \cdot y|} + 1, & x \in \{x: x < 0, y < 0\}, \\ -\sqrt{|x \cdot y|} & x \notin \{x: x < 0, y < 0\}. \end{cases}$$

Графік цієї функції зображений на рис.2.

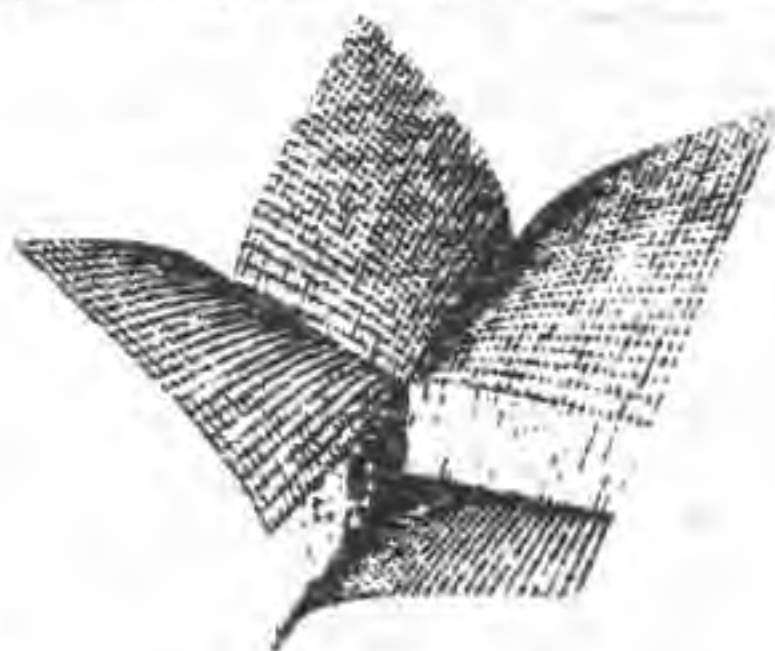


Рис.2.

Для того, щоб виконувалась умова невід'ємності значень функції, розглянемо функцію $f(x, y) + 50$ в прямокутній області $D = \{-2 \leq x \leq 3, -3 \leq y \leq 3\}$.

Покладемо $h = 0,1$ і для кожного $x_i = -2 + 0,1 \cdot i$, $i = 0, 1, \dots, 50$, знайдемо значення $\tilde{z}_i$. В результаті одержимо таблицю значень функції $z = \tilde{\varphi}(x)$ (табл.2).

Тоді за алгоритмом [4] шукаємо абсолютний максимум функції $z = \tilde{\varphi}(x)$, яка представлена таблицею своїх значень. Одержуємо точку $x_{19} = -0,1$ абсолютного максимуму функції.

Аналогічно, покладемо $k = 0,1$ і для кожного $y_j = -3 + 0,1 \cdot j$, $j = 0, 1, \dots, 60$, знайдемо значення $\tilde{z}_j$. В результаті одержимо таблицю значень функції $z = \tilde{\varphi}(y)$ (табл.3). Точкою абсолютного максимуму є $y_{29} = -0,1$. Уточнюючи одержану точку $(-0,1; -0,1)$, маємо точку $(-0,00001; -0,00001)$ і абсолютний максимум функції $f(x, y) = 0,99999$.

6.3. Знайти абсолютний максимум функції

$$f(x, y) = 4 \left| \sin(x) \cos(y) e^{\cos((x^2 + y^2)/\pi)} \right|.$$

Графік якої зображено на рис.3

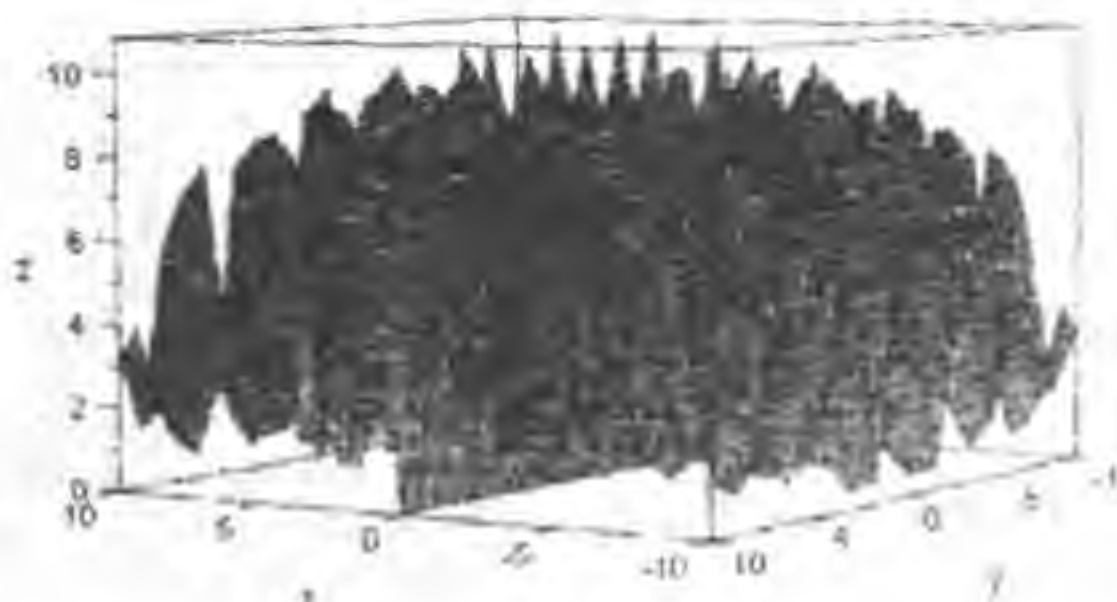


Рис.3.

Шукатимемо абсолютний максимум функції $f(x, y) + 5$ в $D = \{-5 \leq x \leq 35,4, -5 \leq y \leq 35,4\}$.

Приймемо точку $(-5; -5)$ за початкове наближення і покладемо $h = 0,1$. Застосовуючи наведений алгоритм одержимо точку $(-1,6; 0)$. Для уточнення одержаної точки розглянемо область

$$D = \{-1,7 \leq x \leq 2,34, -1,7 \leq y \leq 2,34\}$$

з кроком $h = 0,01$. В результаті застосування алгоритму одержимо точку $(-1,57; 0)$, яку приймаємо з точністю $h = 0,01$ за точку максимуму. Отже $\max f(x, y) \approx 10,8723$ з точністю $h = 0,01$.

Висновок.

Побудовано новий чисельний метод відшукування абсолютного екстремуму довільних негладких і розривних функцій, в основі якого лежить проектування поверхні, яка досліджується, на координатні площини і використання методу відшукування абсолютного екстремуму функції однієї змінної, запропонованого в [4]. Метод може бути узагальнений на випадок функцій багатьох змінних.

Список використаних джерел

1. Батухтин В.Д. и др. Оптимизация разрывных функций. - М.: Наука. 1984.
2. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. - К.: Наук. думка, 1979.
3. Глебена М.І., Цегелик Г.Г. Чисельний метод відшукування екстремуму недиференційованих функцій двох дійсних змінних // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інформ. - 2007. - Вип. 14-15. - С.18-21.

Таблиця 1

i	x_i	$\bar{z}_i$	i	x_i	$\bar{z}_i$	i	x_i	$\bar{z}_i$	i	x_i	$\bar{z}_i$
0	-2	98.585	10	-1	99	20	0	100	30	1	100
1	-1.9	98.6216	11	-0.9	99.05132	21	0.1	100	31	1.1	100
2	-1.8	98.65836	12	-0.8	99.10557	22	0.2	100	32	1.2	100
3	-1.7	98.69616	13	-0.7	99.16334	23	0.3	100	34	1.4	100
4	-1.6	98.73509	14	-0.6	99.2254	24	0.4	100	35	1.5	100
5	-1.5	98.77526	15	-0.5	99.2928	25	0.5	100	36	1.6	100
6	-1.4	98.81678	16	-0.4	99.36754	26	0.6	100	37	1.7	100
7	-1.3	98.85982	17	-0.3	99.45228	27	0.7	100	38	1.8	100
8	-1.2	98.90455	18	-0.2	99.55279	28	0.8	100	39	1.9	100
9	-1.1	98.95119	19	-0.1	99.68377	29	0.9	100	40	2	100

Таблиця 2

i	x_i	$\bar{z}_i$	i	x_i	$\bar{z}_i$	i	x_i	$\bar{z}_i$	i	x_i	$\bar{z}_i$
0	-2	50.5528	13	-0.7	50.7354	26	0.6	50	39	1.9	50
1	-1.9	50.5641	14	-0.6	50.755	27	0.7	50	40	2	50
2	-1.8	50.5757	15	-0.5	50.7764	28	0.8	50	41	2.1	50
3	-1.7	50.5877	16	-0.4	50.8	29	0.9	50	42	2.2	50
4	-1.6	50.6	17	-0.3	50.8267	30	1	50	43	2.3	50
5	-1.5	50.6127	18	-0.2	50.8585	31	1.1	50	44	2.4	50
6	-1.4	50.6258	19	-0.1	50.9	32	1.2	50	45	2.5	50
7	-1.3	50.6394	20	0	50	33	1.3	50	46	2.6	50
8	-1.2	50.6535	21	0.1	50	34	1.4	50	47	2.7	50
9	-1.1	50.6683	22	0.2	50	35	1.5	50	48	2.8	50
10	-1	50.6837	23	0.3	50	36	1.6	50	49	2.9	50
11	-0.9	50.7	24	0.4	50	37	1.7	50	50	3	50
12	-0.8	50.7171	25	0.5	50	38	1.8	50			

Таблиця 3

j	y_j	$\bar{z}_j$	j	y_j	$\bar{z}_j$	j	y_j	$\bar{z}_j$	j	y_j	$\bar{z}_j$	j	y_j	$\bar{z}_j$
0	-3	50.4522	13	-1.7	50.5876	26	-0.4	50.8	39	0.9	50	52	2.2	50
1	-2.9	50.4614	14	-1.6	50.6	27	-0.3	50.8267	40	1	50	53	2.3	50
2	-2.8	50.4708	15	-1.5	50.6127	28	-0.2	50.8585	41	1.1	50	54	2.4	50
3	-2.7	50.4804	16	-1.4	50.6258	29	-0.1	50.9	42	1.2	50	55	2.5	50
4	-2.6	50.49	17	-1.3	50.6394	30	0	50	43	1.3	50	56	2.6	50
5	-2.5	50.5	18	-1.2	50.6535	31	0.1	50	44	1.4	50	57	2.7	50
6	-2.4	50.5101	19	-1.1	50.6683	32	0.2	50	45	1.5	50	58	2.8	50
7	-2.3	50.5204	20	-1	50.6837	33	0.3	50	46	1.6	50	59	2.9	50
8	-2.2	50.5309	21	-0.9	50.7	34	0.4	50	47	1.7	50	60	3	50
9	-2.1	50.5417	22	-0.8	50.7171	35	0.5	50	48	1.8	50			
10	-2	50.5527	23	-0.7	50.7354	36	0.6	50	49	1.9	50			
11	-1.9	50.5641	24	-0.6	50.755	37	0.7	50	50	2	50			
12	-1.8	50.5757	25	-0.5	50.7763	38	0.8	50	51	2.1	50			

4. Глебена М.І., Цегелик Г.Г. Чисельний метод відшукування екстремуму негладких функцій двох дійсних змінних // Наук. зб. "Прикладні проблеми механіки і математики". - 2007. - Вип. 5. - С. 17-21.
5. Цегелик Г.Г. Теория мажорант и диаграмм Ньютона функций, заданных таблично, и ее приложение // Укр. мат. журн. - 1989. Т.41. - №9. - С.1273-1276.
6. Глебена М.І., Цегелик Г.Г. Модифікований чисельний метод відшукування абсолютного екстремуму // Наук. вісник УжНУ. Сер. матем. і інформ. - 2008. - Вип. 16. - С.57-61.

7. Глебена М.І., Цегелик Г.Г. Чисельний метод мажорантного типу відшукування екстремуму негладких і розривних функцій // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інформ. - 2006. - Вип. 12-13. - С. 55-58.
8. Цегелик Г.Г., Федчишин Н.В. Апарат неklasичних мажорант і діаграм Ньютона функцій двох дійсних змінних, заданих таблично // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. мех.-мат. 1998. Вип.50. - С.209-211.

Надійшла до редколегії 10.03.2009

УДК 519.8

Горбачук В.М., к.ф.-м.н., с.н.с., Гаркуша^{*} Н.І.,
к.е.н., с.н.с.

Багаторівневі моделі та методи
обчислюваної загальної рівноваги

Для класичної задачі економічної рівноваги систематично виведено повний набір одночасних рівнянь обчислюваної загальної рівноваги. За певних припущень, доведено теорему про еквівалентність соціального оптимуму і теоретичної економічної рівноваги.

Ключові слова: багаторівнева модель, обчислювана загальна рівновага, еластичність Армінгтона, соціальний оптимум.

V. M. Gorbachuk, Ph.D. (Physics and Mathematics), N.I. Garkusha^{*}, Ph.D. (Economics)

Multilevel models and methods of computable general equilibrium

The complete set of simultaneous equations for computable general equilibrium is derived for a classic problem of economic equilibrium. Under some assumptions, the theorem on equivalency of social optimum and theoretical economic equilibrium has been proved.

Key words: multilevel model, computable general equilibrium, Armington elasticity, social optimum.

^{*}E-mail: GorbachukWasy1@netscape.net, NGarkusha@unicyb.kiev.ua

Статтю представив проф., док. ф.-м.н. Хусаїнов Д.Я.

Теоретична база загальної економічної рівноваги розроблена лауреатом Нобелівської премії 1972 р. Ерроу (Arrow) і лауреатом Нобелівської премії 1983 р. Дебре (Debreu) [1]. З 1970-х рр. за ініціативою Світового банку ця теорія втілюється у програмному забезпеченні GAMS (general algebraic modeling system) [2]. З 1980-х рр. теорія загальної економічної рівноваги застосовується для розв'язання вітчизняних прикладних задач [3–12]. Сучасну прикладну теорію загальної рівноваги називають теорією обчислюваної загальної рівноваги (computable general equilibrium, CGE).

Розглянемо економіку, що випускає I товарів і використовує H факторів. Припустимо, представницьке домогосподарство купує таку кількість $X_i^p \geq 0$ кожного товару $i \in I$, щоб максимізувати свою функцію Кобба–Дугласа для корисності (utility)

$$U = \prod_i (X_i^p)^{\alpha(i)} \rightarrow \max \quad (1)$$

за рівності загальних витрат і загальних доходів

$$\sum_i P_i^d X_i^p = \sum_h R_h F_h, \quad (2)$$

де

$$\alpha(i) \geq 0, \sum_i \alpha(i) = 1; \quad (3)$$

$0 \leq P_i^d$ – (споживча) ціна (price) попиту вітчизняного (domestic) товару i , за якою домогосподар-

ства купують товар i у фірм; $0 \leq R_h$ – ринкова ціна (rent) фактору $h \in H$, за якою домогосподарства продають фактор h фірмам; F_h – екзогенна кількість первинного фактора (factor) h у наявності домогосподарства (household), яка вважається повністю використаною фірмами для виробництва товарів. Нехай ціни попиту і пропозиції кожного фактора однакові.

Умови першого порядку для максимізації лагранжіана задачі (1)–(3)

$$L(X_i^p, \lambda) = U + \lambda \left(\sum_h R_h F_h - \sum_i P_i^d X_i^p \right)$$

мають вид:

$$0 = \frac{\partial L}{\partial X_i^p} = \frac{\alpha(i)}{X_i^p} U - \lambda P_i^d \quad \forall i \in I; \quad (4)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \lambda} = \sum_h R_h F_h - \sum_i P_i^d X_i^p. \quad (5)$$

З рівнянь (4) випливає

$$\frac{\alpha(i)}{X_i^p P_i^d} = \frac{\lambda}{U} \quad \forall i \in I, \quad (6)$$

$$X_i^p P_i^d = \frac{\alpha(i) U}{\lambda} \quad \forall i \in I.$$

Підставляючи останні рівності в рівняння (5) та враховуючи співвідношення (3) і (6), отримуємо функцію попиту представницького

домогосподарства на кожний товар i як внутрішній розв'язок задачі (1)–(3):

$$\begin{aligned} \sum_h R_h F_h &= \sum_i P_i^d X_i^p = \sum_i \frac{\alpha(i)U}{\lambda} = \\ &= \frac{U}{\lambda} \sum_i \alpha(i) = \frac{U}{\lambda} = \frac{X_i^p P_i^d}{\alpha(i)} \quad \forall i \in I, \\ X_i^p &= \frac{\alpha(i)}{P_i^d} \sum_h R_h F_h \quad \forall i \in I \end{aligned} \quad (7)$$

Нехай довільна фірма $j \in J$ купує

Нехай довільна фірма $j \in I$ купує таку кількість $F_{hj} \geq 0$ кожного фактора $h \in H$, щоб максимізувати свою функцію прибутку

$$\pi_j = P_j^s Z_j - \sum_h R_h F_{hj} \rightarrow \max, \quad (8)$$

де випуск фірми j задається виробничою функцією Кобба–Дугласа

$$Z_j = b_j \prod_h (F_{hj})^{\beta(h,j)}, \quad (9)$$

$$\beta(h,j) \geq 0, \quad \sum_j \beta(h,j) = 1; \quad (10)$$

b_j – масштабуючий параметр; P_j^s – ціна пропозиції (supply) товару j , за якою фірми продають товар j домогосподарствам.

Умови першого порядку для задачі (8)–(10) дають функцію попиту кожної фірми j на кожний фактор h як внутрішній розв'язок:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \pi_j}{\partial F_{hj}} = \frac{P_j^s \beta(h,j)}{F_{hj}} Z_j - R_h \quad \forall h \in H, \quad \forall j \in I, \\ F_{hj} &= \frac{\beta(h,j)}{R_h} P_j^s Z_j \quad \forall h \in H, \quad \forall j \in I. \end{aligned} \quad (11)$$

Ринкова рівновага означає рівність попиту та пропозиції для товарів

$$X_i^p = Z_i \quad \forall i \in I \quad (12)$$

і для первинних факторів

$$F_h = \sum_j F_{hj} \quad \forall h \in H, \quad (13)$$

а також рівність цін попиту та пропозиції для товарів

$$P_i^d = P_i^s \quad \forall i \in I, \quad (14)$$

де не враховуються непрямі податки.

Модель ринкової рівноваги включає незалежні ендегенні змінні X_i^p , F_{hj} , F_h , Z_i , P_i^d , P_i^s , $i \in I$, $h \in H$, і стільки ж одночасних нелінійних рівнянь (7), (9), (11)–(14). Одне з цих рівнянь надлишкове в силу закону Вальраса (Walras) про рівність нулю надлишкового попиту за будь-яких цін [13]. Для вибору масштабу цін (numeraire) необхідно вибрати товар, ціну якого будемо вважати рівною 1. Розв'язок системи рівнянь (7), (9), (11)–(14) називають загальною рівновагою.

Теорема 1. Розв'язок задачі максимізації соціального оптимуму $\frac{U}{\lambda}$ за умов (3), (9), (12), (13) задовольняє також рівнянням (7), (11), (14).

Умови першого порядку для максимізації лагранжіана цієї задачі

$$\begin{aligned} L(\{X_i^p\}, \{Z_i\}, \{F_{hj}\}, \{\delta_j\}, \{\theta_i\}, \{\epsilon_h\}) = \\ = \frac{U}{\lambda} + \sum_j \delta_j \left(b_j \prod_h (F_{hj})^{\beta(h,j)} - Z_j \right) + \\ + \sum_i \theta_i (Z_i - X_i^p) + \sum_h \epsilon_h \left(F_h - \sum_j F_{hj} \right) \end{aligned}$$

мають вид:

$$0 = \frac{\partial L}{\partial X_i^p} = \frac{\alpha(i)U}{X_i^p \lambda} - \theta_i \quad \forall i \in I; \quad (15)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial Z_i} = -\delta_i + \theta_i \quad \forall i \in I; \quad (16)$$

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial L}{\partial F_{hj}} &= \frac{\delta_j b_j \beta(h,j)}{F_{hj}} \prod_h (F_{hj})^{\beta(h,j)} - \epsilon_h = \\ &= \frac{\delta_j \beta(h,j)}{F_{hj}} Z_j - \epsilon_h \quad \forall h \in H, \quad \forall j \in I; \end{aligned} \quad (17)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \delta_j} = b_j \prod_h (F_{hj})^{\beta(h,j)} - Z_j \quad \forall j \in I; \quad (18)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \theta_i} = Z_i - X_i^p \quad \forall i \in I; \quad (19)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \epsilon_h} = F_h - \sum_j F_{hj} \quad \forall h \in H. \quad (20)$$

Умови (18), (19), (20) збігаються з рівняннями (9), (12), (13) відповідно.

Інтерпретуючи множники Лагранжа θ_i , δ_i , ε_h як неявні (тіньові) ціни P_i^d , P_i^s , R_h відповідно, умови (15), (17), (16) збігаються з рівняннями (7), (11), (14) відповідно. Теорему 1 доведено.

Дана модель максимізації соціального оптимуму має два недоліки. По-перше, оскільки в неї неможливо ввести обмеження для цін або випусків товарів, то неможливо врахувати оподаткування, цінове регулювання і т. д. По-друге, в моделі важко агрегувати функцію соціального оптимуму для гетерогенних за перевагами й доходами домогосподарств [14, 15].

Тому модель (7), (9), (11)–(14) замкнутої економіки служить прототипом багаторівневої моделі для емпіричного аналізу:

1) на верхньому рівні (рівні 1) представницьке домогосподарство максимізує свою корисність, яка залежить від множин споживчих товарів $\{X_j^p\}$, інвестиційних товарів $\{X_j^i\}$, урядових товарів $\{X_j^g\}$, проміжних товарів $\{X_{ij}\}$;

2) на середньому рівні 2 уряд регулює ринки імпортних товарів $\{M_j\}$, експортних товарів $\{E_j\}$, вітчизняних товарів $\{D_j\}$;

3) на нижньому рівні 3 фірми створюють додану вартість і здійснюють випуск вітчизняних товарів, постачають складені імпортні та експортні товари, максимізуючи свої прибутки, використовуючи первинні фактори від домогосподарств і зважаючи на урядові регулювання.

Подібно до задачі (8)–(10), на нижній стадії (bottom stage) виробництва довільна фірма j купує таку кількість F_h кожного фактора h і випускає таку додану вартість Y_j , щоб максимізувати прибуток

$$\pi_j^b = P_j^b Y_j - \sum_h R_h F_h \rightarrow \max, \quad (21)$$

де: додана вартість (yield) є складеним первинним фактором

$$Y_j = b_j \prod_h (F_h)^{\beta(h,j)}; \quad (22)$$

P_j^b – ціна доданої вартості фірми j .

На верхній стадії (top stage) виробництва фірма j платить за додану вартість Y_j на нижній стадії, купує проміжний вхід X_{ij} товару i й

обирає такий валовий випуск Z_j , щоб максимізувати свій прибуток

$$\pi_j^t = P_j^t Z_j - P_j^b Y_j - \sum_i P_i^g X_{ij} \rightarrow \max, \quad (23)$$

де: валовий випуск задається виробничою функцією Леонтьєва

$$Z_j = \min \left\{ \frac{X_{1j}}{a_{1j}}, \frac{X_{2j}}{a_{2j}}, \dots, \frac{X_{ij}}{a_{ij}}, \frac{Y_j}{a_{y,j}} \right\}; \quad (24)$$

a_{ij} – мінімальна потреба товару i на одиницю валового випуску $Z_j = 1$; $a_{y,j}$ – мінімальна потреба доданої вартості на одиницю валового випуску $Z_j = 1$; P_i^g – ціна проміжного товару i .

Для задачі (21), (22) аналогічно умові (11) отримуємо

$$F_h = \frac{\beta(h,j)}{R_h} P_j^b Y_j, \quad \forall h \in H, \quad \forall j \in I. \quad (25)$$

Оскільки цільова функція задачі (23), (24) недиференційована, то замість функції (24) можна використати функцію з постійною еластичністю заміщення (constant elasticity of substitution, CES) [13], яка узагальнює виробничі функції Кобба–Дугласа та Леонтьєва: при наближенні еластичності до 0 CES-функція прямує до функції Леонтьєва. Через двоїсту задачу до задачі (23), (24) можна отримати умови оптимальності

$$X_{ij} = a_{ij} Z_j, \quad \forall i \in I, \quad (26)$$

$$Y_j = a_{y,j} Z_j, \quad \forall j \in I. \quad (27)$$

Тоді при досконалій конкуренції і вільному вході в ринок верхньої стадії

$$\begin{aligned} 0 = \pi_j^t &= P_j^t Z_j - P_j^b Y_j - \sum_i P_i^g X_{ij} = \\ &= P_j^t Z_j - P_j^b a_{y,j} Z_j - \sum_i P_i^g a_{ij} Z_j, \quad \forall j \in I. \end{aligned}$$

$$P_j^t = a_{y,j} P_j^b + \sum_i a_{ij} P_i^g, \quad \forall j \in I. \quad (28)$$

Припустимо, уряд (government) накладає непрямий податок як частку τ_j від фізичної кількості (ad quantum tax) товару j

$$T_j = \tau_j Z_j, \quad \forall j \in I, \quad (29)$$

збирає сумарні податки $\sum_i T_i$ і здійснює

заощадження (savings) S^s . Уряд купує товар i для споживання в (змінній) кількості

$$X_i^s = \frac{\mu(i)}{P_i^s} \left(\sum_i T_i - S^s \right) \quad \forall i \in I, \quad (30)$$

$$\mu(i) \geq 0, \quad \sum_i \mu(i) = 1. \quad (31)$$

Країна в цілому купує товар i для інвестицій (investments) у кількості

$$X_i^v = \frac{\chi(i)}{P_i^v} (S^p + S^s + HS^f) \quad \forall i \in I, \quad (32)$$

$$\chi(i) \geq 0, \quad \sum_i \chi(i) = 1, \quad (33)$$

де: S^p – приватні (private) заощадження; S^f – заощадження в іноземній (foreign) валюті (дефіцит поточного балансу в балансі платежів); H – обмінний курс (exchange rate) іноземної валюти в національну валюту. Інвестиції використовуються для таблиць витрати-випуск і воакування динаміки.

Мала відкрита економіка не впливає на експортну (export) ціну P_i^e та імпорتنу (import) ціну P_i^m товару i в іноземній валюті:

$$P_i^e = HP_i^{fe} \quad \forall i \in I, \quad (34)$$

$$P_i^m = HP_i^{fm} \quad \forall i \in I, \quad (35)$$

де P_i^e та P_i^m – відповідно експортна та імпортна ціна товару i в національній валюті. Баланс платежів задається рівністю

$$S^f + \sum_i P_i^{fe} E_i = \sum_i P_i^{fm} M_i \quad \forall i \in I, \quad (36)$$

де E_i та M_i – кількість відповідно експорту та імпорту товару i .

Довільна фірма i купує кількість M_i імпорту товару i , купує кількість D_i вітчизняного товару i й випускає кількість

$$Q_i = \gamma_i (\delta_{mi} M_i)^{\eta(i)} + \delta_{di} (D_i)^{\eta(i)} \quad (37)$$

складеного імпортного товару i , щоб максимізувати свій прибуток

$$\pi_i^Q = P_i^Q Q_i - P_i^m M_i - P_i^d D_i, \quad (38)$$

де: P_i^Q – ціна складеного імпортного товару i ; γ_i – параметр виробничої CES-функції складеного імпортного товару i :

$$\delta_{mi}, \delta_{di} \geq 0; \quad \delta_{mi} + \delta_{di} = 1; \quad \eta(i) = \frac{\sigma(i) - 1}{\sigma(i)};$$

$$\sigma(i) = \frac{\frac{d(M_i / D_i)}{M_i / D_i}}{\frac{d(P_i^m / P_i^d)}{P_i^m / P_i^d}};$$

$\sigma(i)$ – еластичність Армінгтона [16] заміщення імпортом вітчизняного виробництва.

Довільна фірма i трансформує кількість складеного експортного товару i

$$Z_i = \theta_i [\xi_{ei} (E_i)^{\phi(i)} + \xi_{di} (D_i)^{\phi(i)}]^{\frac{1}{\phi(i)}}, \quad (39)$$

платить за нього, випускаючи кількість E_i експорту товару i та кількість D_i вітчизняного товару i так, щоб максимізувати свій прибуток

$$\pi_i^Z = P_i^e E_i + P_i^d D_i - (\tau_i + P_i^e) Z_i, \quad (40)$$

де: θ_i – параметр виробничої функції складеного товару i ;

$$\xi_{ei}, \xi_{di} \geq 0; \quad \xi_{ei} + \xi_{di} = 1; \quad \phi(i) = \frac{\psi(i) + 1}{\psi(i)};$$

$$\psi(i) = \frac{\frac{d(E_i / D_i)}{E_i / D_i}}{\frac{d(P_i^e / P_i^d)}{P_i^e / P_i^d}};$$

$\psi(i)$ – еластичність Армінгтона заміщення експортом вітчизняного виробництва

Виробничі функції (37) та (39) відбивають те, що товар i може одночасно імпортуватися та експортуватися: експортний товар i та імпорتنний товар i відрізняються, хоча відносяться до однієї статистичної категорії. Докладна статистична класифікація можлива лише теоретично [1]. Одиницю вітчизняного товару i можна замінити меншою кількістю імпортного товару i згідно функції (37) та більшою кількістю експортного товару i згідно функції (39). Аналогічно до CES-функції (37) виробнича функція (39) має постійну еластичність

трансформації (constant elasticity of transformation, CET).

Умови першого порядку максимізації по M_i функції (38) мають вид

$$0 = \frac{\partial \pi_i^Q}{\partial M_i} = P_i^Q \frac{\partial Q_i}{\partial M_i} - P_i^m,$$

де в силу залежності (37) маємо

$$\frac{\partial Q_i}{\partial M_i} = \frac{\gamma_i}{\eta(i)} [\delta_{mi}(M_i)^{\eta(i)} + \delta_{di}(D_i)^{\eta(i)}]^{\frac{1-\eta(i)}{\eta(i)}} \times$$

$$\times \delta_{mi} \eta(i) (M_i)^{\eta(i)-1},$$

$$\left(\frac{Q_i}{\gamma_i}\right)^{\eta(i)} = \delta_{mi}(M_i)^{\eta(i)} + \delta_{di}(D_i)^{\eta(i)},$$

$$\frac{P_i^m}{P_i^Q} = \frac{\partial Q_i}{\partial M_i} = \gamma_i \delta_{mi}(M_i)^{\eta(i)-1} \left(\frac{Q_i}{\gamma_i}\right)^{1-\eta(i)} =$$

$$= \gamma_i \delta_{mi} \frac{(Q_i)^{1-\eta(i)}}{(M_i)^{1-\eta(i)} (\gamma_i)^{1-\eta(i)}},$$

$$\gamma_i M_i = Q_i \left(\frac{\gamma_i \delta_{mi} P_i^Q}{P_i^m} \right)^{\frac{1}{1-\eta(i)}}.$$

$$(\gamma_i)^{\frac{1}{1-\eta(i)}} = (\gamma_i)^{\frac{1-1+\eta(i)}{1-\eta(i)}} = (\gamma_i)^{\frac{\eta(i)}{1-\eta(i)}},$$

$$M_i = Q_i \left(\frac{(\gamma_i)^{\eta(i)} \delta_{mi} P_i^Q}{P_i^m} \right)^{\frac{1}{1-\eta(i)}} \quad \forall i \in I. \quad (41)$$

Аналогічно з умов першого порядку максимізації по D_i функції (38) маємо

$$D_i = Q_i \left(\frac{(\gamma_i)^{\eta(i)} \delta_{di} P_i^Q}{P_i^d} \right)^{\frac{1}{1-\eta(i)}} \quad \forall i \in I. \quad (42)$$

Умови першого порядку максимізації по E_i функції (40) мають вид

$$0 = \frac{\partial \pi_i^Z}{\partial E_i} = P_i^e - (\tau_i + P_i^s) \frac{\partial Z_i}{\partial E_i},$$

де в силу залежності (39) маємо

$$\frac{\partial Z_i}{\partial E_i} = \frac{\theta_i}{\phi(i)} [\xi_{ei}(E_i)^{\phi(i)} + \xi_{di}(D_i)^{\phi(i)}]^{\frac{1-\phi(i)}{\phi(i)}} \times$$

$$\times \xi_{ei} \phi(i) (E_i)^{\phi(i)-1},$$

$$\left(\frac{Z_i}{\theta_i}\right)^{\phi(i)} = \xi_{ei}(E_i)^{\phi(i)} + \xi_{di}(D_i)^{\phi(i)},$$

$$\frac{P_i^e}{\tau_i + P_i^s} = \frac{\partial Z_i}{\partial E_i} = \theta_i \xi_{ei}(E_i)^{\phi(i)-1} \left(\frac{Z_i}{\theta_i}\right)^{1-\phi(i)} =$$

$$= \theta_i \xi_{ei} \frac{(Z_i)^{1-\phi(i)}}{(E_i)^{1-\phi(i)} (\theta_i)^{1-\phi(i)}},$$

$$E_i = Z_i \left(\frac{(\theta_i)^{\phi(i)} \xi_{ei} (\tau_i + P_i^s)}{P_i^e} \right)^{\frac{1}{1-\phi(i)}} \quad \forall i \in I. \quad (43)$$

Аналогічно з умов першого порядку максимізації по D_i функції (40) маємо

$$D_i = Z_i \left(\frac{(\theta_i)^{\phi(i)} \xi_{di} (\tau_i + P_i^s)}{P_i^d} \right)^{\frac{1}{1-\phi(i)}} \quad \forall i \in I. \quad (44)$$

На відміну від теоретичної загальної рівноваги, що виражається рівностями (12) і (13), в обчислюваній загальній рівновазі замість рівності (12) розглядається рівняння

$$Q_i = X_i^p + X_i^s + X_i^r + \sum_j X_{ij} \quad \forall i \in I. \quad (45)$$

де аналогічно до співвідношення (30) замість рівності (7) розглядається рівняння

$$X_i^p = \frac{\alpha(i)}{P_i^q} \left(\sum_h R_h F_h - S^p \right), \quad \forall i \in I \quad (46)$$

з відповідною модифікацією умови (2).

Модель обчислюваної загальної рівноваги утворюють одночасні рівняння (13), (22), (25)–(30), (32), (34)–(37), (39), (41)–(46).

Оскільки число рівнянь моделі обчислюваної загальної рівноваги (CGE) на 3 менше, ніж число ендогенних змінних цієї моделі, то існує важлива при моделюванні можливість до визначення трьох довільних змінних.

Наприклад, до визначених можна вважати заощадження S^j ,

$$S^p = APS^p \sum_h R_h F_h,$$

$$S^F = APS^F \sum_j T_j,$$

де APS^F та APS^R – середня схильність до відповідно приватних та урядових заощаджень.

Замість заощаджень S^F в іноземній валюті

довизначити можна обмінний курс H , якщо він вважається фіксованим або екзогенно заданим.

Застосовуючи закон Вальраса до моделі обчислюваної рівноваги, можна вибрати масштаб цін через вибір товару, ціну якого вважатимемо рівною 1.

Список використаних джерел

1. Полтерович В. М. Элементы теории реформ. – М.: Экономика, 2007. – 448 с.
2. Hosoe N. Computable general equilibrium modeling with GAMS. – Tokyo: National Graduate Institute for Policy Studies, 2004. – 98 p.
3. Горбачук В. М. Методы реализации системы взаимосвязанных аграрных моделей стран мира (BLS) / Моделирование плановых расчетов и диалоговая оптимизация. – К.: Знание, 1990. – С. 35–36.
4. Горбачук В. М., Лещенко Л. Л. Методы интеграции экономических моделей государств в компьютерную систему BLS взаимосвязанных аграрных моделей стран мира / Применение вычислительной техники и математических методов в научных и экономических исследованиях. – К.: Знание, 1991. – С. 91.
5. Горбачук В. М. Компьютерная информационная система ФАО / Банки данных, информационные системы и инструментальные средства поддержки принятия решений. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова АН Украины, 1991. – С. 25.
6. Горбачук В. М. Моделирование процессов торговли // Математические методы моделирования и системного анализа в условиях неполной информации. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1991. – С. 48–53.
7. Горбачук В. М. Линейные модели торговли // Моделирование и оптимизация. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1991. – С. 3–8.
8. Горбачук В. М. Ценовые обратные связи в линейных моделях торговли // Использование математических методов и ЭВМ в системах управления и проектирования. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1991. – С. 107–111.
9. Горбачук В. М. Компьютерная информационная система ФАО и экономическая информатика. – Препр. 91-52. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова АН Украины, 1991. – 19 с.
10. Горбачук В. М. Моделирование бюджетов, доходов, накоплений, инвестиций, потребления и спроса // Использование математических методов информационных технологий в технических и экономических системах. – К.: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова АН Украины, 1992. – С. 107–113.
11. Ляшенко І. М. Економіко-математичні моделі сталого розвитку. – К.: Вища школа, 1999. – 234 с.
12. Михалевич М. В., Сергиенко И. В. Моделирование переходной экономики: модели, методы, информационные технологии. – К.: Наук. думка, 2005. – 671 с.
13. Вэриан Х. Микроэкономика. Промежуточный уровень. Современный подход. – М.: ЮНИТИ, 1997. – 767 с.
14. Negishi T. Welfare economics and the existence of an equilibrium for a competitive economy // Metroeconomica. – 1960. – 12. – P. 92–97.
15. Gunning J. W., Keyzer M. A. Applied general equilibrium models for policy analysis / Handbook of development economics. J. Behrman, T.N. Srinivasan (eds.) – Elsevier Science, 1995. – P. 2025–2107.
16. Armington P. A theory of demand for products distinguished by place of production // IMF staff papers. – 1969. – 16 (1). – P. 445–467.

Надійшло до редколегії 30.10.09

УДК 004.056.53

Іванніков* Є.Ю., аспірант

Послуга множинної автентифікації для ЗОС на базі GNU/Linux з використанням USB накопичувачів.

Запропоновано реалізацію послуги множинної автентифікації для ЗОС на базі дистрибутиву Debian ОС GNU/Linux. Послуга використовує два незалежні механізми автентифікації – парольний та на основі масового USB носія. Сформульовано ключові вимоги, яким має задовольняти USB автентифікація. Досліджено існуючі засоби USB автентифікації та показано необхідність їхньої модифікації.

Ключові слова: захищена ОС, послуга безпеки, послуга автентифікації.

*E-mail: ivannikoff@meta.ua.

Статтю представив чл. кор. НАНУ, д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Вступ

Автентифікація користувача комп'ютерної системи (КС) призначена для визначення і перевірки особистості фізичної особи, яка намагається одержати доступ до цієї КС. Метою автентифікації є отримання підстав, на основі яких можна стверджувати, що КС має справу з конкретним відомим їй користувачем. Для ОС, які забезпечують захист оброблюваної інформації, автентифікація особи є першою ланкою у протидії несанкціонованому доступу. За її результатами комплекс засобів захисту (КЗЗ) приймає рішення про те, чи дозволено даному користувачеві увійти в систему, і використовує одержані результати для розмежування доступу. Автентифікація розглядається в [2] як така послуга безпеки, яка є необхідною вимогою у реалізації більшості інших послуг, що є цілком очевидним.

Відомими є три основні типи автентифікації [2,4]: на основі знань, на основі власності та на основі біометричних показників. Кожному типу автентифікації притаманні як переваги по відношенню до інших типів, так і певні недоліки, тому в ОС, призначених для обробки конфіденційної інформації використовується комбінація різних типів автентифікації.

Згідно нормативного документа [2] визначаються 3 рівні послуги автентифікації (послуга „НІ”). Найвищий рівень послуги („НІ-3.

Y.Y. Ivannikov, post-graduate student

Multi-factor authentication security service for a trusted OS based on GNU/Linux using USB mass storage devices.

An implementation of a multi-factor authentication security service for a trusted OS based on Debian GNU/Linux distribution is proposed. The service will be using two independent authentication mechanisms – typed passwords and tokens kept on USB mass storage devices. Key requirements to USB tokens are defined. Existing USB authentication facilities are studied; the need of their modification is shown.

Key words: trusted computer system, security service, authentication.

Послуга множинної автентифікації”) вимагає використання комбінації мінімум двох різних типів автентифікації.

Стаття є частиною роботи із розробки захищеної ОС на базі дистрибутиву Debian ОС GNU/Linux. Профіль захищеності розроблюваної ЗОС передбачає впровадження послуги автентифікації найвищого рівня („НІ-3”). Оскільки в ОС GNU/Linux використовується лише один тип автентифікації – на основі знання, то ставиться задача аналізу засобів, що дозволять впровадити послугу „НІ-3” використовуючи комбінацію двох типів автентифікації – на основі знання та на основі власності.

В роботі пропонується реалізація послуги автентифікації з використанням введення з клавіатури пароля і носимого ідентифікатора, в якості якого буде виступати масовий USB накопичувач.

Типи автентифікації

Опишемо відомі типи автентифікації. У викладенні будемо слідувати нормативному документу [2]:

1. Знання. Це є дещо, відоме користувачеві і не відоме іншим особам. Пароль, персональний номер або інша подібна інформація є прикладом таких знань. Даний тип автентифікації є простим у реалізації і достатньо ефективним. Проте його ефективність обмежена простотою його повторення: достатньо просто обчислити або

вгадати інформацію автентифікації, а для її дублювання не вимагається спеціального устаткування чи можливостей.

2. Власність. Це є дещо, чим володіє користувач і не володіють інші особи. Такі фізичні об'єкти як смарт-карта, магнітна картка, електронний ключ є прикладами того, що дозволяє однозначно ідентифікувати особу. Основною перевагою даного типу автентифікації є складність або висока вартість дублювання інформації автентифікації. З іншого боку, втрата пристрою автентифікації може стати причиною потенційної компрометації. Проте, в більшості випадків достатньо просто установити факт втрати такого пристрою і попередити адміністратора безпеки про необхідність зміни інформації автентифікації.

3. Біометрія. Це є унікальні біологічні атрибути, властиві лише певній особі. Результати таких біометричних вимірювань, як відбитки пальців, параметри райдужної оболонки ока або геометрія руки можуть бути використані для встановлення особи. Основною перешкодою для використання даного механізму є висока вартість пристроїв автентифікації. Крім того, використання цих достатньо дорогих засобів автентифікації не гарантує безпомилкової роботи.

В роботі буде реалізована схема, яка використовує перший та другий типи автентифікації. Реалізація першого типу автентифікації нічим особливим не вирізнятиметься. Вона буде використовувати звичайний механізм ОС GNU/Linux.

Суть механізму полягає в тому, що в КС паролі не зберігаються явно. Замість цього, при створенні облікового запису нового користувача і введенні ним пароля на його основі обчислюється геш значення, отримане ітерацією функції гешування. Саме це значення і зберігається в КС. При автентифікації користувача введенний ним пароль підлягає тим самим криптографічним маніпуляціям. Отриманий геш порівнюється із тим значенням, що зберігається в КС. Автентифікація вважається успішною, якщо ці значення співпадають.

Особливість у реалізації другого типу автентифікації полягає у тому, що замість спеціалізованих носіїв для зберігання автентифікаційних відбитків (смарт-карт і т.п.) пропонується використати звичайні масові USB носії (флеш приводи). Аналіз переваг та недоліків зумовлених вибором таких пристроїв для зберігання інформації автентифікації наведено у наступному підрозділі.

USB накопичувачі як носії даних автентифікації

Використання масових пристроїв зберігання даних в якості джерел автентифікаційних відбитків має дві сторони. Масові носії не контролюють потоки інформації (високо захищені спеціалізовані носії містять мікропроцесор, який обмежує доступ до внутрішньої пам'яті будь-яким апаратним пристроєм [3]). Власник USB накопичувача може записати/змінити будь-які дані на ньому. Будь-хто, отримавши носій, може зробити повну копію вміщених даних. Це диктує необхідність у такій організації роботи з пристроєм, щоб він не містив жодної інформації, здатної зламати процедуру автентифікації або відновити ініціалізаційні вектори.

З іншої сторони, стандартизовані інтерфейси роботи із USB носіями суттєво спрощують їхнє використання у різних апаратних платформах та ОС. Вартість флеш приводів є дуже низькою, крім того, оскільки ці пристрої користуються великою популярністю, вони масово поширені серед користувачів КС.

Для роботи з цими пристроями не потребується ніякого додаткового устаткування. Натомість, спеціалізовані носії вимагають особливих пристроїв для зчитування автентифікаційних відбитків, що значно підвищує вартість реалізації таких рішень.

Використання USB носіїв хоча і поступається у надійності спеціалізованим апаратним пристроям, проте дозволяє суттєво підвищити безпеку КС, додаючи ще один захищений механізм автентифікації, при цьому не вимагаючи додаткових капіталовкладень.

Визначимо вимоги до реалізації послуги:

1. Для того, щоб автентифікуватись, користувач має ввести вірний пароль та продемонструвати наявність відомого КС USB носія з унікальними даними автентифікації (автентифікаційним відбитком).

2. Оскільки USB носій не може обмежити доступ до внутрішньої пам'яті, для його використання у процесі автентифікації ми не можемо покладатися на приховування даних або на вбудовану апаратну логіку.

3. Через низьку вартість дублювання USB носія, бажано реалізувати таку схему автентифікації, яка б могла протидіяти такому виду загрози.

4. Схема повинна забезпечити можливість використання одного носія для автентифікації у декількох КС.

Одноразові паролі

Реалізація вимог 2 і 3 буде ґрунтуватися на використанні одноразових паролів [4]. Ідея полягає в тому, що автентифікаційний відбиток, записаний на пристрої, може бути використаний виключно для одного сеансу автентифікації. Після цього він перезаписується іншим відбитком, отриманим з попереднього. В КС для кожної пари вигляду (ім'я користувача, серійний номер USB пристрою) буде зберігатися перший відбиток серії (точніше, це – ініціалізаційний вектор) та лічильник вдалих спроб автентифікації. При спробі автентифікації користувача, алгоритм обчислює поточне значення відбитка на основі значення першого відбитка і лічильника, та порівнює отриманий відбиток із тими даними, які записані на USB пристрої.

Ідентифікація USB носія за його серійним номером унеможливорює просте дублювання автентифікаційної інформації. Для того, щоб скористатись нею, зломисник мусить змінити серійний номер носія, що вимагає спеціальних знань та устаткування. Звісно, автор тут не розраховує на вбудовану апаратну логіку (умова 2), а відмічає, що така спроба атаки матиме більш високу вартість для зломисника.

Використовуючи одноразові паролі маємо гарантію, що навіть якщо зломисником і була зроблена повна копія носія (включаючи серійний номер), то успішно автентифікуватися він зможе лише до того, як це зробить справжній власник пристрою – інакше, копія автентифікаційного відбитку, яку отримав у своє розпорядження зломисник, втратить свою чинність. Якщо ж він все таки встиг здійснити вдалу автентифікацію, тоді втратить чинність оригінал відбитку і справжній власник отримає негативну відповідь при першій спробі автентифікуватися, що вказуватиме на компрометацію системи.

Реалізація одноразових паролів ґрунтована на використанні криптографічних геш функцій. Нехай особа A намагається здійснити автентифікацію, маючи на USB пристрої з серійним номером s криптографічний відбиток w .

Позначимо $w_0 = w_0(A, s)$ – визначений при конфігуруванні пристрою ініціалізаційний вектор, $H(x)$ – геш функція, $n = n(A, s)$ – кількість вдалих спроб автентифікації плюс один. Значення w_0 та n зберігаються в КС. При автентифікації послідовно обчислюються значення $w_1, w_2, \dots, w_n$ згідно формул:

$$w_1 = H(w_0), \quad (1)$$

$$w_i = H(w_{i-1} \oplus w_0), \quad (2)$$

де $\oplus$ – оператор конкатенації рядків. Отримане значення w_n порівнюється зі значенням w , збереженим на USB носії. Рівність $w_n = w$ засвідчує, що особа A володіє відомим для КС USB пристроєм, на якому записано чинний автентифікаційний відбиток. Ця рівність разом із позитивним результатом перевірки пароля, дає підставу автентифікувати особу A . На USB носії користувача записується наступна ітерація гешу w_{n+1} , значення n збільшується на одиницю і зберігається в КС.

Огляд PAM

Архітектура під'єднувальних модулів автентифікації (PAM), запропонована співробітниками фірми Sun Microsystems в [5] – це бібліотека, яка надає прикладний програмний інтерфейс для керування процесом автентифікації в Unix-подібних ОС. Бібліотека PAM діє як проміжна ланка між програмами, які вимагають автентифікації (наприклад, login, su і т.д.) та механізмами автентифікації, дозволяючи цим програмам не залежати від конкретної схеми автентифікації. Бібліотека дозволяє використовувати різні механізми автентифікації, які реалізуються як під'єднувальні модулі. Схему архітектури PAM зображено на рис. 1.

Адміністратор КС визначає схему автентифікації, налаштовуючи файли в каталозі `/etc/pam.d`. Для кожної прикладної програми, яка потребує автентифікації, визначається свій файл, який містить рядки вигляду [6]:

`<тип> <контроль> <модуль> [arg.]`

де тип може бути

- `account` – для обмежень, не пов'язаних із автентифікацією особи. Типово використовується для дозволу або заборони доступу на основі системного часу, наявних вільних ресурсів тощо.

- `auth` – для процедур автентифікації.

- `password` – для зміни паролів.

- `session` – спеціальні операції, що виконуються до або після успішного входу в КС (наприклад, монтування директорій).

Контроль визначає загальний результат автентифікації для прикладної програми на основі результатів роботи окремих модулів і приймає одне зі значень:

- `requisite` – гарантує, що процедура автентифікації буде невдалою, якщо даний

модуль дасть негативну відповідь. В такому разі управління негайно переривається; прикладна програма отримує негативну відповідь.

- **required** – подібний до **requisite**, але не перериває управління в разі негативної відповіді одного модуля, отримуючи результати від решти модулів; загальний результат буде негативним.

- **sufficient** – в разі позитивної відповіді негайно повертає успішний загальний результат.

- **optional** – відповідь модуля ігнорується при побудові загального результату; використовується для деяких допоміжних модулів.

Нарешті, в конфігураційному рядку вказується ім'я PAM модуля – об'єктного файлу (.so).

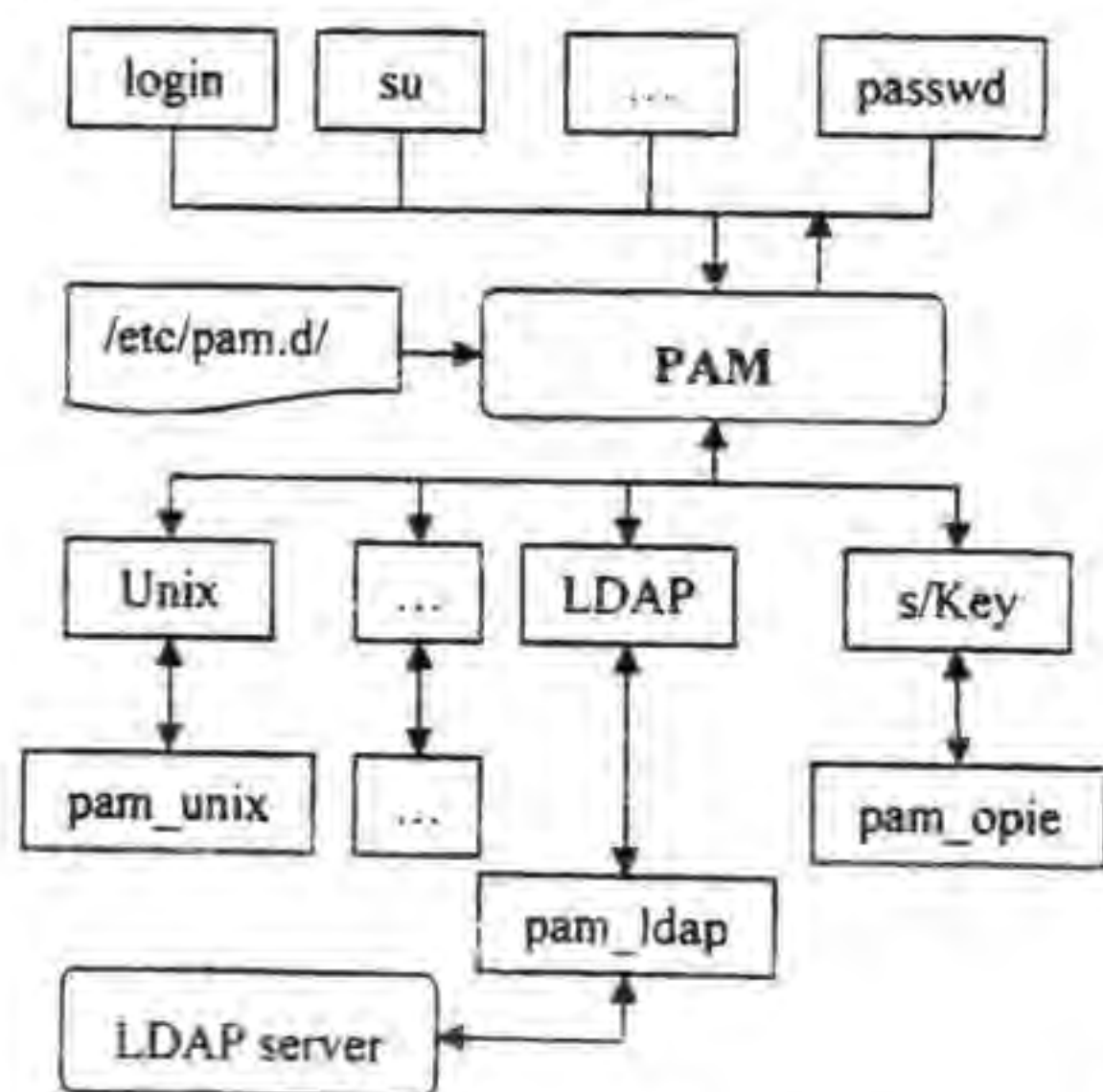


Рис. 1. Архітектура PAM

Модулі PAM для USB автентифікації

Одним зі стандартних модулів, які постачаються в бібліотеці PAM, є модуль **pam_unix**, який реалізує автентифікацію за допомогою пароля. Проте, в бібліотеці не міститься модуля, призначеного для проведення автентифікації за допомогою USB пристроїв. Відомими є два вільні проекти від сторонніх розробників, які пропонують PAM модулі для USB автентифікації: **pam_usb** (домашня сторінка проекту <http://pamusb.org/>) і **pam_usbng** (домашня сторінка проекту <http://www.delta-xi.net/>). Порівняння цих двох пакетів робить досить легким вибір на користь пакету **pam_usbng**. Серед його переваг над пакетом **pam_usb** відмітимо такі:

- більш прозорий вихідний код (що, безперечно, є суттєвою перевагою при розробці послуги, яка має відношення до безпеки);

- більш вдалі архітектурні рішення та чітка модульна структура;

- автентифікація на основі одноразових паролів, з додатковою можливістю використовувати персональний номер (PIN код).

Остання можливість варта більш детальної уваги. Персональний номер PIN p використовується для обчислення першого кроку ітерації гешування: $w_1 = H(w_0 \oplus p)$, впливаючи тим самим на обчислення всієї послідовності автентифікаційних відбитків. Це, очевидно, робить неможливим автентифікацію без представлення вірного значення PIN коду і підсилює стійкість загальної схеми.

Крім цього, пакет **pam_usbng** надає можливість для використання пристрою з даними автентифікації в якості звичайного носія. Модуль автентифікації здійснює перевірку серійного номера USB носія, що ускладнює дублювання зловмисником інформації автентифікації (про це докладніше йшлося при обговоренні одноразових паролів).

На жаль, безпосереднє використання пакету в дистрибутиві Debian неможливе через особливості іменування USB носіїв. Крім того, пакет сам по собі забезпечує тільки виконання вимог 2 та 3. Реалізація вимог 1 і 4 потребує налаштування конфігураційних файлів та ряду змін у вихідних кодах пакету **pam_usbng**. Також, вихідні коди містять деякі програмні помилки (серед них, і досить неприємні), які вимагають виправлення. Все це буде розглянуто у наступному підрозділі.

Модифікація пакету **pam_usbng**

Аналіз вихідних кодів пакету **pam_usbng** показує, що ряд файлів потребує модифікації. Зміни необхідні у таких файлах: **uacnf.pl**, **libpamauth.c**, **uadevwrite.c** та **pam_usbng.c**.

Перший файл є майстром підготовки носія до запису автентифікаційних даних. Майстер отримує інформацію про під'єднані до KC USB носії. Для цього майстер переглядає імена символічних посилань у директорії **/dev/disk/by-id/** файлової системи UDEV і перевіряє, чи входять вони у множину імен пристроїв, яку задає такий регулярний вираз (мовою Perl): `/(.*)usb-(.*)_(.*)-0:0$/`. Отже, майстер розпізнає USB носії, імена яких

мають вигляд: $\alpha \text{usb} - \beta_ \gamma - 0:0$, де α , β , γ – довільні послідовності символів.

Оскільки в дистрибутиві Debian ОС GNU/Linux імена пристроїв задаються дещо інакше, потрібно дати інше визначення регулярної множини: $/\text{usb}-(\backslash w+)_-(\backslash w+)\$ /$. Воно дозволить розпізнати імена пристроїв, які мають вигляд $\alpha' \text{usb} - \beta' _ \gamma'$, де α' , β' , γ' – довільні непорожні послідовності літер та цифр.

Подібна помилка присутня і у другому файлі (`libramauth.c`), в якому при звертанні до USB пристрою формується його ім'я на основі шаблону мовою C, який має вигляд `"_ %s-0:0-part %c"`. Замість нього потрібно використати такий шаблон: `"_ %s-part %c"`.

В цьому ж файлі присутня помилка, яка унеможливає збереження у КС даних про кількість вдалих спроб автентифікації. Конкретніше, ці дані зберігаються у локальній директорії `/etc/.ramauth.otp/` (ім'я задається при компіляції макросом препроцесора `AUTH_OTP`). Цей каталог має створюватися при конфігуруванні носія, якщо він не був створений раніше. Нижче наведено фрагмент коду, який відповідає за цю функціональність.

```
i = stat(AUTH_OTP, &sbuf);
if ( /* !serr && */
    !S_ISDIR(sbuf.st_mode) )
    mkdir(AUTH_OTP, S_IRGRP |
          S_IWGRP | S_IXGRP | S_IRUSR |
          S_IWUSR | S_IXUSR );
```

Однак, потрібно зауважити, що бібліотечна функція `stat(<ім'я>, <буфер>)` повертає значення `-1`, якщо не може знайти файл (директорію), заданий аргументом `<ім'я>` і встановлює код помилки `ENOENT` у глобальну змінну `errno`. Вміст буфера `sbuf` в такому випадку залишається невизначеним. Отже, некоректна реалізація призводить до того, що умова `!S_ISDIR(sbuf.st_mode)` буде спрацьовувати або не спрацьовувати залежно від стану непроініціалізованої пам'яті.

Перепишемо цей фрагмент так:

```
i = stat(AUTH_OTP, &sbuf);
if ( (i == -1) && (errno == ENOENT) ) {
    mkdir(AUTH_OTP, S_IRGRP |
          S_IWGRP | S_IXGRP | S_IRUSR |
          S_IWUSR | S_IXUSR );
}
```

Очевидно, що цим помилка буде виправлена і у випадку відсутності локальної директорії `/etc/.ramauth.otp/` вона буде успішно створена.

Третій файл `uadevwrite.c` потребує більш серйозної уваги. Він займається записом на USB носії автентифікаційних відбитків. При цьому, відбитки записуються не в основний, а у додатковий розділ флеш-пристрою, що дозволяє використовувати цей пристрій і як звичайний носій (див. Рис. 2а) для збереження користувацьких даних.

Тут потрібно зауважити, що програма `uadevwrite` перезаписує наявні на носії автентифікаційні дані новими, які вказуються у конфігураційному файлі. Для реалізації вимоги 4 (можливість використання одного носія для автентифікації у декількох КС), таку поведінку потрібно змінити.

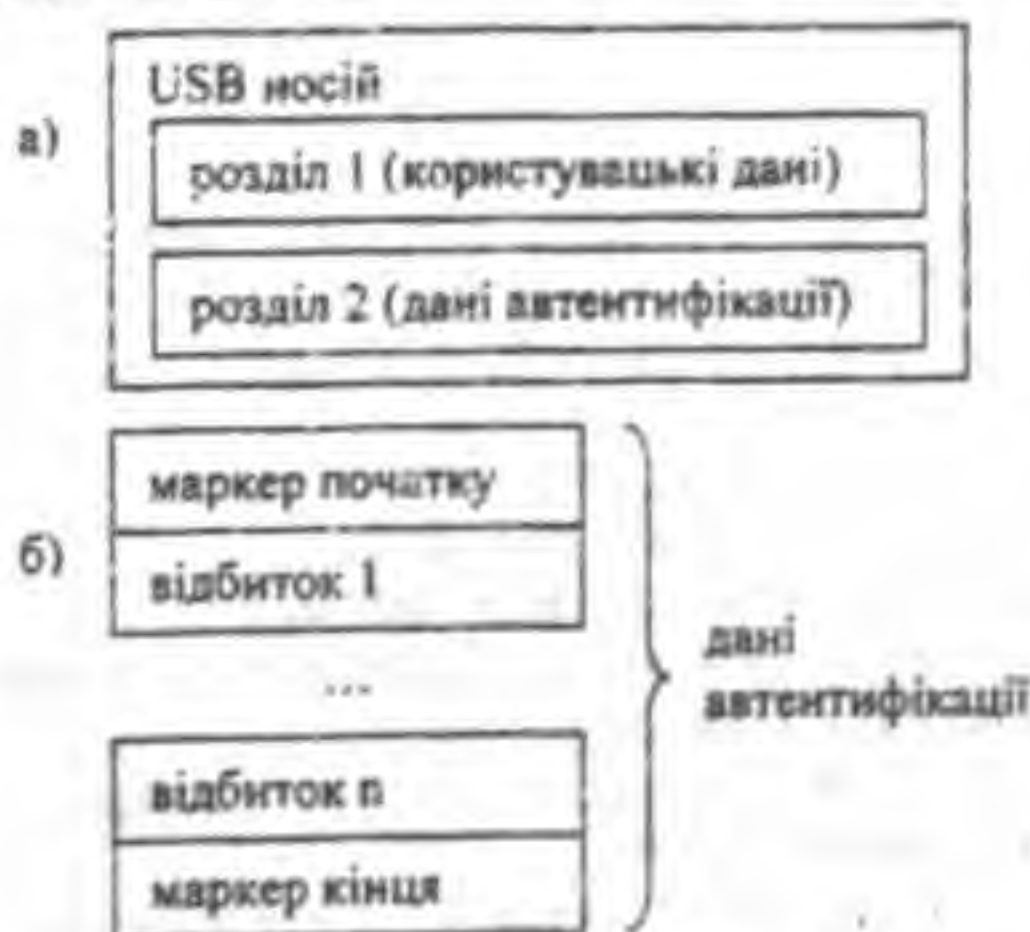


Рис. 2 Розміщення даних на USB носії

Розглянемо ситуацію, коли на носії вже присутні відбитки для автентифікації користувача в інших КС. Для того, щоб отримати можливість автентифікуватися у новій КС, не втративши наявні відбитки, до існуючих автентифікаційних даних потрібно просто дописати новий відбиток. При цьому, бажано залишити можливість перезапису даних автентифікації.

Тому, пропонуємо ввести додатковий аргумент командного рядка вигляду `-- overwrite=yes`, лише при вказуванні якого дані будуть переписані. В іншому випадку, до наявних на носії автентифікаційних відбитків допишеться новий відбиток. На рис. 2б зображено схему розташування даних на флеш-носії.

Файл `ram_usbng.c` і є, власне, РМ модулем автентифікації. На жаль, він містить прикру помилку, яка значно погіршує ефективність роботи модуля.

Модуль по черзі зчитує автентифікаційні відбитки із флеш пристрою, порівнюючи кожен поточний відбиток зі значенням, отриманим ітерацією геш-функції (формули (1) і (2)). Помилка полягає в тому, що значення геш-функції заново обчислюються для кожного наявного на носії відбитку. Уявімо ситуацію, коли на носії системного адміністратора записано велику кількість відбитків (кожний для окремої КС). Тоді автентифікація цього користувача потребуватиме зайвих обчислень.

Очевидно, що розрахунок геш значень $w_1, w_2, \dots, w_n$ достатньо виконати лише один раз, а вже потім порівнювати обчислене значення w_n зі всіма автентифікаційними даними, записаними на носії.

Конфігурування PAM

При інсталяції пакет `pam_usbng` модифікує файл управління автентифікацією для програми `login` – `/etc/pam.d/login`. Файл набуває такого вигляду:

```
auth sufficient pam_usbng
auth required pam_unix
```

що визначає таку схему автентифікації:

1. спробувати автентифікувати користувача за допомогою USB носія.

2. в разі успіху, негайно повернути позитивний результат.

3. у випадку невдачі, автентифікувати користувача за допомогою введеного пароля.

4. повернути результат пароліної автентифікації (успіх або невдачу)

Очевидно, ця схема не відповідає вимогам множинної ідентифікації і має бути змінена. Для реалізації послуги записи у конфігураційному файлі потрібно змінити на такі:

```
auth requisite pam_usbng
auth required pam_unix
```

Це дозволить автентифікувати користувача тоді і тільки тоді, коли обидва механізми (USB і пароліний) повертають позитивний результат. При цьому, перевірка автентифікаційних даних на флеш-носії відбувається до перевірки пароля, тому у випадку негативного результату, спроба автентифікації негайно переривається.

Подальша робота

Пріоритетним напрямком розвитку послуги множинної автентифікації вважаємо її поширення на програму `sulogin`. Ця програма викликається замість програми `login` при завантаженні однокористувацького середовища і застосовується для автентифікації особи

адміністратора КС (і лише його). Однак, серйозною вадою програми `sulogin` є те, що вона не застосовує архітектуру PAM і здійснює автентифікацію виключно на основі вбудованої логіки, використовуючи при цьому лише пароліний механізм.

Оскільки однокористувацьке середовище використовується для обслуговування системи у випадку збоїв, то для захищеної ОС забезпечення підтримки однокористувацького середовища має ще більше значення з огляду на високу цінність оброблюваної інформації.

Тому, автор вбачає за необхідне провести модифікацію програми `sulogin`. По-перше, в програму потрібно ввести повноцінну підтримку PAM архітектури для поширення на неї послуги множинної автентифікації.

По-друге, оскільки в розроблюваній ОС передбачається виділення двох ролей для адміністрування КС (що визначається реалізацією послуги „НО-2. Розподіл обов'язків адміністраторів”), потрібно вдосконалити програму `sulogin`, додавши можливість автентифікувати не тільки адміністратора КС, а також адміністратора безпеки.

Список використаних джерел

1. Таненбаум З. Современные операционные системы. 2-е изд. – СПб.: Питер, 2002. – 1040 с.
2. НД ТЗІ 2.5-004-99. Критерії оцінки захищеності інформації в комп'ютерних системах від несанкціонованого доступу. – К.: ДСТСЗІ СБ України, 1999. – 59 с.
3. Шнайер Б. Секреты и ложь. Безопасность данных в цифровом мире. – СПб.: Питер, 2003. – 368 с.
4. Menezes A.J., van Oorschot P.C., Vansone S.A. Handbook of Applied Cryptography. – CRC Press, 1996. – 816 p.
5. Samar V., Lai C. Making Login Services Independent of Authentication Technologies. Proceeding of the Third ACM Conference on Computer Communications and Security, March 1996.
6. Morgan A., Kukuk T. The Linux-PAM System Administrators' Guide. http://www.kernel.org/pub/linux/libs/pam/Linux-PAM-html/Linux-PAM_SAG.html

Надійшла до редколегії 22.09.2009

УДК 519.7

Козлов М.В., аспірант

Ефективні алгоритми обчислення інтегральних ознак для розпізнавання цифрових зображень

Розглядаються загальні проблеми опису та маніпуляції візуальною інформацією на площині.

Наведено математичні моделі та методи їх реалізації у вигляді чисельних алгоритмів формування набору ознак для розпізнавання цифрових зображень.

Ключові слова: інтегральні ознаки, інваріантні ознаки.

*E-mail: nikita.kozlov@gmail.com

Статтю представив д. т. н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Розглядаються загальні проблеми опису та маніпуляції візуальною інформацією на площині. Прикладами застосування можуть бути задачі автоматичного визначення розмірів, орієнтації зображення; визначення координат початкової точки алгоритмів пошуку. В усіх зазначених випадках класичний метод моментів дає розв'язок проблеми. Більш того, в сучасних умовах з використанням цифрових процесорів подібні задачі можуть бути розв'язані в реальному часі. Наведено математичні моделі та методи їх реалізації у вигляді чисельних алгоритмів формування набору ознак для розпізнавання цифрових зображень.

1. Вектор ознак та його властивості

В термінах цифрового представлення зображень, об'єкти характеризуються певним набором пікселів. Таким чином, для розпізнавання потрібно описати властивості груп пікселів. Зазвичай, в якості опису виступає множина чисел – дескрипторів або властивостей, ознак тощо. Виходячи з цього, можна порівнювати та розпізнавати образи, знаходячи відповідності між досліджуваними множинами ознак та дескрипторами відомих об'єктів. Для того, щоб бути корисними в процесі розпізнавання, дескриптори повинні мати чотири важливі властивості. По-перше, дескриптори повинні утворювати повну множину, тобто два об'єкти мають однаковий набір дескрипторів тоді і тільки тоді, коли вони мають однакову форму. По-друге, дескриптори повинні бути конгруентними, тобто надавати можливість розпізнати подібні об'єкти тоді, коли вони мають

Kozlov N V., PhD student

Effective integral feature computation algorithms for image recognition

Described the main problem of image description and manipulation on the plane.

Given a mathematical model and its numerical implementation as feature vector formation algorithm in application to digital image recognition task.

Keywords: integral features, invariant features.

однакові набори дескрипторів. По-третє, дуже зручно, коли дескриптори є інваріантними. Наприклад, дескриптори, інваріантні до повороту, підходять для розпізнавання об'єктів будь-якої орієнтації. Інші важливі інваріанти дескрипторів – це стійкість до масштабування, переносу, стійкість до афінних перетворень, стійкість до перетворень перспективи. Остання властивість набору дескрипторів – вони повинні утворювати компакту множину. Дескриптор повинен передавати властивість об'єкту найефективніше, тобто він повинен вміщати лише інформацію про те, що робить об'єкт унікальним, відмінним від інших. Об'єм інформації, використаний для опису властивостей об'єкта, повинен бути якнайменшим. На жаль, не існує повного та компактного набору дескрипторів для опису будь-яких об'єктів. Таким чином, процес розпізнавання виконується тим ефективніше, чим краще вибрано набір дескрипторів; якість розпізнавання специфічна до конкретної задачі (тип, кількість досліджуваних об'єктів).

2. Моментні характеристики зображень

Ху [1] вперше опублікував статтю про застосування моментних ознак зображень для задач розпізнавання двовимірних образів; його підхід використовує класичні методи Сільвестра з теорії алгебраїчних форм. Визначення ознак, що базуються на моментах зображення, потребує обчислення інтегралу від добутку функції інтенсивності зображення $f(x, y)$ та множини

поліномів $h_{pq}(x, y)$, що мають спільну з $f(x, y)$ область визначення:

$$M_{pq} = \iint f(x, y) h_{pq}(x, y) dx dy. \quad (1)$$

Обравши $h_{pq}(x, y)$ у вигляді $h_{pq}(x, y) = x^p y^q$, отримаємо так звані «геометричні моменти» m_{pq} [1]; тут параметри p та q є цілими числами. Наведемо класичне [1] визначення набору нормованих відносно зсуву геометричних моментів, трансформуючи рівняння (1):

$$\mu_{pq} = \iint f(x, y) (x - \bar{x})^p (y - \bar{y})^q dx dy, \quad (2)$$

де $\bar{x} = m_{10}/m_{00}$, $\bar{y} = m_{01}/m_{00}$ – координати центроїда зображення $f(x, y)$. Набір значень μ_{pq} можна додатково нормалізувати відносно зміни розмірів об'єкта (зображення). Для випадку рівномірної (однакової відносно координат x та y) зміни масштабу вхідного зображення з коефіцієнтом λ , функція інтенсивності матиме вигляд $f(x/\lambda, y/\lambda)$, маючи на увазі лінійність оператора масштабування по параметрам x та y , набір інваріантів (2) зміниться:

$$\hat{\mu}_{pq} = \iint f(x/\lambda, y/\lambda) x^p y^q dx dy = \lambda^{(p+q+2)/2} \mu_{pq}.$$

З цього випливає, що інваріанти щодо масштабування (2) пов'язані з інваріантами відносно зсуву:

$$\hat{\mu}_{pq} = \frac{\mu_{pq}}{\mu_{00}^{(p+q+2)/2}}. \quad (3)$$

Такий тип нормалізації відповідає нормуванню «ваги» μ_{00} зображення $f(x, y)$. Іншими словами, моменти $\hat{\mu}_{pq}$ є проекцією функції інтенсивності $f(x, y)$ на неортогональний базис, утворений мономіалами $x^p y^q$, тому набір $\hat{\mu}_{pq}$ не є інваріантним відносно повороту; практичне застосування обмежене його властивостями інваріантності щодо зсуву та рівномірного масштабування.

Сучасним методом синтезу інваріантних ознак є дослідження Фур'є-подібних перетворень вхідного зображення. Певні властивості Фур'є перетворення: незалежність амплітуди перетворення від зсуву сигналу, теореми про дискретну згортку [2] дозволяють сконструювати відповідні математичні моделі інваріантних ознак. В роботі [3] доведена властивість інваріантності тангенса фази перетворення Фур'є відносно згортки вхідного зображення з центрально-симетричним ядром, тобто наведено конструктивний спосіб синтезу інваріантів

відносно розмиття зображення. Також в [3] показано, що Фур'є перетворення можна представити у вигляді лінійної комбінації геометричних моментів вхідного зображення. Ця важлива властивість є фундаментом для реалізації швидкодіючих алгоритмів обчислення інваріантних ознак з серії геометричних моментів (3). В статті [4] представлено алгоритми обчислення серій геометричних моментів та проаналізована точність, швидкодія і витрати пам'яті.

3. Ознаки, інваріантні відносно повороту

Узагальнений момент зображення $f(r, \theta)$ відносно ядра $F(r, \theta)$ в полярній системі координат з центром у відповідному геометричному центроїді об'єкта дослідження визначимо у наступному вигляді:

$$M = \int_0^{12\pi} \int_0^2 f(r, \theta) F(r, \theta) r dr d\theta. \quad (4)$$

Нехай $F(r, \theta) = \beta(r) \omega(\theta)$, де $\beta(r)$ є сімейством ортогональних нормованих функцій, таких як поліноми Зерніке, Мелліна, Чебишева, Крайчука [5]; базис вейвлетів Хаара, Добеші або B-spline [7]. Вибір функції $\beta(r) = \beta_p(r)$ визначає тип моментів (4). Функція $\omega(\theta)$ визначає кутову залежність. Вибір функції ω у вигляді $\omega(\theta) = \omega_q(\theta) = e^{-iq\theta}$ надає значенням моментів (4) властивість інваріантності відносно повороту. Справді, нехай $\hat{f}(r, \theta)$ є повернутим на кут δ зображенням $f(r, \theta)$, тобто $\hat{f}(r, \theta) = f(r, \theta + \delta)$. З урахуванням наведених вище міркувань, перепишемо рівняння (4) у вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{M}_{pq} &= e^{iq\delta} \int_0^{12\pi} \int_0^2 f(r, \theta + \delta) \beta_p(r) e^{-iq(\theta + \delta)} r dr d(\theta + \delta) \\ &= e^{iq\delta} M_{pq}. \end{aligned}$$

Таким чином, $\|\hat{M}_{pq}\| = \|M_{pq}\|$, що доводить властивість інваріантності відносно повороту будь-якого моменту, отриманого по формулі (4). Параметр q називають кутовим порядком, p – порядком моменту [5]. Іноді порядком моменту називають значення $p + q$. Також неважко помітити, що якщо q – неперервна змінна, то інтеграл по θ є круговим перетворенням Фур'є. Обчислення інваріантних ознак безпосередньо за формулою (4) є досить трудомісткими, але можуть бути спрощені за рахунок апріорних знань властивостей функцій $\beta_p(r)$.

4. Моменти Зерніке

Радіальні поліноми Зерніке [5] застосовувалися в задачах практичної оптики – процесі контролю вимірів аберацій угнутих дзеркал. Використати базис ортогональних поліномів Зерніке як основу для створення інваріантів відносно повороту було запропоновано в [5]. Також в [5] показано, що моменти Зерніке можна використати в задачах реконструкції зображень. Завдяки властивості стійкості відносно шумів, інваріантності відносно повороту (частинний випадок формули (4)), та прозору математичному формулюванню моменти Зерніке є популярним вектором ознак в багатьох практичних застосуваннях [5-8].

Проте, на момент виходу праці [5] процес обчислень інваріантів Зерніке був надто трудомістким. З того часу опубліковано багато робіт з емпіричним аналізом чутливості моментів Зерніке (за результатами візуального порівняння оригінального та реконструйованого зображень), робіт присвячених аналізу точності, швидкодії, розробці нових надшвидких алгоритмів, поширенню інваріантів на тривимірний випадок тощо [6, 7]. Такі дослідження є досі популярними. Наприклад, в [6] продемонстровано зв'язок між моментами Зерніке та перетворенням Радона, джерела даних в практичній магніто-резонансній томографії. В цьому розділі показано зв'язок моментів Зерніке з геометричними моментами, запропоновано спрощені, готові до програмної та апаратної реалізації формули інваріантів.

Наведемо класичне означення моментів Зерніке [5]. Комплексним моментом Зерніке порядку p та повторювання q називається величина:

$$A_{p,q} = \frac{p+1}{\pi} \iint_{0 \leq r \leq 1, 0 \leq \theta \leq 2\pi} R_p^q(r) f(r, \theta) e^{-iq\theta} r dr d\theta. \quad (5)$$

Тут $R_p^q(r)$ – є набором радіальних ортогональних поліномів Зерніке:

$$R_p^q(r) = \sum_{\substack{k=-q \\ p-k \text{ парне}}}^p B_{pqk} r^k. \quad (6)$$

Очевидно, що комплексні моменти $A_{p,q}$ є частинним випадком узагальнених моментів (4), тому значення $|A_{p,q}|$ є інваріантними відносно повороту. Неважко помітити, що кількість поліномів (6) невелика. Продemonструємо це на прикладі значень ненульових поліномів Зерніке

(6) для діапазону параметрів $p = \overline{0..7}$, $q = \overline{0..7}$ в форматі ${}^q_p | f(r) |$:

$$\begin{array}{llll} {}^0_0 | 1 & {}^4_4 | r^4 & {}^0_2 | 2r^2 - 1 & {}^3_5 | 5r^5 - 4r^3 \\ {}^1_1 | r & {}^5_5 | r^5 & {}^1_3 | 3r^3 - 2r & {}^5_7 | 7r^7 - 6r^5 \\ {}^2_2 | r^2 & {}^6_6 | r^6 & {}^2_4 | 4r^4 - 3r^2 & {}^0_4 | 6r^4 - 6r^2 + 1 \\ {}^3_3 | r^3 & {}^7_7 | r^7 & {}^4_6 | 6r^6 - 5r^4 & {}^2_6 | 15r^6 - 20r^4 + 6r^2 \end{array}$$

та побудуємо графіки $R_p^q(r)$ на відрізку $[0,1]$.

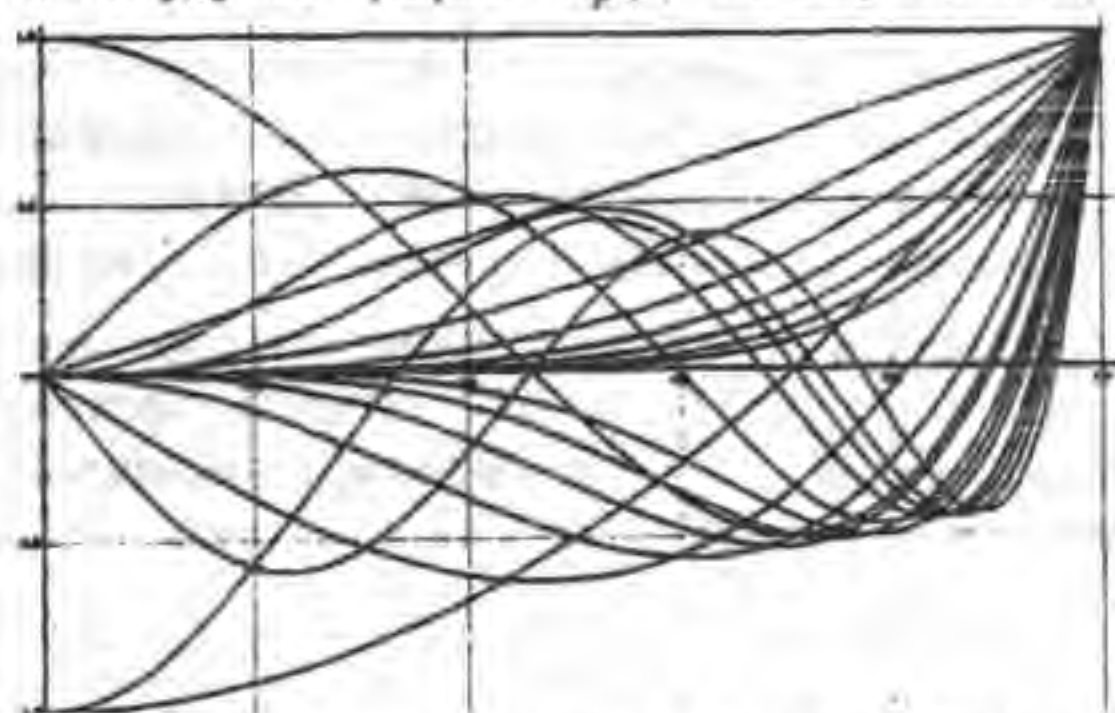


Рис. 1 Радіальні поліноми Зерніке $R_p^q(r)$ для $p = \overline{0..7}$, $q = \overline{0..7}$.

Обчислення інваріантних значень $|A_{p,q}|$ безпосередньо за формулою (5), навіть з урахуванням спрощеного вигляду радіальних поліномів, не є ефективним. Дослідники пропонують декілька підходів до ефективного обчислення ознак Зерніке [5, 7, 8]. В цьому розділі використано факт існування зв'язку між комплексними значеннями інваріантів (5) та геометричними моментами (1) [5]; також використано ідею з роботи [8] для синтезу пірамідальної схеми обчислень.

Продemonструємо існування зв'язку між геометричними моментами (1) та комплексними моментами Зерніке (5), проаналізувавши підінтегральний вираз в (5) і враховуючи те, що область інтегрування є одиничним колом:

$$\begin{aligned} r^k &= (x^2 + y^2)^{\frac{k}{2}}, \\ e^{-iq\theta} &= (e^{-i\theta})^q = (\cos\theta - i\sin\theta)^q = \\ &= (x^2 + y^2)^{-\frac{1}{2}} (x - iy)^q = \\ &= (x^2 + y^2)^{-\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^q \binom{q}{m} (-i)^m x^{q-m} y^m. \end{aligned} \quad (7)$$

Для чисельного інтегрування виразу (5) використаємо формулу прямокутників, від полярної системи координат зробимо перехід до

декартової, враховуючи (2), (7) та вираз (6):

$$\bar{A}_{p,q} = \sum_{k=q}^p B_{pqk} \sum_{j=0}^k \binom{s}{j} \sum_{m=0}^q (-1)^m \binom{q}{m} \mu_{q-\zeta, \zeta} \quad (8)$$

Тут $s = \frac{k-q}{2}$, $\zeta = 2j+m$, $\mu_{q-\zeta, \zeta}$ – геометричний момент (2). При реалізації алгоритму підрахунку значень (8) слід врахувати, що моменти $\mu_{q-m, m}$ мають бути обчислені всередині одиничного кола. Цей факт не обов'язково використовувати при реалізації квадратурної формули для рівняння (2). Матрицю моментних значень μ_{pq} можна перетворити в матрицю нормалізованих щодо одиничного кола значень шляхом простого перетворення з урахуванням біноміальної формули Ньютона, яка виникає при заміні змінних вигляду $\bar{x} = \frac{x-D}{D-1}$, $D = (N+1)/2$, де N – одна з лінійних розмірностей цифрового зображення.

Обчислення набору ознак Зерніке за схемою (8) є достатнім для багатьох практичних потреб з точки зору швидкодії і точності, яка насамперед залежить від точності значень μ_{pq} [4]. Від циклічних операцій додавання в (8) можна позбавитися, враховуючи те, що матриця значень B_{pqk} є розрідженою і, як наслідок, кількість кругових поліномів Зерніке інваріантних ознак $\bar{A}_{p,q}$ є невеликою. В роботі [8] показано, що для обчислення серії значень $\bar{A}_{p,q}$, якщо повторювання стає, можна використати пірамідальну схему. Враховуючи цей факт, поступово спростуємо вираз (8) для інтервалу значень параметрів $p = 0..7$, $q = 0..7$. При $q = 0$ отримаємо

$$\begin{aligned} A_{00} &= \frac{\xi_{00}}{\pi} \xi_0 = \mu_{00}; \\ A_{20} &= \frac{3}{\pi} (-\xi_0 + 2\xi_1) \xi_1 = \mu_{02} + \mu_{20}; \\ A_{40} &= \frac{5}{\pi} (\xi_0 - 6\xi_1 + 6\xi_2) \xi_2 = \mu_{04} + 2\mu_{22} + \mu_{40}; \\ A_{60} &= \frac{7}{\pi} (-\xi_0 + 12\xi_1 - 30\xi_2 + 20\xi_3) \end{aligned} \quad (9)$$

Враховуючи нормування (3), отримаємо $\mu_{00} = 1$, $\mu_{01} = \mu_{10} = 0$. Можна помітити, що вираз $A_{p,0}$ приймає дійсні значення. Для $q = 1$ отримаємо

$$\begin{aligned} A_{11} &= \frac{2}{\pi} \xi_4 \xi_4 = \mu_{01} - i\mu_{10} = 0; \\ A_{31} &= \frac{12}{\pi} \xi_5 \xi_5 = \mu_{03} + \mu_{21} - i(\mu_{12} + \mu_{30}); \\ A_{51} &= \frac{12}{\pi} (5\xi_6 - 6\xi_5); \\ A_{71} &= \frac{40}{\pi} (6\xi_5 - 12\xi_6 + 7\xi_7) \end{aligned} \quad (10)$$

При $q = 2, 3$ отримаємо

$$\begin{aligned} A_{22} &= \frac{3}{\pi} \xi_8 \xi_8 = \mu_{02} - 2i\mu_{11} - \mu_{20}; \\ A_{42} &= \frac{5}{\pi} (4\xi_9 - 3\xi_8) \xi_9 = \mu_{04} - \mu_{40} - 2i(\mu_{13}); \\ A_{62} &= \frac{7}{\pi} (6\xi_8 - 20\xi_9 + 15\xi_{10}); \\ A_{33} &= \frac{4}{\pi} \xi_6 \xi_6 = \mu_{03} - 3\mu_{21} + i(\mu_{30} - 3\mu_{12}); \\ A_{53} &= \frac{6}{\pi} (5\xi_c - 4\xi_b); \\ \xi_c &= \mu_{05} - 2\mu_{23} - 3\mu_{41} + i(\mu_{50} - 3\mu_{14}); \\ A_{73} &= \frac{8}{\pi} (10\xi_b - 30\xi_c + 21\xi_d); \\ \xi_d &= \mu_{07} - \mu_{25} - 5\mu_{43} - 3\mu_{61}. \end{aligned} \quad (11)$$

Випишемо аналогічні формули для $q = 4, 5, 6, 7$:

$$\begin{aligned} A_{44} &= \frac{5}{\pi} \xi_e \xi_e = \mu_{04} + \mu_{40} - 6\mu_{22} + 4i(\mu_{11}); \\ A_{64} &= \frac{7}{\pi} (6\xi_f - 5\xi_e); \\ A_{55} &= \frac{6}{\pi} \xi_g; \\ A_{75} &= \frac{8}{\pi} (7\xi_h - 6\xi_g); \\ A_{66} &= \frac{7}{\pi} (\mu_{06} + 15(\mu_{24} - \mu_{42}) - \mu_{60}) + \\ &\quad + \frac{7}{\pi} i(20\mu_{33} - 6\mu_{15} - 6\mu_{51}); \\ A_{77} &= \frac{8}{\pi} (\mu_{07} - 7(\mu_{61} - 5\mu_{43} + 3\mu_{25})) + \\ &\quad + \frac{8}{\pi} i(\mu_{70} - 7(\mu_{16} - 5\mu_{34} + 3\mu_{52})). \end{aligned} \quad (12)$$

Можна побачити, що для обчислення ознак $(p+1)$ -го порядку використовується набір доданків, необхідних для підрахунку інваріанту p -го порядку. Комплексні інваріанти стають дійсними при $p = 0$.

Формули (10), (11), (12) є прототипом для реалізації надшвидкого алгоритму обчислення інваріантних ознак Зерніке. Використовуючи парадигму вертикальних або горизонтальних обчислень (розширення SSE2 або SSE3 відповідно), алгоритми можна векторизувати.

Для безпосереднього підрахунку ознак Зерніке за формулою (8), базуючись на значеннях геометричних моментів [4], з урахуванням біноміального перетворення (нормування матриці моментних значень), необхідно А додавань

$$A = N^2(R+1) + N\rho(R+1)^2 + 4(\rho(R+1)-1) + T(R) + \rho(R) + \eta(R) - \tau(R), \quad (13)$$

та М множень

$$M = 4(\rho(R+1)-1) + 2T(R) + \rho(R) + \eta(R) \quad (14)$$

Тут $\tau(R) = (R+1)(R+3)/4 - 2$ – сумарна кількість інваріантів Зерніке для парних R , $(R/2+1)^2$ – для непарних R , значення

$$T(R) = \sum_{n=0}^R \left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + 1 \right) \left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor + 4 \right), \quad N - \text{лінійний}$$

розмір зображення, $\eta(R)$ – кількість мономіальних добутоків моментів,

$$\eta(R) = \sum_{n=0}^R \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (n-2k+1) \rho(k+1), \quad \rho(\varepsilon) = \varepsilon(\varepsilon+1)/2.$$

З виразів (13), (14) видно, що кількість множень не залежить від розміру вхідного зображення.

Висновки

Описано класичні, широкоживані математичні моделі інтегральних ознак для розпізнавання цифрових зображень. Проаналізовано основні підходи до різних видів інваріантності (стійкості відносно певних типів спотворень). Розглянуто узагальнену модель синтезу інваріантних до повороту ознак, показано, що популярні інваріанти Зерніке є її частинним випадком. Запропоновано ефективний алгоритм обчислення моментів Зерніке, що базується на безпосередньому зв'язку інваріантів із значеннями геометричних моментів. Для невеликих значень параметрів (достатніх для практичного використання) спрощено вирази та запропоновано ефективну «ліфтинг»-схему підрахунку інваріантів. Проаналізовано обчислювальну складність алгоритму.

Вказаний підхід до синтезу інваріантних ознак є перспективним в плані теоретичних

досліджень – виведення нових типів моментних ознак з певних ортогональних функціональних базисів так і в практичному аспекті – використання результатів для багатьох задач розпізнавання, індексації та пошуку візуальних даних.

В подальшому автором планується поширити результати на випадок непрямокутної схеми квантування зображень.

Список використаних джерел

1. Hu M.K. Visual pattern recognition by moment invariants //IEEE Transactions on Information Theory. – 1962. – 8. – P.179–187.
2. Задирака В.К., Мельникова С.С. Цифровая обработка сигналов. – К: Наукова Думка, 1993. – 294с.
3. Flusser J., Suk T. Degraded Image Analysis: An Invariant Approach //IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. – 1998. – 20, N 6. – P.590–603.
4. Гаращенко Ф.Г., Козлов Н.В. Разработка и реализация эффективных алгоритмов вычисления геометрических моментов //Компьютерная Математика. – 2008. – 1. – С.88–96.
5. Teague M.R. Image analysis via the general theory of moments //J. Opt. Soc. Amer. – 1980. – 70. – P.920–930.
6. Rouze N.C., Soon V.C., Hutchins G.D. On the connection between the Zernike moments and Radon transform of an image //Pattern Recogn. Lett. – 2006. – 27, N 6. – P.636–642.
7. Rodtook A., Makhanov S.A. Filter bank method to construct rotationally invariant moments for pattern recognition //Pattern Recogn. Lett. – 2007. – 28, N 12. – P.1492–1500.
8. Amayeh G., Bebis G., Erol A., Nicolescou M. Accurate and efficient computation of high order Zernike moments //Inter. Symp. on Visual Computing. – 2005. – P.462–469.

Надійшла до редколегії 15.11.2009

УДК 519.21

Є. О. Луценко, асп.,
С. І. Доценко, к.ф.-м.н., доц.

Матричні ігри з обмеженням на множини стратегій

В роботі розглядається матрична гра, в якій в залежності від стану природи один з гравців має обмеження на вибір своїх стратегій. Для даної моделі знайдено оптимальні мішані стратегії гравців.

Ключові слова: матрична гра, мішані стратегії, стани природи.

E-mail: deforder@mail.ru, sergei204@ukr.net
Статтю представив д.ф.-м.н., проф.
Хусаїнов Д.Я.

Розглянемо звичайну матричну гру між двома гравцями з одиничною матрицею виплат $A = (a_{ij})$ розміру $n \times n$. Іншими словами, у кожного з гравців є n стратегій на вибір, і в разі співпадіння їх номерів другий гравець виплачує умовну грошову одиницю першому. Одинична матриця не має сідлової точки, тому гра не має розв'язку в чистих стратегіях. Надалі позначатимемо через $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ та $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ мішані стратегії відповідно першого та другого гравців. При виборі другим гравцем чистої стратегії j математичного очікування виразу першого гравця дорівнюватиме $E_j^I = \sum_{i=1}^n x_i a_{ij} = x_j$. Таким чином, максимізуючи величину $\min_{j \in 1, n} E_j^I = \min_{j \in 1, n} x_j$, перший гравець має дотримуватись мішаної стратегії $x = \left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right)$ (див. наприклад, [1]).

Позначимо через V_n множини усіх векторів довжини n з невід'ємними координатами, сума яких дорівнює одиниці. Іншими словами, V_n - це множина усіх доступних мішаних стратегій. Тепер припустимо, що перший гравець може

Іє. О. Lutsenko, post-grad.,
S. I. Dotsenko, ph.d.

Matrix games with bounded strategy set

The subject of research is the matrix games in which, depending on nature state, one of the players has bounded strategy set. For both players optimal strategy set is found.

Key Words: Matrix game, mixed strategy, nature states.

обирати стратегії лише з множини $V_n^* \subseteq V_n$. Також нехай другому гравцю відома ця множина, та для нього обмежень на вибір стратегії немає. Пізніше ми аргументуємо таку дивну і суперечливу на перший погляд модифікацію. Якщо мішана стратегія $\left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right)$ потрапляє до V_n^* , то вона, звичайно, залишиться оптимальним розв'язком для першого гравця. Якщо рівномірний розподіл не належить V_n^* , то множини оптимальних розв'язків X_1^* складуть стратегії з найбільшим мінімальним елементом (оскільки першому гравцю потрібно мінімізувати значення $\min_{j \in 1, n} E_j^I = \min_{j \in 1, n} x_j$).

Тепер розглянемо, в якому випадку такий підхід є доцільним. Нехай у звичайній матричній грі з одиничною матрицею виплат додатково існує декілька станів природи. Кожен стан природи вносить заборону першому гравцю обирати певні стратегії. Розподіл ймовірностей знаходження природи в у кожному стані відомий обом гравцям. Усього різних станів природи може бути $2^n - 1$ (стільки ж, скільки непорожніх підмножин множини чистих стратегій). Для ненульового вектора v довжини n , що складається лише з нулів

та одиниць, позначатимемо через p_i ймовірність знаходження природи в такому стані, що першому гравцю дозволено обирати стратегії, яким відповідають одиничні координати вектора v . Таким чином перший гравець може лише встановити мішані стратегії окремо для кожного стану природи. Позначатимемо через x'_i ймовірність обрати стратегію i при стані природи, що відповідає вектору v (тому $x'_i = 0$ для усіх i таких, що $v_i = 0$). Тому результуюча мішана стратегія першого гравця буде визначатися "композицією" розподілів станів природи з розподілами стратегій в кожному випадку. За формулою повної ймовірності, $x_i = \sum_v p_v x'_i$. Таким способом в загальному випадку можна отримати лише деяку підмножину V_n^* множини V_n . А задача зводиться до перевірки, чи належить рівномірний розподіл до V_n^* , і в разі негативної відповіді - до пошуку розподілу з максимальною найменшою координатою.

Приклад 1.

Нехай $n = 2$, $p_{10} = \frac{1}{7}$, $p_{11} = \frac{2}{7}$, $p_{01} = \frac{5}{7}$.

Тоді $x_i = \sum_v p_v x'_i = p_{10} + p_{11} x'_{11} = \frac{1}{7} + \frac{1}{7} x'_{11}$.

Звідси, $x_1 \in \left[\frac{1}{7}, \frac{2}{7}\right]$, а $x_2 \in \left[\frac{5}{7}, \frac{6}{7}\right]$. Таким

чином, перший гравець може обрати лише мішані стратегії з указаними обмеженнями на координати, що є власною підмножиною V_2 . Очевидно, що перша компонента буде найменшою, тому оптимальна результуюча мішана стратегія дорівнюватиме

$x = \left(\frac{2}{7}, \frac{5}{7}\right)$, що відповідатиме розподілу

$x'_{11} = 1$, $x'_{10} = 0$.

Тепер для зручності аналізу задачі переформулюємо її в теоретико-множинну.

Нехай задано множини $M_1, M_2, \dots, M_n$, та $S = \bigcup_{i \in \overline{1, n}} M_i$. На їх об'єднанні визначена деяка міра μ так, що для кожної підмножини $X \subset S$ та довільних додатних α, β , таких що $\alpha + \beta = \mu(X)$, існує

розбиття $X = Y \cup Z$, де $\mu(Y) = \alpha$ та $\mu(Z) = \beta$. Для довільного ненульового вектора v довжини n , що складається лише з нулів та одиниць, позначимо $M_v = \{x \in S : (x \in M_i, v_i = 1) \wedge (x \in M_j, v_j = 0)\}$

Тепер ототожнимо множини M_i зі станами природи, що відповідають векторам v обмежень на вибір стратегій першого гравця, та покладемо $\mu(S) = 1$. Фактично визначення мішаної стратегії для певного стану природи v означає розбиття множини M_v між тими стратегіями i , для яких $v_i = 1$. Тобто, нам потрібно визначити умови, за яких можливо розбити $S = \bigcup_{i \in \overline{1, n}} S_i$ так, щоб $S_i \subseteq M_i$ та

$\mu(S_i) = \frac{\mu(S)}{n} = \frac{1}{n}$ для кожного $i \in \overline{1, n}$. При

цьому міра $\mu(S_i)$ ототожнюватиметься з i -тою компонентою мішаної стратегії першого гравця. Якщо ж таке розбиття неможливе, то потрібно вказати алгоритм пошуку такого розбиття $S = \bigcup_{i \in \overline{1, n}} S_i$.

$S_i \subseteq M_i$, щоб величина $\min_{i \in \overline{1, n}} \mu(S_i)$ була максимальною.

Оскільки $S_i \subseteq M_i$, то $\mu(S_i) \leq \mu(M_i)$. Звідси випливає очевидна необхідна умова існування шуканого розбиття:

$\mu\left(\bigcup_{i \in J} M_i\right) \geq |J| \cdot \frac{1}{n}$ для кожної множини $J \subseteq \overline{1, n}$. Покажемо, що для $n = 2$ та $n = 3$ ці умови є достатніми.

Лема. Нехай $n = 3$, $S = M_1 \cup M_2 \cup M_3$, а також виконуються нерівності $\mu(M_1) \geq \frac{1}{3}$, $\mu(M_2) \geq \frac{1}{3}$, $\mu(M_3) \geq \frac{1}{3}$, $\mu(M_1 \cup M_2) \geq \frac{2}{3}$, $\mu(M_2 \cup M_3) \geq \frac{2}{3}$, $\mu(M_1 \cup M_3) \geq \frac{2}{3}$, де $\frac{1}{3} = \frac{\mu(S)}{3}$. Тоді існує розбиття

$S = S_1 \cup S_2 \cup S_3$ таке, що $S_i \subseteq M_i$ та $\mu(S_i) = \frac{1}{3}$ для кожного $i \in \overline{1, 3}$.

Доведення. Зауважимо, що доведення буде конструктивним, тобто ми вкажемо алгоритм відповідного розбиття. Фактично нам потрібно "розділити" M_{110} між множинами S_1 і S_2 , M_{011} - між множинами S_2 і S_3 , M_{101} - між

множинами S_1 і S_2 , а M_{111} – між усіма трьома множинами.

Розглянемо два випадки:

Випадок 1: нехай

$$\mu(M_{001}) + \mu(M_{101}) + \mu(M_{011}) \leq m.$$

Тоді відносимо множини M_{101} і M_{011} до S_1 . Оскільки

$$\mu(M_{001}) + \mu(M_{101}) + \mu(M_{011}) + \mu(M_{111}) = \mu(M_3) \geq m$$

то від множини M_{111} можна відділити частину M_{111}^1 таку, що

$$\mu(M_{111}^1) = m - \mu(M_{001}) - \mu(M_{101}) - \mu(M_{011}).$$

Покладемо

$$S_1 = M_{001} \cup M_{101} \cup M_{011} \cup M_{111}^1. \text{ Таким}$$

чином, множина S_1 вже сформована і міра від неї дорівнює m .

Залишилось розподілити M_{110} і $M_{111} \setminus M_{111}^1$ між S_1 та S_2 . Для цього достатньо обрати довільні $M_{110}^1 \subseteq M_{110}$ та $M_{111}^1 \subseteq M_{111} \setminus M_{111}^1$

з умови $\mu(M_{110}^1) + \mu(M_{111}^1) = m - \mu(M_{100})$. Це завжди можна зробити, оскільки

$$\begin{aligned} \mu(M_{110}) + \mu(M_{111} \setminus M_{111}^1) &= \\ &= 2m - \mu(M_{100}) - \mu(M_{010}). \end{aligned}$$

Поклавши $S_1 = M_{100} \cup M_{110}^1 \cup M_{111}^1$,

отримаємо $\mu(S_1) = m$. Залишилось

визначити $S_2 = M_{010} \cup M_{110}^2 \cup M_{111}^2$, де

$$M_{110}^2 = M_{110} \setminus M_{110}^1,$$

$$M_{111}^2 = M_{111} \setminus (M_{111}^1 \cup M_{111}^1).$$

Випадок 2: нехай

$$\mu(M_{001}) + \mu(M_{101}) + \mu(M_{011}) > m.$$

Оберемо підмножини $M'_{101} \subseteq M_{101}$ та

$$M'_{011} \subseteq M_{011} \text{ так, щоб}$$

$$\mu(M'_{101}) = \max\{0, \mu(M_{100}) + \mu(M_{101}) - m\},$$

$$\mu(M'_{011}) = \max\{0, \mu(M_{010}) + \mu(M_{011}) - m\}$$

(тобто множини M'_{101} та M'_{011} можуть бути порожніми).

Доведемо, що $\mu(M_{001} \cup M'_{101} \cup M'_{011}) \leq m$.

Припустимо, що це не так, тобто

$$\mu(M_{001} \cup M'_{101} \cup M'_{011}) > m. \text{ Якщо обидві}$$

міри $\mu(M'_{101})$ та $\mu(M'_{011})$ додатні, то з

означень M'_{101} і M'_{011} маємо

$$\mu(M_{101} \cup (M_{101} \setminus M'_{101})) = m \text{ та}$$

$$\mu(M_{010} \cup (M_{011} \setminus M'_{011})) = m. \text{ Звідси,}$$

$$\mu(M_{100} \cup M_{010} \cup M_{001} \cup M_{101} \cup M_{011}) > 3m$$

що неможливо. Якщо лише, скажімо,

$$\mu(M'_{011}) > 0, \text{ то } \mu(M_{010} \cup (M_{011} \setminus M'_{011})) = m.$$

$$\text{Звідси, } \mu(M_{010} \cup M_{001} \cup M_{101}) > 2m,$$

що неможливо, оскільки

$$M_{010} \cup M_{001} \cup M_{101} = S \setminus M_1.$$

Якщо ж $\mu(M'_{101}) = 0$ та $\mu(M'_{011}) = 0$, то

припущена нерівність неможлива в силу

$$\mu(M_{001}) = \mu(S) - \mu(M_1 \cup M_2) \leq m. \text{ Таким}$$

чином наше припущення невірне, і

$$\mu(M_{001} \cup M'_{101} \cup M'_{011}) \leq m.$$

Враховуючи, що

$$\mu(M_{001} \cup M'_{101} \cup M'_{011}) \leq m \text{ та}$$

$$\mu(M_{001} \cup M_{101} \cup M'_{011}) > m, \text{ то можна}$$

обрати такі множини M_{101}^1 та M_{011}^1 так, що

$$M'_{101} \subseteq M_{101}^1 \subseteq M_{101}, M'_{011} \subseteq M_{011}^1 \subseteq M_{011}$$

$$\text{та } \mu(M_{001} \cup M_{101}^1 \cup M_{011}^1) = m. \text{ Покладемо}$$

$$S_1 = M_{001} \cup M_{101}^1 \cup M_{011}^1.$$

$$M_{101}^2 = M_{101} \setminus M_{101}^1, M_{011}^2 = M_{011} \setminus M_{011}^1.$$

Оскільки $M'_{101} \subseteq M_{101}^1$ та $M'_{011} \subseteq M_{011}^1$, то

$$\mu(M_{100} \cup M_{101}^1) \leq m \text{ та } \mu(M_{010} \cup M_{011}^1) \leq m.$$

Залишилось довільним чином розбити

$$M_{110} = M_{110}^1 \cup M_{110}^2 \text{ та } M_{111} = M_{111}^1 \cup M_{111}^2$$

так, щоб

$$\mu(M_{110}^1 \cup M_{111}^1) = m - \mu(M_{100} \cup M_{010}), \text{ та}$$

$$\text{покласти } S_1 = M_{100} \cup M_{101}^1 \cup M_{110}^1 \cup M_{111}^1$$

$$\text{та } S_2 = M_{010} \cup M_{011}^1 \cup M_{110}^2 \cup M_{111}^2.$$

Зауваження 1. Якщо в лемі 1 покласти $M_{101} = M_{011} = M_{111} = \emptyset$ та $M_{001} = m$, то отримаємо відповідне твердження для $n = 2$.

Зауваження 2. Описане в доведенні лемі 1 розбиття не є єдиним розв'язком поставленої задачі навіть з точністю до значень мір множин, на які розбиваються M_{110} ,

M_{101} , M_{011} та M_{111} . Наприклад, для

випадку $n = 3$,

$$\mu(M_{100}) = \mu(M_{010}) = \mu(M_{001}) = \mu(M_{101}) =$$

$$= \mu(M_{011}) = \mu(M_{110}) = \frac{1}{6}$$

та $\mu(M_{111}) = 0$, що відповідатиме початковим умовам

$$p_{100} = p_{010} = p_{001} = p_{101} = p_{011} = p_{110} = \frac{1}{6},$$

для довільного $x \in \left[0, \frac{1}{6}\right]$ розподіли

$$x_{101} = \left(x, 0, \frac{1}{6} - x\right), x_{011} = \left(0, \frac{1}{6} - x, x\right) \text{ та}$$

$$x_{110} = \left(\frac{1}{6} - x, x, 0\right) \text{ будуть оптимальними,}$$

тобто результуючий загальний розподіл

$$\text{дорівнюватиме } \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right). \text{ Але для } n=2$$

оптимальний розподіл буде єдиним з точністю до значень мір множин.

Враховуючи розглянуту аналогію, сформулюємо відповідне твердження про оптимальний розв'язок для матричної гри.

Твердження. Нехай в матричній грі між двома гравцями з одиничною матрицею виплат розміру 3×3 існують стани природи, що накладають обмеження на вибір стратегій для першого гравця. Вважатимемо, що обом гравцям відомі ймовірності p_v перебування природи в стані $v \in \{0,1\}^3 \setminus \{0\}^3$ (одинички відповідають стратегіям, які дозволено обирати першому гравцю у відповідному стані). Також нехай для цих ймовірностей виконуються наступні нерівності:

$$\sum_{v=1}^6 p_v \geq \frac{1}{3} \text{ та } \sum_{i=1+2+3} p_v \geq \frac{2}{3}$$

для кожного $i \in \{1,2,3\}$ та для довільних $i, j \in \{1,2,3\}, i \neq j$ відповідно.

Тоді для першого гравця існуватимуть такі мішані розподіли вибору стратегій x_v для кожного стану природи v , що їх результуючий розподіл $x = \left(\sum_v p_v x_v\right)_{i \in \{1,2,3\}}$

$$\text{дорівнюватиме } \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right).$$

Доведення. Впливає з леми 1 та розглянутої аналогії між матричною грою та теоретико-множинною задачею.

Опишемо відповідний алгоритм побудови шуканої сім'ї розподілів x_v , слідуючи доведенню леми 1.

Якщо $p_{001} + p_{101} + p_{011} \leq \frac{1}{3}$, то розподіли

знаходяться за формулами $x_{101} = (0,0,1)$,

$x_{011} = (0,0,1)$,

$$x_{111} = \left(\frac{\beta}{\beta+\gamma} \frac{(p_{111}-\alpha)}{p_{111}}, \frac{\gamma}{\beta+\gamma} \frac{(p_{111}-\alpha)}{p_{111}}, \frac{\alpha}{p_{111}}\right)$$

$$x_{110} = \left(\frac{\beta}{\beta+\gamma}, \frac{\gamma}{\beta+\gamma}, 0\right), \text{ де}$$

$$\alpha = \frac{1}{3} - p_{001} - p_{101} - p_{011}, \beta = \frac{1}{3} - p_{100},$$

$$\gamma = \frac{1}{3} - p_{010}.$$

Якщо ж $p_{101} + p_{101} + p_{011} > \frac{1}{3}$, то покладемо

$$\alpha = \max\left\{0, p_{101} + p_{011} - \frac{1}{3}\right\},$$

$$\beta = \max\left\{0, p_{010} + p_{011} - \frac{1}{3}\right\},$$

$$\gamma = \frac{p_{101} - \alpha}{p_{101} + p_{011} - \alpha - \beta}, \delta = \frac{p_{011} - \beta}{p_{101} + p_{011} - \alpha - \beta}$$

та $\lambda = \frac{1}{3} - p_{001} - \alpha - \beta$. Тоді

$$x_{101} = \left(\frac{p_{101} - \alpha - \gamma\lambda}{p_{101}}, 0, \frac{\alpha + \gamma\lambda}{p_{101}}\right),$$

$$x_{011} = \left(0, \frac{p_{011} - \beta - \delta\gamma}{p_{011}}, \frac{\beta + \delta\gamma}{p_{011}}\right),$$

$$x_{111} = x_{110} = \left(\frac{\mu}{\mu+\nu}, \frac{\nu}{\mu+\nu}, 0\right), \text{ де}$$

$$\mu = \frac{1}{3} - p_{100} - p_{101} + \alpha + \gamma\lambda \text{ та}$$

$$\nu = \frac{1}{3} - p_{010} - p_{011} + \beta + \delta\lambda.$$

Проілюструємо алгоритм прикладами.

Приклад 2.

Нехай $p_{100} = \frac{7}{30}, p_{010} = \frac{1}{5}$.

$$p_{001} = \frac{1}{10}, p_{110} = \frac{1}{10}, p_{101} = \frac{1}{15}, p_{011} = \frac{2}{15},$$

$$p_{111} = \frac{1}{6}. \text{ Підстановка показує, що усі}$$

умови твердження 1 виконуються.

Побудуємо розподіли $x_{110}, x_{101}, x_{011}$ та

x_{111} . Оскільки

$$p_{001} + p_{101} + p_{011} = \frac{1}{10} + \frac{1}{15} + \frac{2}{15} = \frac{9}{30} < \frac{1}{3},$$

то $x_{101} = (0, 0, 1)$ та $x_{011} = (0, 0, 1)$. Звідси,

$$x_{111}^3 = \frac{\frac{1}{3} - p_{001} - p_{101} - p_{011}}{p_{111}} = \frac{1}{5}. \text{ Оскільки}$$

першій і другій стратегії не вистачає $\frac{3}{30}$ та

$\frac{4}{30}$ до значення $\frac{1}{3}$ відповідно, то p_{110} та

залишок p_{111} розподіляються між ними у

пропорції 3:4, тобто $x_{110} = \left(\frac{3}{7}, \frac{4}{7}, 0\right)$ та

$$x_{111} = \left(\frac{3}{7}, \frac{4}{5}, \frac{4}{5}, \frac{4}{5}, \frac{1}{5}\right) = \left(\frac{12}{35}, \frac{16}{35}, \frac{1}{5}\right).$$

Приклад 3. Нехай $p_{100} = \frac{1}{6}$, $p_{010} = \frac{2}{15}$,

$$p_{001} = \frac{1}{5}, \quad p_{110} = \frac{1}{6}, \quad p_{101} = \frac{1}{15}, \quad p_{011} = \frac{7}{30},$$

$$p_{111} = \frac{1}{30}. \text{ Підстановка показує, що усі}$$

умови твердження 1 виконуються. Оскільки

$$p_{001} + p_{101} + p_{011} = \frac{1}{5} + \frac{1}{15} + \frac{7}{30} = \frac{1}{2} > \frac{1}{3}, \text{ то}$$

$$\text{введемо } \alpha = \max\left\{0, p_{100} + p_{101} - \frac{1}{3}\right\} = 0 \quad \text{і}$$

$$\beta = \max\left\{0, p_{010} + p_{011} - \frac{1}{3}\right\} = \frac{1}{30}. \quad \text{Третій}$$

стратегії не вистачає до третини величини

$$\lambda = \frac{1}{3} - p_{001} - \alpha - \beta = \frac{1}{10}. \quad \text{Оскільки}$$

$$p_{101} - \alpha = \frac{1}{15}, \quad \text{а} \quad p_{011} - \beta = \frac{3}{15}, \quad \text{то}$$

поповнювати цей залишок за рахунок станів 101 та 011 ми будемо у пропорції

1:3 відповідно. Звідси $\gamma = \frac{1}{4}$, $\delta = \frac{3}{4}$,

$$x_{101} = \left(\frac{p_{101} - \alpha - \gamma\lambda}{p_{101}}, 0, \frac{\alpha + \gamma\lambda}{p_{101}}\right) = \left(\frac{5}{8}, 0, \frac{3}{8}\right)$$

$$x_{011} = \left(0, \frac{p_{011} - \beta - \delta\gamma}{p_{011}}, \frac{\beta + \delta\gamma}{p_{011}}\right) = \left(0, \frac{15}{28}, \frac{13}{28}\right)$$

Тепер першій та другій стратегії не

вистачає $\frac{5}{40}$ та $\frac{3}{40}$ до значення $\frac{1}{3}$

відповідно, то p_{110} і p_{111} розподіляються

між ними у пропорції 25:9, тобто

$$x_{110} = x_{111} = \left(\frac{5}{8}, \frac{3}{8}, 0\right).$$

Твердження 1 дає нам необхідні і достатні умови існування набору таких мішаних стратегій для кожного стану, що їх результуючий розподіл є рівномірним. Якщо деякі з вказаних нерівностей не виконуються, то рівномірного розподілу досягти неможливо. У такому випадку нам потрібно максимізувати значення найменшої компоненти результуючої мішаної стратегії.

Для зручності спочатку перейдемо до теоретико-множинної інтерпретації. Таким чином, ми припускаємо невиконання однієї з умов $\mu(M_1) \geq t$, $\mu(M_2) \geq t$,

$$\mu(M_3) \geq t, \quad \mu(M_1 \cup M_2) \geq 2t,$$

$$\mu(M_1 \cup M_3) \geq 2t, \quad \mu(M_2 \cup M_3) \geq 2t.$$

Зауважимо, що $\mu(S_i) \leq \mu(M_i)$ та

$$\mu(S_i) + \mu(S_j) = \mu(S_i \cup S_j) \leq \mu(M_i \cup M_j).$$

Звідси $\min_{i \in \{1,3\}} \mu(S_i) \leq \min_{i \in \{1,3\}} \mu(M_i)$ та

$$\min_{i \in \{1,3\}} \mu(S_i) \leq \min_{i,j \in \{1,3\}} \frac{\mu(M_i \cup M_j)}{2}. \text{ Тому}$$

наступна лема дає відповідь на проблему максимізації величини $\min_{i \in \{1,3\}} \mu(S_i)$.

Лема 2. Нехай $S = M_1 \cup M_2 \cup M_3$. Відомо, що не виконується принаймні одна з нерівностей $\mu(M_1) \geq t$, $\mu(M_2) \geq t$, $\mu(M_3) \geq t$, $\mu(M_1 \cup M_2) \geq 2t$, $\mu(M_2 \cup M_3) \geq 2t$,

$$\mu(M_1 \cup M_3) \geq 2t, \quad \text{де } t = \frac{\mu(S)}{3}. \text{ Тоді існує}$$

розбиття $S = S_1 \cup S_2 \cup S_3$ таке, що $S_i \subseteq M_i$

та

$$\min_{i \in \{1,3\}} \mu(S_i) =$$

$$= \min\left\{\min_{i \in \{1,3\}} \mu(M_i), \min_{i,j \in \{1,3\}} \frac{\mu(M_i \cup M_j)}{2}\right\}$$

Доведення. Розглянемо два випадки і у кожному вкажемо алгоритм розбиття.

Нехай

$$\min\left\{\min_{i \in \{1,3\}} \mu(M_i), \min_{i,j \in \{1,3\}} \frac{\mu(M_i \cup M_j)}{2}\right\} = \min_{i \in \{1,3\}} \mu(M_i)$$

Для визначеності вважатимемо, що $\min_{i \in \{1,3\}} \mu(M_i) = \mu(M_3) < t$. Тоді покладемо

$$S_3 = M_3. \quad \text{Якщо } \mu(M_{010}) \geq M_2, \quad \text{то}$$

покладемо $S_2 = M_{010}$, $S_1 = M_{100} \cup M_{110}$.

Оскільки $\mu(M_3) \leq \frac{\mu(M_1 \cup M_3)}{2}$, то

$\mu(S_1) \geq \mu(M_3)$. Якщо ж $\mu(M_{010}) < \mu(M_3)$, то

оберемо $M_{110}^2 \subseteq M_{110}$ таке, що

$\mu(M_{010} \cup M_{110}^2) = \mu(M_3)$. Це завжди можна

зробити за рахунок нерівності

$\mu(M_3) \leq \frac{\mu(M_2 \cup M_3)}{2}$. Тоді покладемо

$S_2 = M_{010} \cup M_{110}^2$, $S_1 = M_{100} \cup M_{110}^1$, де

$M_{110}^1 = M_{110} \setminus M_{110}^2$.

Тепер нехай

$$\min \left\{ \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \mu(M_i), \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \frac{\mu(M_i \cup M_j)}{2} \right\} =$$

$$= \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \frac{\mu(M_i \cup M_j)}{2}.$$

Для визначеності вважатимемо

$$\min_{i,j \in \{1,2,3\}} \frac{\mu(M_i \cup M_j)}{2} = \frac{\mu(M_1 \cup M_2)}{2} < t.$$

Звідси $\mu(M_{001}) > t$. Покладемо $S_3 = M_{001}$.

Оскільки $\mu(M_1) \geq \frac{\mu(M_1 \cup M_2)}{2}$ та

$\mu(M_2) \geq \frac{\mu(M_1 \cup M_2)}{2}$, то знайдуться такі

розбиття $M_{111} = M_{111}^1 \cup M_{111}^2$ та

$M_{110} = M_{110}^1 \cup M_{110}^2$, що

$\mu(M_{100} \cup M_{110}^1 \cup M_{111}^1) =$

$$= \mu(M_{010} \cup M_{110}^2 \cup M_{111}^2) = \frac{\mu(M_1 \cup M_2)}{2}.$$

Покладаючи $S_1 = M_{100} \cup M_{110}^1 \cup M_{111}^1$ та

$S_2 = M_{010} \cup M_{110}^2 \cup M_{111}^2$, отримаємо

шукане розбиття.

Зауваження 3. Для $n=2$ при невиконанні

однієї з умов $\mu(M_1) \geq t$, $\mu(M_2) \geq t$

існуватиме розбиття $S = S_1 \cup S_2$ таке, що

$S_i \subseteq M_i$ та $\min_{i \in \{1,2\}} \mu(S_i) = \min_{i \in \{1,2\}} \mu(M_i)$.

Доведення випливає з леми, якщо покласти

$M_{101} = M_{011} = M_{111} = \emptyset$ та $M_{001} = t$.

Тепер сформулюємо відповідне твердження для матричної гри.

Твердження 2. Нехай для ймовірностей p_i принаймні одна з наступних нерівностей не виконуються:

$$\sum_{v=1}^3 p_v \geq \frac{1}{3} \text{ для кожного } i \in \{1,2,3\};$$

$$\sum_{v=1 \vee v_j=1} p_v \geq \frac{2}{3} \text{ для довільних } i, j \in \{1,2,3\},$$

$i \neq j$.

Тоді для першого гравця існуватимуть такі мішані розподіли вибору стратегій x_i для кожного стану природи v , що для ретельного розподілу

$$x = \left(\sum_v p_v x_v^i \right)_{i \in \{1,2,3\}} \text{ виконуватиметься}$$

$$\min_{i \in \{1,2,3\}} x_i = \min \left\{ \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \sum_{v=1} p_v, \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1} p_v \right\}$$

Доведення. Випливає з леми 2 та розглянутої аналогії між матричною грою та теоретико-множинною задачею.

Опишемо відповідний алгоритм побудови шуканої сім'ї розподілів x_i , слідуючи доведенню леми 2.

Нехай

$$\min \left\{ \min_{i \in \{1,2,3\}} \sum_{v=1} p_v, \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1} p_v \right\} = \sum_{v=1} p_v.$$

Тоді $x_{101} = (0, 0, 1)$, $x_{011} = (0, 0, 1)$,

$x_{111} = (0, 0, 1)$. Якщо $p_{010} \geq \sum_{v=1} p_v$, то

$x_{110} = (1, 0, 0)$.

Інакше $x_{110} = \left(1 - \frac{\alpha}{p_{110}}, \frac{\alpha}{p_{110}}, 0 \right)$, де

$$\alpha = \sum_{v=1} p_v - p_{010}.$$

Якщо ж

$$\min \left\{ \min_{i \in \{1,2,3\}} \sum_{v=1} p_v, \min_{i,j \in \{1,2,3\}} \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1} p_v \right\} = \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1} p_v$$

то $x_{110} = (1, 0, 0)$ та $x_{011} = (0, 1, 0)$.

Позначимо $\alpha = 3t - p_{001}$.

$$\beta = \frac{\alpha}{2} - p_{100} - p_{101}, \gamma = \frac{\alpha}{2} - p_{010} - p_{011}.$$

$$\text{Тоді } x_{110} = x_{111} = \left(\frac{\beta}{\beta + \gamma}, \frac{\gamma}{\beta + \gamma}, 0 \right).$$

Проілюструємо алгоритм прикладами.

Приклад 4. Нехай $p_{100} = \frac{7}{30}$, $p_{010} = \frac{1}{5}$,
 $p_{001} = \frac{1}{15}$, $p_{110} = \frac{3}{10}$, $p_{101} = \frac{1}{15}$, $p_{011} = \frac{1}{10}$,
 $p_{111} = \frac{1}{30}$. Тоді

$$\min \left\{ \min_{i \in \{1,2\}} \sum_{v=1}^3 p_v, \min_{i,j \in \{1,2\}} \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1}^3 p_v \right\} =$$

$$= \sum_{v=1}^3 p_v = \frac{4}{15} < \frac{1}{3}$$

Звідси $x_{101} = (0, 0, 1)$, $x_{011} = (0, 0, 1)$.

$x_{111} = (0, 0, 1)$. Оскільки $p_{010} = \frac{3}{15} < \sum_{v=1}^3 p_v$,

то $x_{110} = \left(\frac{7}{9}, \frac{2}{9}, 0\right)$. Отримаємо

результуючий розподіл $x = \left(\frac{7}{15}, \frac{4}{15}, \frac{4}{15}\right)$.

Приклад 5. Нехай $p_{100} = \frac{1}{6}$, $p_{010} = \frac{1}{5}$,
 $p_{001} = \frac{12}{30}$, $p_{110} = \frac{1}{10}$, $p_{101} = \frac{1}{30}$, $p_{011} = \frac{1}{15}$,
 $p_{111} = \frac{1}{30}$. Тоді

$$\min \left\{ \min_{i \in \{1,2\}} \sum_{v=1}^3 p_v, \min_{i,j \in \{1,2\}} \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1}^3 p_v \right\} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{v=1 \vee v_j=1}^3 p_v = \frac{3}{5} < \frac{2}{3}$$

Звідси $x_{101} = (1, 0, 0)$, $x_{011} = (0, 1, 0)$.

Позначимо $\alpha = 1 - p_{001} = \frac{9}{15}$.

$$\beta = \frac{\alpha}{2} - p_{100} - p_{101} = \frac{1}{10}.$$

$$\gamma = \frac{\alpha}{2} - p_{010} - p_{011} = \frac{1}{30}.$$

Звідси p_{110} та p_{111} потрібно розділити між першою та другою стратегією у співвідношенні 3:1, тобто

$$x_{110} = x_{111} = \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0\right).$$

Отримаємо результуючий розподіл $x = \left(\frac{3}{10}, \frac{3}{10}, \frac{4}{10}\right)$.

Вище ми розглянули лише такі ігри, в яких матриця виплат була одиничною. Тому цікаво дослідити більш загальний випадок.

Нехай маємо матричну гру з довільною матрицею виплат $A = (a_{ij})$, у якій існують стани природи, що накладають обмеження на вибір стратегій для першого гравця. Нехай $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ та $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ - оптимальні мішані стратегії першого та другого гравців у відповідній задачі без обмежень. Зрозуміло, що якщо розподіл станів природи дозволяє першому гравцю обрати мішану стратегію x , то оптимальний розв'язок задачі з обмеженнями залишиться таким же. Тому виникає необхідність визначити, чи належить вектор x до тієї сукупності розподілів, які можуть бути отримані композицією розподілу станів природи та окремих стратегій першого гравця для кожного з них. У теоретико-множинній інтерпретації нам фактично потрібно розподілити $S = \bigcup_{i \in \{1, \dots, n\}} M_i$ між множинами

S_i не порівну, як у випадку з одиничною матрицею виплат, а відповідно до компонент вектора x . Введемо допоміжні множини N_i такі, що не перетинаються з іншими множинами та $\mu(N_i) = 1 - x_i$, і приєднаємо їх до M_i відповідно. Таким чином міра S збільшиться на величину $\sum_{i \in \{1, \dots, n\}} \mu(N_i) = \sum_{i \in \{1, \dots, n\}} (1 - x_i) = n - 1$. Оскільки

$N_i \subset S_i$, то така модифікація вплине лише на міри S_i , збільшивши їх на величину $1 - x_i$. Але нашою метою було знайти таке розбиття $S = \bigcup_{i \in \{1, \dots, n\}} S_i$, щоб $\mu(S_i) = x_i$. А тепер із додаванням "уявних" множин N_i потрібно знайти розбиття $S = \bigcup_{i \in \{1, \dots, n\}} S_i$ для якого $\mu(S_i) = 1$. Таким чином задача зводиться до попередньої, і для випадку $n \leq 3$ можна застосувати Лему 1 та Твердження 1.

Надалі наведемо кілька прикладів застосування отриманих результатів до преферансу, подібних до розглянутих в [3]. Дані моделі описують ситуацію ловлі мізеру за умови, що у гравця два "пробої", а знести він може лише один.

Приклад 6.

Нехай гравець, що грає мізер, має такі карти

- ♠ - 7, 9, K;
- ♣ - 7, B, T;
- ♦ - 7, 8, 9, 10;
- ♥ - 7, 8.

Тут ♦, ♥ - чисті масті. ♠Т гравець знесе обов'язково, і головним питанням для нього буде вибір другої карти для знесення між ♠В та ♠К. В залежності від розкладу можуть ловитися лише ♦, або лише ♣, або ♠ та ♣ на вибір, або не ловиться жодна з мастей. Якщо ловиться ♦ та ♣ на вибір у суперників (вважасмо їх одним гравцем), виникає питання – яку масть вибрати?

Наближені ймовірності ловлі пробіїв у цьому випадку вважаються такими:

- лише ♠В – 0.15;
- лише ♠К – 0.21;
- обидва – 0.05.

В цьому випадку

$$\mu(S) = 0.15 + 0.21 + 0.05 = 0.41 \text{ та}$$

$$\mu(\clubsuit B) = 0.15 + 0.05 = 0.2 < \frac{\mu(S)}{2}. \text{ Отже,}$$

оптимальна стратегія того, хто грає мізер – завжди залишати ♠В, а оптимальна стратегія тих, хто ловить, у випадку, коли ловляться обидва пробії, – ловити ♠В.

Приклад 7.

Нехай гравець, що грає мізер, має такі карти

- ♠ - 7, 9, T;
- ♣ - 8, 9, 10;
- ♦ - 7, 8, 9, B, K;
- ♥ - 7.

Також нехай гравець має перший хід. Тут знову ♦, ♥ - чисті масті. Ходити гравцю доцільно з ♠8. Для зносу є два варіанти: або ♠9, ♠10 (і залишати ♠Т), або зносити ♠Т та ♠10 (і залишати ♠9). Даний приклад відрізняється від попереднього тим, що у разі вгадування різних мастей (♠ або ♣) гравець одержить різні штрафи.

Нехай гравець залишить ♠Т. Цей пробій ловиться напевно, але при цьому гравець має можливість перехвату і може обмежитись однією штрафною взяткою, без "паровозу".

Нехай гравець залишить ♠9. Цей пробій ловиться з деякою ймовірністю, але при цьому гравець вже не має можливість

перехвату і орієнтовна довжина "паровозу" складає 4 взятки.

Таким чином, внаслідок різниці штрафів матриця виплат не буде одиничною. Оптимальною мішаною стратегією гравців буде набір ймовірностей, обернено пропорційних відповідним діагональним елементам, тобто

$$p_i = \frac{1}{\sum_{j=1}^n \frac{1}{a_{ij}}}. \text{ У даному разі для } \clubsuit \text{ та } \spadesuit$$

$$\text{відповідно, } p_1 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}} = \frac{4}{5}, \quad p_2 = \frac{\frac{1}{4}}{1 + \frac{1}{4}} = \frac{1}{5}.$$

Нехай ймовірності ловлі пробіїв тут такі:

- ♠Т – завжди;
- ♠9 – 0.23.

Іншими словами, гравець, який ловить мізер, з ймовірністю 0.23 зможе ловити обидві масті, а з ймовірністю 0.77 – лише ♠. Щоб отримати свою оптимальну мішану стратегію $\left(\frac{4}{5}, \frac{1}{5}\right)$, йому необхідно

$$\text{ловити } \clubsuit 9 \text{ з ймовірністю } \frac{0.2}{0.23} = 0.87 \text{ з}$$

тому стані природи, коли ловляться обидві масті, а в усіх інших випадках ловити ♠Т. Гравцю, що грає мізер, потрібно дотримуватись своєї оптимальної мішаної стратегії $\left(\frac{4}{5}, \frac{1}{5}\right)$.

Список використаних джерел

1. M. Osborne, A. Rubinstein. A course in game theory. The MIT Press, 1994.
2. Машенко С.О., Волошин О.Ф. Теорія прийняття рішень.- Київський Університет. 2006 р. – 303 с.
3. В. Хардковер. Классический преферанс и его разновидности. Москва, изд-во "Датастром", 1992.

Надійшла до редколегії 24.03.09

УДК 681.51/.52 + 61:004.891

Марценюк В.П., д.т.н., проф., Андрушак І.Є. асп.*

Про стійкість в двокомпаратментній фармакокінетичній моделі: метод вироджених функціоналів Ляпунова

В роботі отримано умови стійкості для двокомпаратментної фармакокінетичної моделі із запізненням. Дослідження проведено з використанням методу вироджених функціоналів Ляпунова. За допомогою функціоналу квадратичного типу сформульовано умови стійкості, незалежні від величини запізнення. За допомогою більш складного функціоналу отримано умови, що залежать від величини запізнення. При цьому також накладаються умови на вигляд функції перенесення лікарського препарату між компартментами.

Ключові слова: фармакокінетика, стійкість, функціонал Ляпунова

*E-mail: marceniuk@yahoo.com, westa@land.ru

Статтю представив д.т.н. наук, професор Акіменко В.В.

Вступ. Сучасний стан розвитку системних медичних досліджень невід'ємно пов'язується з фармакокінетичним моделюванням. В якості фармакокінетичних моделей виступають системи нелінійних диференціальних рівнянь для опису транспортування лікарського препарату в організмі людини. Недостатньо вивченою є проблема якісного аналізу таких систем.

В даній роботі вивчатимуться питання стійкості двокомпаратментної фармакокінетичної моделі із запізненням на основі динаміки Міхаеліса-Ментена:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1(t)}{dt} &= -(k_{10} + k_{12})x_1(t) + k_{21}(x_2(t-\tau), p)x_2(t-\tau), \\ \frac{dx_2(t)}{dt} &= -(k_{20} + k_{21}(x_2(t), p))x_2(t) + k_{12}x_1(t), \quad (1) \\ t > 0 \end{aligned}$$

$$k_{21}(x, p) = \frac{v_m x^n}{K_m^n + x^n}, \quad p = (v_m, K_m, n)$$

$$x_i(t) = \phi_i(t), \quad -\tau \leq t \leq 0, \quad i = 1, 2$$

Тут $\phi_i(t) \in C[-\tau, 0]$, $i = 1, 2$ – задані початкові умови, значення яких відрізняються від місця та способу введення лікарського препарату. Фармакокінетичний зміст параметрів моделі (1)

V.P.Martsenyuk, D.E.S., Prof., I.Y.Andrushchak, asp.*

On Stability in Two-Compartmental Pharmacokinetical Model: Degenerate Liapunov Functional Method

In the work there is obtained stability conditions for two-compartmental pharmacokinetical model with delay. Investigation is executed with help of degenerate Liapunov functional method. With help of quadratic type Liapunov functional there are stated stability conditions independent on delay. With help of more complex functional conditions depending on delay were obtained. Conditions on the form of functions of transportation of drug between compartments are required.

Key Words: pharmacokinetics, stability, Liapunov functional

та обґрунтування її використання наведені в роботі [1].

Метою роботи є отримання достатніх умов стійкості системи (1) на основі методу вироджених функціоналів Ляпунова. Даний метод дозволяє досліджувати стійкість в класі рівнянь популяційної динаміки. Тому бачиться доцільним його використання для фармакокінетичної моделі типу (1).

Вироджені функціонали Ляпунова. Дотримуватимемося означення функціоналу Ляпунова, введенного в [2] для системи із запізненням

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(t, x_t), \quad x_t = \phi(s) \quad (2)$$

де $f: R \times C \rightarrow R^n$ – неперервний функціонал і $f(t, 0) = 0$.

Означення 1. Функціонал $V: R \times C \rightarrow R$ називається функціоналом Ляпунова системи (2), якщо:

$$(i) u(\|\phi(0)\|) \leq V(t, \phi) \leq v(\|\phi\|);$$

$$(ii) \dot{V}(t, \phi) \leq -w(\|\phi(0)\|),$$

де $u(s), v(s), w(s): R_+ \rightarrow R_+$ неперервні та неспадаючі, $u(s) > 0, v(s) > 0$ при $s > 0$ і $u(0) = v(0) = w(0) = 0$.

Вперше поняття вироджених функціоналів Ляпунова було введено в роботі [3] при вивченні асимптотичної стійкості тривіального розв'язку наступної неавтономної лінійної системи із запізненням

$$\dot{x}(t) + \sum_{j=1}^2 a_{ij}(t)x_j(t - \tau_{ij}) = 0, \quad i=1,2. \quad (3)$$

Як зазначалося в [3], зазвичай складно відшукати або побудувати функціонали Ляпунова з від'ємно визначеними повними похідними на розв'язках системи. Підхід поєднання принципу інваріантності з умовами типу Разуміхіна видається також ускладненим у застосуванні до рівнянь типу Лотка-Вольтера. Для подолання таких проблем К.Гопальсамі [3] використовує функціонал

$$V(x_1, x_2) = (V_1 + V_2)(x_1, x_2), \text{ де}$$

$$V_1(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^2 \left[x_i(t) + \sum_{j=1}^2 \int_{-\tau_{ij}}^t a_{ij}(s + \tau_{ij}) x_j(s) ds \right]^2 \quad (4)$$

і деякий $V_2(x_1, x_2) \geq 0$.

За допомогою функціоналу V та леми Барбалата К.Гопальсамі зміг отримати умови асимптотичної стійкості (3). Як приклад він отримав деякі достатні умови глобальної асимптотичної стійкості додатнього стану рівноваги наступної системи конкуренції із запізненням

$$\dot{N}_i(t) = N_i(t) \left[r_i - \sum_{j=1}^2 b_{ij} N_j(t - \tau_{ij}) \right], \quad i=1,2. \quad (5)$$

Результати було поширено також на узагальнений вигляд (5), включаючи неперервно розподілені запізнення.

Можна звернути увагу, що функціонал (4) не задовольняє умову (i) в означенні функціоналу Ляпунова. Такий тип функціоналів отримав назву "вироджених" функціоналів Ляпунова [3].

Повніший огляд застосування методу вироджених функціоналів Ляпунова наведений в [4]. Тут лише наведемо означення вироджених функціоналів Ляпунова, введене в [3].

Означення 2. Функціонал $V: R \times C \rightarrow R$ називається слабо виродженим функціоналом для (2) якщо для усіх великих t (скажімо при $t \geq T$ для деякого $T > 0$)

(i) існує неперервна і неспадна функція $v(s): R_+ \rightarrow R_+$, $v(0) = 0$ і $v(s) > 0$ при $s > 0$ така, що $0 \leq V(t, \phi) \leq v(\|\phi\|)$;

(ii) існує неперервна і неспадна функція $w(s): R_+ \rightarrow R_+$, $w(0) = 0$ і $w(s) > 0$ при $s > 0$ така, що $V'(t, \phi) \leq -w(\|\phi(0)\|)$.

Якщо замість (ii) виконується

(iii) існує неперервна і неспадна функція $w(s): R_+^m \rightarrow R_+$, $m < n$, $w(0) = 0$ і $w(s_1, \dots, s_m) > 0$ при $(s_1, \dots, s_m) \neq 0$ така, що $V'(t, \phi) \leq -w(\phi_1(0), \dots, \phi_m(0))$,

тоді такий функціонал V називається строго виродженим функціоналом Ляпунова для (2).

Стационарні стани в системі (1). Незалежно від вигляду $k_{21}(x, p)$ система (1) має в якості стаціонарного стану тривіальний розв'язок $x_1(t) = x_2(t) = 0$. Для визначення інших стаціонарних станів для прикладу покладемо значення параметру $n=1$. В такому випадку, прирівнявши праві частини в (1) до нуля, отримуємо ще два стаціонарні стани:

$$x_1 = \frac{k_{20}x_{2,1}}{k_{10} + 2k_{12}}, \quad x_2 = x_{2,1} = \frac{k + \sqrt{k^2 + 4v_m k K_m}}{2v_m} \quad (6)$$

$$x_1 = \frac{k_{20}x_{2,2}}{k_{10} + 2k_{12}}, \quad x_2 = x_{2,2} = \frac{k - \sqrt{k^2 + 4v_m k K_m}}{2v_m} \quad (7)$$

$$\text{Тут } k = \frac{k_{10} + k_{12}}{k_{10} + 2k_{12}}.$$

З прикладу видно, що кількість та значення стаціонарних станів суттєво залежать від значення параметру n , а в загальному випадку від виду самої функції $k_{21}(x, p)$. В роботі будуть

$$Z(y_2(t)) = k_{21}(y_2(t) + x_2^*, p) - k_{21}(x_2^*, p).$$

Через $x_1^{\max}, x_2^{\max}, x_1^{\min}, x_2^{\min}$ позначимо максимальні та мінімальні значення концентрацій лікарського препарату в першому та другому компартменті відповідно. Ці значення можуть бути встановлені експериментально.

В наступних викладках умови стійкості будуть отримані для системи (1) із загальним виглядом функції $k_{21}(x, p)$, який може й відрізнятися від вигляду динаміки Міхаеліса-Ментена, наведеного в моделі (1). Робляться наступні припущення щодо функції $k_{21}(x, p)$.

Припущення 1. Функція $k_{21}(x, p)$ є монотонно зростаючою щодо змінної x .

Припущення 2. Для будь-яких значень змінної $x \geq 0$ має місце нерівність $k_{21}(x, p)x \geq 0$.

Припущення 3. Для довільного $x > 0$ функція $Z(x)$ така, що існує деяка стала $\delta > 0$, що має місце нерівність:

$$Z(x - x_2^*)x + k_{21}(x_2^*, p)x \leq x_1^{\min} \left\{ k_{21}(x_2^*, p) \frac{x_2^*}{x_1^*} - \frac{1}{\delta} \right\}$$

Наслідок 1. Якщо функція $k_{21}(x, p)$ є монотонно зростаючою, то функція $Z(y)$ є монотонно зростаючою також.

Наслідок 2. Функція $k_{21}(x, p)$ згідно динаміки Міхаеліса-Ментена (2) при $x \geq 0$ задовольняє Припущення 1 та 2.

Наслідок 3. Якщо функція $Z(x)$ задовольняє Припущення 3, то на розв'язках системи (1) має місце нерівність:

$$Z(y_2(t-2\tau)) \frac{x_2(t-2\tau)}{x_1(t-\tau)} + k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2(t-2\tau)}{x_1(t-\tau)} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \leq -\frac{1}{\delta}$$

Доведення випливає поклавши в Припущенні 3 $x = x_2(t-2\tau)$ а замість $x_1^{\min}$ використавши значення $x_1(t-\tau)$. $\square$

З використанням введених вище позначень систему (1) можна переписати у вигляді:

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= (\log x_1(t))' - (\log x_1(t))'_{x_1(t)=x_1^*} = \\ &= \frac{1}{x_1(t)} x_1'(t) - \frac{1}{x_1^*} x_1'(t)_{x_1(t)=x_1^*} = \\ &= -(k_{10} + k_{12}) + k_{21}(x_2(t-\tau), p) \frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} + \\ &\quad + (k_{10} + k_{12}) - k_{21}(x_2^*, p) \frac{x_2^*}{x_1^*} = \\ &= k_{21}(x_2(t-\tau), p) \frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} - k_{21}(x_2^*, p) \frac{x_2^*}{x_1^*} = \\ &= k_{21}(x_2(t-\tau), p) \frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} - \\ &\quad - k_{21}(x_2^*, p) \frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} + k_{21}(x_2^*, p) \frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} - \\ &\quad - k_{21}(x_2^*, p) \frac{x_2^*}{x_1^*} = \\ &= Z(y_2(t-\tau), p) \frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} + k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2(t-\tau)}{x_1(t)} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \leq \\ &\leq Z(y_2(t-\tau), p) \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} + k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_2'(t) &= x_2'(t) - (x_2(t))'_{x_2(t)=x_2^*} = \\ &= -(k_{20} + Z(y_2(t)) + k_{21}(x_2^*, p))(y_2(t) + x_2^*) + \\ &\quad + k_{12}x_1^* e^{\eta(t)} + (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p))x_2^* - k_{12}x_1^* = \\ &= -k_{20}y_2(t) - Z(y_2(t))y_2(t) - \\ &\quad - k_{21}(x_2^*, p)y_2(t) - Z(y_2(t))x_2^* + k_{12}x_1^* [e^{\eta(t)} - 1] \end{aligned} \quad (16)$$

Лема 1. На розв'язках системи (1) має місце нерівність:

$$\int_{-\tau}^t x_1(s) ds \leq \frac{x_1(t)}{k_{10} + k_{12}} [e^{(k_{10} + k_{12})t} - 1].$$

Доведення.

Оскільки

$$\begin{aligned} x_1'(t) &= -(k_{10} + k_{12})x_1(t) + k_{21}(x_2(t-\tau), p)x_2(t-\tau), \\ \text{то використовуючи Припущення 2:} \\ x_1'(t) &\geq -(k_{10} + k_{12})x_1(t). \end{aligned}$$

Звідси

$$\ln \frac{x_1(t)}{x_1(s)} \geq -(k_{10} + k_{12})(t-s), \text{ де } t \geq s.$$

$$\text{Отже, } x_1(s) \leq e^{(k_{10} + k_{12})(t-s)} x_1(t).$$

Таким чином:

встановлені умови глобальної стійкості стаціонарних станів, які умовно позначатимемо, як (x_1^*, x_2^*) .

Умови стійкості, незалежні від величини запізнення на основі виродженого функціоналу Ляпунова квадратичного типу. Перепишемо систему (1) у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \{x_1(t) - x_1^*\} &= -(k_{10} + k_{12})(x_1(t) - x_1^*) + \\ &+ [k_{21}(x_2(t - \tau), p)x_2(t - \tau) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*] \\ \frac{d}{dt} \{x_2(t) - x_2^*\} &= -(k_{20} + k_{21}(x_2(t), p))x_2(t) + k_{12}x_1(t) + \\ &+ (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p))x_2^* - k_{12}x_1^* = \\ &= -(k_{21}(x_2(t), p)x_2(t) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*) - \\ &- k_{20}(x_2(t) - x_2^*) + k_{12}(x_1(t) - x_1^*) \end{aligned} \quad (8)$$

Наступна умова стійкості буде встановлена за допомогою квадратичного функціонала. На основі функціоналів такого типу отримують умови стійкості, що отримали назву «середньо-діагонального домінування».

Теорема 1. Припустимо, що параметри системи (1) такі, що існують додатні сталі a, b , при яких матриця

$$U = \begin{bmatrix} -2(k_{10} + k_{12}) & ak_{12} & 0 & 1 \\ ak_{12} & -2ak_{20} & -a & 0 \\ 0 & -a & b & 0 \\ 1 & 0 & 0 & b \end{bmatrix}$$

від'ємно визначена. Тоді усі розв'язки (1), що відповідають деякому околу невід'ємних початкових значень (x_1^*, x_2^*) для будь-якого значення $\tau > 0$ задовольняють

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x_1(t) = x_1^*, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} x_2(t) = x_2^*. \quad (9)$$

Доведення. Розглянемо функціонал:

$$\begin{aligned} V[x_1(t), x_2(t)] &= (x_1(t) - x_1^*)^2 + a(x_2(t) - x_2^*)^2 + \\ &+ b \int_{-\tau}^t [k_{21}(x_2(s), p)x_2(s) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*] ds \end{aligned} \quad (10)$$

Враховуючи запис системи (1) у вигляді (8) маємо наступний вираз для повної похідної:

$$\begin{aligned} \frac{dV(t)}{dt} &= 2(x_1(t) - x_1^*) \left\{ -(k_{10} + k_{12})(x_1(t) - x_1^*) + \right. \\ &\quad \left. + [k_{21}(x_2(t - \tau), p)x_2(t - \tau) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*] \right\} + \\ &+ 2a(x_2(t) - x_2^*) \left\{ -(k_{21}(x_2(t), p)x_2(t) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*) - \right. \\ &\quad \left. - k_{20}(x_2(t) - x_2^*) + k_{12}(x_1(t) - x_1^*) \right\} + \\ &+ b[k_{21}(x_2(t), p)x_2(t) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*]^2 - \\ &- b[k_{21}(x_2(t - \tau), p)x_2(t - \tau) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^*]^2 = \\ &= -\xi^T U \xi, \end{aligned} \quad (11)$$

де

$$\xi = \begin{bmatrix} x_1(t) - x_1^* \\ x_2(t) - x_2^* \\ k_{21}(x_2(t), p)x_2(t) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^* \\ k_{21}(x_2(t - \tau), p)x_2(t - \tau) - k_{21}(x_2^*, p)x_2^* \end{bmatrix}.$$

Звідси:

$$\frac{dV(t)}{dt} \leq \lambda_{\max}(U) \|\xi\|^2 < \lambda_{\max}(U) \{ [x_1(t) - x_1^*]^2 + [x_2(t) - x_2^*]^2 \} \quad (12)$$

З (12) отримуємо, що:

$$V(t) - \lambda_{\max}(U) \int_0^t \{ [x_1(s) - x_1^*]^2 + [x_2(s) - x_2^*]^2 \} ds \leq V(0) \quad (13)$$

З означення $V(t)$ і з (13) випливає, що функція

$$f(s) = [x_1(s) - x_1^*]^2 + [x_2(s) - x_2^*]^2$$

є рівномірно обмежена при $s \in [0, \infty)$. Звідси

випливає рівномірна обмеженість $\frac{df(s)}{ds}$ при $s \in [0, \infty)$. Згідно леми Барбалата робимо висновок, що:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \{ [x_1(t) - x_1^*]^2 + [x_2(t) - x_2^*]^2 \} = 0$$

що й потрібно було довести. $\square$

Умови стійкості, залежні від величини запізнення. Розглядаючи систему (1) введемо нові змінні:

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \log \left(\frac{x_1(t)}{x_1^*} \right), \\ y_2(t) &= x_2(t) - x_2^*, \end{aligned} \quad (14)$$

Звідси:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= x_1^* e^{y_1}, \\ x_2(t) &= y_2(t) + x_2^*. \end{aligned} \quad (15)$$

Позначимо:

$$\begin{aligned} \int_{-\tau}^t x_1(s) ds &\leq x_1(t) \int_{-\tau}^t e^{(k_{10}+k_{12})(t-s)} ds = \\ &= x_1(t) e^{(k_{10}+k_{12})t} \int_{-\tau}^t e^{-(k_{10}+k_{12})s} ds = \\ &= -x_1(t) \frac{e^{(k_{10}+k_{12})t}}{k_{10}+k_{12}} \left[e^{-(k_{10}+k_{12})t} - e^{-(k_{10}+k_{12})(t-\tau)} \right] = \\ &= x_1(t) \frac{1}{k_{10}+k_{12}} \left[-1 + e^{(k_{10}+k_{12})\tau} \right] \end{aligned}$$

□

Введемо функціонал:

$$V_1(y_2(t)) = \int_0^{p^2(t)} Z(u) du.$$

Тоді маємо $V_1(y_2(t)) \geq 0$ і на розв'язках (1):

$$\begin{aligned} \frac{dV_1(y_2(t))}{dt} &= Z(y_2(t)) y_2'(t) = \\ &= -k_{20} y_2(t) Z(y_2(t)) - Z^2(y_2(t)) y_2(t) - \\ &- k_{21}(x_2^*, p) y_2(t) Z(y_2(t)) - Z^2(y_2(t)) x_2^* + \\ &+ k_{12} x_1^* Z(y_2(t)) [e^{\eta(t)} - 1] = \\ &= -(y_2(t) + x_2^*) Z^2(y_2(t)) - \\ &- (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p)) y_2(t) Z(y_2(t)) + \\ &+ k_{12} x_1^* Z(y_2(t)) [e^{\eta(t)} - 1] \end{aligned}$$

Оскільки

$$\begin{aligned} e^{\eta(t)} - 1 &= [e^{\eta(t)} - e^{\eta(t-\tau)}] + [e^{\eta(t-\tau)} - 1] = \\ &= \int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} y_1'(s) ds + [e^{\eta(t-\tau)} - 1] \end{aligned}$$

то:

$$\begin{aligned} \frac{dV_1(y(t))}{dt} &\leq -(y_2(t) + x_2^*) Z^2(y_2(t)) - \\ &- (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p)) y_2(t) Z(y_2(t)) + \\ &+ k_{12} x_1^* Z(y_2(t)) \times \\ &\times \left[\int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} \left\{ Z(y_2(s-\tau)) \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} + \right. \right. \\ &\left. \left. + k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \right\} ds + \right. \\ &\left. + [e^{\eta(t-\tau)} - 1] \right] \end{aligned}$$

Використавши нерівність $ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2)$, приходимо до наступного:

$$\begin{aligned} \frac{dV_1(y(t))}{dt} &\leq -(y_2(t) + x_2^*) Z^2(y_2(t)) - \\ &- (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p)) y_2(t) Z(y_2(t)) + \\ &+ \frac{1}{2} k_{12} x_1^* \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} \left(\int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} ds Z^2(y_2(t)) + \right. \\ &\left. + \int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} ds Z^2(y_2(s-\tau)) \right) + \\ &+ k_{12} x_1^* Z(y_2(t)) k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} ds + [e^{\eta(t-\tau)} - 1] \end{aligned}$$

Означимо функціонал:

$$V_2(y(t)) = \frac{1}{2} k_{12} x_1^* \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} \int_{-\tau}^t \int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} Z^2(y_2(s-\tau)) ds dv$$

Звідси:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (V_1 + V_2)(y(t)) &\leq -(y_2(t) + x_2^*) Z^2(y(t)) - \\ &- (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p)) y_2(t) Z(y_2(t)) + \\ &+ \frac{1}{2} k_{12} x_1^* \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} \left(\int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} ds Z^2(y_2(t)) + \right. \\ &\left. + \int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} ds Z^2(y_2(s-\tau)) \right) + \\ &+ k_{12} x_1^* Z(y_2(t)) k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \int_{-\tau}^t e^{\eta(s)} ds + [e^{\eta(t-\tau)} - 1] \end{aligned}$$

Використовуючи лему 1 маємо:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (V_1 + V_2)(y(t)) &\leq -(y_2(t) + x_2^*) Z^2(y(t)) - \\ &- (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p)) y_2(t) Z(y_2(t)) + \\ &+ \frac{1}{2} k_{12} x_1^* \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} \left(\frac{[e^{(k_{10}+k_{12})\tau} - 1]}{k_{10} + k_{12}} Z^2(y_2(t)) + \right. \\ &\left. + \tau Z^2(y_2(t-\tau)) \right) + \\ &+ k_{12} x_1^* Z(y_2(t)) k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \times \\ &\times \frac{[e^{(k_{10}+k_{12})\tau} - 1]}{k_{10} + k_{12}} + [e^{\eta(t-\tau)} - 1] \end{aligned}$$

Введемо для $\delta > 0$, яке задовольняє Припущення 3 функціонал:

$$V_3(y_1(t)) = \delta \int_0^{p^1(t-\tau)} [e^s - 1] ds$$

Тоді згідно Наслідку 3:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V_3(y_1(t)) &= \delta y_1'(t-\tau) [e^{\eta(t-\tau)} - 1] = \\ &= \delta \left\{ Z(y_2(t-2\tau)) \frac{x_2(t-2\tau)}{x_1(t-\tau)} + \right. \\ &\quad \left. + k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2(t-2\tau)}{x_1(t-\tau)} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \right\} [e^{\eta(t-\tau)} - 1] \leq \\ &\leq -[e^{\eta(t-\tau)} - 1] \end{aligned}$$

Означимо функціонал Ляпунова таким чином:

$$V(y(t)) = V_1(y_2(t)) + V_2(y(t)) + V_3(y_1(t))$$

Тоді в силу попередніх викладок:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(y(t)) &\leq -(y_2(t) + x_2^*) Z^2(y(t)) - \\ &- (k_{20} + k_{21}(x_2^*, p)) y_2(t) Z(y_2(t)) + \\ &+ \frac{1}{2} k_{12} x_1(t) \frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} \left([e^{(k_{10}+k_{12})t} - 1] Z^2(y_2(t)) + \right. \\ &\quad \left. + \tau Z^2(y_2(t-\tau)) \right) + \\ &+ k_{12} x_1(t) Z(y_2(t)) k_{21}(x_2^*, p) \left[\frac{x_2^{\max}}{x_1^{\min}} - \frac{x_2^*}{x_1^*} \right] \times \\ &\times \frac{[e^{(k_{10}+k_{12})t} - 1]}{k_{10} + k_{12}} \end{aligned}$$

(17)

Виберемо $\tau > 0$ таким, щоб матриця

$$U = \begin{bmatrix} 0 & 0 & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ 0 & 0 & a_{23} & -\frac{1}{2} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & -x_2^* & 0 & 0 \\ a_{41} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ a_{51} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (18)$$

була від'ємно-визначеною (повний вигляд матриці не наводиться в силу громіздкості – показані лише ненульові елементи). Тоді у правій частині (17) знаходиться від'ємно-визначена квадратична форма аргументів $x_1(t), y_2(t), Z(y_2(t)), Z^2(y_2(t)), Z^2(y_2(t-\tau))$.

Отже, V – строго вироджений функціонал Ляпунова.

Застосовуючи теорему про асимптотичну стійкість, отримуємо наступний результат.

Теорема 2. Припустимо, що:

(i) коефіцієнти системи (1) та функція $k_{21}(x, p)$ такі, що виконується Припущення 3;

(ii) запізнення $\tau > 0$ є скінченним і таким, що матриця U (18) є від'ємно-визначеною.

Тоді стан рівноваги (x_1^*, x_2^*) системи (1) є асимптотично стійким для деякого околу початкових умов.

Висновки. В роботі отримано умови стійкості для двокомпаратментної фармакокінетичної моделі із запізненням. Дослідження проведені з використанням методу вироджених функціоналів Ляпунова. За допомогою функціоналу квадратичного типу сформульовано умови стійкості, незалежні від величини запізнення. За допомогою більш складного функціоналу отримано умови, що залежать від величини запізнення. При цьому також накладаються умови на вигляд функції перенесення лікарського препарату між компартментами $k_{21}(x, p)$. В подальших дослідженнях варто було б звернути увагу на якісне дослідження системи (1) залежно від вигляду функції $k_{21}(x, p)$.

Список використаних джерел

1. В.П.Марценюк, И.Е.Андрущак Об двухкомпаратментной фармакокинетической модели с запаздыванием на основе динамики Михаэлиса-Ментена: метод декомпозиции // Проблемы управления и информатики, 2009. - №4. - С.83-95.
2. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений: Пер.с англ. - М.: Мир, 1984. - 421 с.
3. Gopalsamy K. Stability and oscillation in delay differential equations of population dynamics. Kluwer Academic Publishers, AA Dordrecht, The Netherlands, 1992. - 421 pp.
4. Марценюк В.П. Об устойчивости в модели иммунной защиты с учетом нарушения функционирования органа-мишени: метод вырожденных функционалов Ляпунова // Кибернетика и системный анализ, 2004. - №1. - С. 153-164.

Надійшла до редколегії 08.11.2009

УДК 519.8

Машенко С.О., канд. фіз.-мат. наук, доцент

Стабільні за перевагами рівноваги в одноцільових некооперативних іграх

Розглядаються рівноваги некооперативних одноцільових ігор, які є стабільними як за стратегіями гравців, так і за їх перевагами на множині функцій виграшу. Досліджено умови існування та властивості таких рівноваг. Формалізовано поняття оптимальної рівноваги за перевагами гравців.

Ключові слова: оптимальність за Парето, рівновага Неша, індивідуально-оптимальна рівновага.

*E-mail: msomail@yandex.ru

Статтю представив доктор техн. наук, проф. Акіменко В.В.

Найбільш привабливими концепціями оптимальності в умовах повної інформованості гравців є оптимальність за Парето та Нешем [1].

Концепція оптимальності за Парето заснована на ідеї кооперативної поведінки гравців, коли вони колективно вибирають свої стратегії та враховують усі функції виграшу. Тому не існує ситуацій, які є кращими за Парето-оптимальні для усіх гравців разом. Якщо гравці виберуть основою для угоди між собою Парето-оптимальну ситуацію, у деяких з них може виникнути спокуса змінити свою стратегію на іншу, яка буде кращою для них. У цьому разі домовленість гравців може бути зруйнованою, тобто така ситуація буде нестабільною.

Концепція рівноважності за Нешем базується на ідеї некооперативної поведінки гравців, коли вони індивідуально вибирають свої стратегії та кожен враховує лише свою функцію виграшу. Ситуація гри називається рівновагою Неша [1], якщо від неї не вигідно відхилитись будь-якому одному гравцю (усі інші свої стратегії не змінюють), оскільки значення його функції виграшу не покращиться (є оптимальним). Якщо гравці укладають угоду щодо своєї майбутньої поведінки та її основою є Нешівська рівновага, то вона буде стабільною. "Ціною" привабливості Нешівських рівноваг є серйозні проблеми, які пов'язані з їх існуванням, складністю знаходження, проблемою вибору єдиної рівноваги [1].

У певному розумінні ці принципи оптимальності представляють собою крайні

Mashchenko S.O., C.Sci(Phys-Math.), Ass.Prof.

A stable by preferences equilibriums in the one-goal unco-operative games

There are considered equilibriums of unco-operative one-goal games, which are stable both by strategies of players, and by their preferences on the winning functions set. Researched conditions of existence and property of these equilibriums. Formalized notion of optimum equilibrium by players preferences.

Key words: Pareto optimality, the Nesh's equilibrium, the individually-optimum equilibrium.

випадки в поведінці гравців між колективним та індивідуальним вибором стратегій і урахуванням функцій виграшу гравців.

Принцип індивідуальної-оптимальності, запропонований у роботах [2,3], надає можливість кожному гравцю вибирати свої стратегії індивідуально (некооперативно), але враховувати при цьому інтереси усіх інших гравців (компроміс заради вирішення конфлікту). Цей принцип є обґрунтованим також у, так званих, одноцільових іграх, де у всіх гравців ціль – одна і вона характеризується для усіх гравців деякою множиною критеріїв. В ідеалі ця ціль полягає у виборі гравцями своїх стратегій так, щоб склалася найбільш переважна ситуація для усіх гравців. Оскільки такі ситуації можуть не існувати, то гравці згодні піти на компроміс заради спільної цілі. Оскільки гравці діють некооперативно, кожен бачить компроміс по своєму, що приводить до конфлікту.

Розглянемо одноцільову гру G у нормальній формі $(X, i \in N; U)$, де $N = \{1, 2, \dots, n\}$ – множина з n гравців; X_i – множина стратегій i -го гравця; $U = (u_j(x))_{j \in J}$ – вектор-функція виграшу, за якою кожен гравець оцінює свій виграш, $U: X \rightarrow E^{|J|}$, де $X = \prod_{i \in N} X_i$ – множина ситуацій гри. Усі гравці мають спільну ціль, яка полягає у максимізації критеріїв $u_j(x)$, $j \in J$. Оскільки, як правило, не існує такої ситуації, яка максимізує усі критерії одночасно, то кожен

гравець шукає компроміс, зміст якого бачить по своєму.

Для пошуку рівноваг цієї гри використаємо принцип індивідуальної оптимальності [2,3].

Принцип індивідуальної оптимальності базується на спеціальному відношенні домінування за Нешем. Будемо говорити, що ситуація $y \in X$ гри G знаходиться у відношенні сильного NE -домінування гравця $i \in N$ до ситуації x і позначати це через $y \succ_{NE(i)} x$, якщо $u_i(y, x_{-i}) > u_i(x), \forall j \in J$.

Ситуація x^* називається слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою, а множина цих рівноваг позначається через $WIOE$, якщо не існує такого гравця $i \in N$ та ситуації $y \in X$, яка б сильно домінувала за Нешем x^* , тобто $\forall i \in N, \forall y \in X : y \not\succ_{NE(i)} x^*$.

Застосування слабких індивідуально-оптимальних рівноваг мотивується наступним сценарієм одноцільової гри. Гравці наприклад, укладають необов'язкову угоду (гравці прислухаються до науково обґрунтованих рекомендацій компетентних осіб) про те, що вони будуть дотримуватися ситуації $x^* = (x_i^*)_{i \in N}$. Потім вони незалежно один від іншого ухвалюють рішення про вибір своїх стратегій. В тому і лише в тому випадку, коли основою угоди буде слабка індивідуально-оптимальна рівновага x^* , зміна будь-яким гравцем $i \in N$ погодженої з іншими гравцями стратегії x_i^* на іншу, завжди приведе до ситуації, яка не буде кращою за x^* хоча б за одним критерієм. Тому ціль гравця $i \in N$, яка полягає у максимізації критеріїв $u_j(x)$, $j \in J$, може бути не задоволеною та досягнутий у ході попередніх переговорів компроміс може бути зруйнованим.

Слід відмітити, що означення індивідуально-оптимальної рівноваги формально є коректним також і у багатоцільовій грі, коли $J = N$, а критеріальна функція $u_i(x)$ є власною функцією виграшу гравця $i \in N$. По суті, особливість індивідуально-оптимальних рівноваг у багатоцільовій грі полягає лише у аргументації їх стабільності, оскільки кожен гравець має свою особисту ціль і цілі інших гравців не повинні його цікавити. З оглядом на що обставину, можна розглянути ряд додаткових умов, у яких повинна відбуватися багатоцільова гра, для аргументації стабільності індивідуально-оптимальних рівноваг. Зокрема, гарантією

стабільності угоди, заснованої на індивідуально-оптимальній рівновазі може бути, наприклад, лояльність, або навіть альтруїзм, кожного гравця по відношенню до інших. У деяких випадках, аргументом погодитись на компроміс може стати бажання одержати рівноважну ситуацію у грі.

Властивості та умови індивідуально-оптимальної рівноважності розглянуто у [2,3]. У цій роботі розглядаються деякі нові властивості та один підхід до вибору індивідуально-оптимальних рівноваг.

Будемо вважати, що усі критерії є обмеженими на множині X ситуацій гри G . Позначимо через $S = \sum_{j \in J} \sup_{x \in X} u_j(x) < \infty$ - суму верхніх меж критеріїв. Уведемо до розгляду вектори параметрів $\mu_i = (\mu_i^j)_{j \in J}, i \in N$. Позначимо для кожного гравця $i \in N$ множини цих параметрів через

$$M_i^{20} = \left\{ \mu_i = (\mu_i^j)_{j \in J} \mid \sum_{j \in J} \mu_i^j = 1; \mu_i^j \geq 0, j \in J \right\}.$$

Теорема 1. Якщо у грі G ситуація $x^* \in WIOE$, критерії $u_j(x^*) > 0, j \in J$, то існують такі вектори параметрів $\mu_i \in M_i^{20}, i \in N$, зокрема з компонентами:

$$\bar{\mu}_i^j = u_j(x^*) / S + 1/n - \sum_{k \in J} u_k(x^*) / Sn, j \in J, \quad (1)$$

що для $\forall x_i \in X_i, i \in N$, справедливі нерівності:

$$\min_{j \in J} (u_j(x_i, x_{-i}^*) - S\mu_i^j) \leq \min_{j \in J} (u_j(x^*) - S\mu_i^j). \quad (2)$$

Будь-який розв'язок x^* системи нерівностей (2) при заданих $\mu_i \in M_i^{20}, i \in N$, є слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою.

Доведення. Доведемо достатність. Нехай ситуація x^* задовольняє нерівностям (2). Звідси випливає, що для $\forall i \in N$ та $\forall x_i \in X_i$ мають місце нерівності: $\min_{j \in J} (u_j(x_i, x_{-i}^*) - S\mu_i^j) \leq \min_{j \in J} (u_j(x^*) - S\mu_i^j) \leq u_k(x^*) - S\mu_i^k, \forall k \in J$, тому для $\forall i \in N, \forall x_i \in X_i$ існує $j \in J$, що $u_j(x_i, x_{-i}^*) \leq u_j(x^*)$. Отже, з означення NE -домінування гравця $i \in N$ випливає, що $\nexists x = (x_i, x_{-i}^*) \in X : x \succ_{NE} x^*$. Звідси, за означенням індивідуально-оптимальності, $x^* \in WIOE$.

Доведемо необхідність. Для цього виберемо

вектори $\bar{\mu}_i = (\bar{\mu}_i^j)_{j \in J}$, $i \in N$, з компонентами (1). Нескладно переконатися, що $\bar{\mu}_i \in M_i^{\geq 0}$, $\forall i \in N$.

З того, що x^* є слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою випливає, що

$\forall x \in X: x \succ_{NE} x^*$, тобто для $\forall i \in N, \forall x_i \in X_i, \exists j \in J$, що $u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) \leq u_j(x^*)$,

а значить $u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) - S\bar{\mu}_i^j \leq u_j(x^*) - S\bar{\mu}_i^j$.

Оскільки для $\forall i \in N$ значення

$$u_j(x^*) - S\bar{\mu}_i^j = - \left(S - \sum_{k \in N} u_k(x^*) \right) / n \text{ для } \forall j \in J, \text{ то}$$

для $\forall x_i \in X_i$ одержимо $\min_{j \in J} (u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) - S\bar{\mu}_i^j) \leq$

$$\leq - \left(S - \sum_{k \in N} u_k(x^*) \right) / n = \min_{j \in J} (u_j(x^*) - S\bar{\mu}_i^j). \text{ Тому}$$

ситуація x^* задовольняє нерівностям (2). Теорему доведено.

Слід зауважити, що параметри $\mu_i \in M_i^{\geq 0}$ дають можливість гравцю $i \in N$ виразити свою перевагу на множині критеріїв $u_j(x)$, $j \in J$. Так, наприклад, якщо він вважає, що для нього є більш важливим критерій $j_1 \in J$, ніж $j_2 \in J$, то за теоремою 1 йому слід вибирати $\mu_i^{j_1} > \mu_i^{j_2}$.

Варіюючи параметрами $\mu_i \in M_i^{\geq 0}$, $i \in N$, можна знаходити ті або інші індивідуально-оптимальні рівноваги, розв'язуючи нерівності (2). З іншого боку, кожна індивідуально-оптимальна рівновага характеризується деякою множиною параметрів $\mu_i \in M_i^{\geq 0}$, $i \in N$, і, відповідно, перевагою на множині критеріїв усіх гравців.

Слід також відмітити, що параметрам μ_i^j , які фігурують у нерівностях (2), можна надати певний ігровий зміст. Нехай x^* є слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою гри G . Тоді за теоремою 1 вона є розв'язком системи нерівностей (2), принаймні при $\bar{\mu}_i^j = u_j(x^*) / S + 1/n - \sum_{k \in N} u_k(x^*) / Sn$, $j \in J, i \in N$.

Звідси легко побачити, що для кожного фіксованого гравця $i \in N$ значення параметра μ_i^j вказує, яким, на думку гравця $i \in N$, повинне бути бажане значення критерію $j \in J$ у досягнутому компромісі x^* . Тоді й лише тоді гравцю $i \in N$ буде не вигідно відхилятися від x^* .

З теореми 1 випливає, що ситуація x^* , яка є індивідуально-оптимальною рівновагою вихідної

гри G є рівновагою Неша у грі $(X, \min_{j \in J} (u_j(x) - S\mu_i^j); i \in N)$ при фіксованих

значеннях векторів параметрів $\mu_i \in M_i^{\geq 0}$, $i \in N$, які характеризують переваги гравців на множині критеріїв. Таким чином, індивідуально-оптимальна рівновага x^* є стабільною для будь-якого гравця $i \in N$ за функцією $v_i(x, \mu_i) = \min_{j \in J} (u_j(x) - S\mu_i^j)$, яка в одноцільовій

грі G характеризує корисність для нього ситуації $x \in X$ щодо зміни ним своєї стратегії x_i^* на іншу.

Виникають питання, чи може у гравця для індивідуально-оптимальної рівноваги виникнути спокуса змінити свою перевагу на множині критеріїв? Якщо так, то чи можна таку ситуацію вважати основою стабільної угоди між гравцями? Якщо ні, то які з індивідуально-оптимальних рівноваг і при яких перевагах гравців будуть стабільними у такому сенсі?

Для відповіді на ці питання спочатку доведемо наступну лему.

Лема 1. Нехай $S > 0$; $u_j \geq 0$, $j \in J$; множина

$$M = \{ \mu = (\mu^j)_{j \in J} \mid \sum_{j \in J} \mu^j = 1, \mu^j \geq 0, j \in J \}.$$

Тоді

$$\min_{j \in J} (u_j - S\bar{\mu}^j) = \max_{\mu \in M} \min_{j \in J} (u_j - S\mu^j) = (\sum_{k \in J} u_k - S) / n,$$

$$\text{а } \bar{\mu}^j = u_j / S + 1/n - \sum_{k \in J} u_k / Sn, j \in J.$$

Доведення. Розглянемо наступну задачу

$$\max_{\mu \in M} \min_{j \in J} (u_j - S\mu^j). \quad (3)$$

Можливі $|J|$ випадків для $k \in J$. Якщо

$$u_k - S\mu^k \leq u_j - S\mu^j \text{ для } \forall j \in J \setminus \{k\}, \quad (4)$$

то задача (3) прийме вигляд $\max_{\mu^k} (u_k - S\mu^k)$ за

умовами (4) та $\mu^j \geq 0, j \in J; \sum_{j \in J} \mu^j = 1$. Сумуючи

останню рівність, помножену справа та зліва на S , з нерівностями (5) одержимо:

$$(n-1)u_k - S(n-1)\mu^k + S \sum_{j \in J} \mu^j \leq \sum_{j \in J} u_j - S \sum_{j \in J} \mu^j + S$$

$$\text{Звідси очевидно випливає, } nu_k - Sn\mu^k \leq \sum_{j \in J} u_j - S.$$

а тоді $\mu^k \geq u_k / S + 1/n - \sum_{j \in J} u_j / Sn$. Звідси

$$u_k - S\hat{\mu}^k = \max_{\mu^k} (u_k - S\mu^k) = (\sum_{j \in J} u_j - S) / n,$$

$$\hat{\mu}^k = u_k / S + 1/n - \sum_{j \in J} u_j / Sn, \quad u_k - S\hat{\mu}^k = u_j - S\hat{\mu}^j$$

для $\forall j \in J \setminus \{k\}$. Тоді одержимо

$$\hat{\mu}^j = u_j / S + 1/n - \sum_{k \in J} u_k / Sn, \quad j \in J. \quad \text{Цілком}$$

зрозуміло, що, в силу припущень лемми, $\hat{\mu}^k \geq 0$. Лему доведено.

Без обмеження загальності, далі будемо вважати, що у грі G критерії гравців $u_j(x) > 0$, $j \in J$, $x \in X$, тоді $S = \sum_{j \in J} \sup_{x \in X} u_j(x) > 0$. Нехай також $S < \infty$.

Нехай гравці вибрали основою угоди між собою деяку індивідуально-оптимальну рівновагу $\hat{x}$. З лемми 1 випливає такий наслідок.

Наслідок 1. Нехай $\hat{x} \in WIOE$. Нерівності

$$v_i(\hat{x}, \hat{\mu}_i) \geq v_i(\hat{x}, \mu_i), \quad \forall \mu_i \in M_i^{20}, i \in N, \quad (5)$$

- справедливі тоді й лише тоді, коли компоненти $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ визначаються за формулою (1).

Доведення цього наслідку є очевидним, оскільки для $\forall i \in N$ за лемою 1 $v_i(\hat{x}, \hat{\mu}_i) = \min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_i^j) = \max_{\mu_i \in M_i^{20}} \min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\mu_i^j)$, тоді й лише тоді, коли

$$\hat{\mu}_i^j = u_j(\hat{x}) / S + 1/n - \sum_{k \in J} u_k(\hat{x}) / Sn, \quad j \in J.$$

Тобто компоненти вектора $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ визначаються за формулою (1).

Таким чином, в індивідуально-оптимальній рівновазі $\hat{x}$ у кожного гравця $i \in N$ існує така перевага на множині критеріїв, яка характеризується вектором параметрів $\hat{\mu}_i = (\hat{\mu}_i^j)_{j \in J}$, що для гравця відсутні підстави змінювати незалежно від інших, як свою стратегію $\hat{x}_i$ (це властивість індивідуальної оптимальності), так і вектор параметрів $\hat{\mu}_i$.

На жаль, важко собі уявити такого гравця, який буде розділяти зміну своїх стратегій і переваг на множині критеріїв. Тому далі будемо розглядати гру GR у нормальній формі $(X_i \times M_i^{20}, v_i(x, \mu_i); i \in N)$. У цій грі гравець $i \in N$ вибирає не лише свої стратегії $x_i \in X_i$, а і параметри $\mu_i \in M_i^{20}$, які характеризують його

перевагу на множині критеріїв. Виграшем гравця $i \in N$ у цій грі є функція корисності $v_i(x, \mu_i): X \times M_i^{20} \rightarrow E^1$.

Набір $(\hat{x}, \hat{\mu})$, який складається із ситуації $\hat{x} \in X$ та вектору параметрів $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N} \in M = \prod_{i \in N} M_i^{20}$ будемо називати рівновагою у перевагах гравців гри GR , якщо виконуються нерівності:

$$\min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_i^j) \geq \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{-i}) - S\mu_i^j), \quad (5)$$

$$\forall x_i \in X_i, \forall \mu_i = (\mu_i^j)_{j \in J} \in M_i^{20}, i \in N.$$

Позначимо через RE - множини рівноваг у перевагах гравців гри GR .

Таким чином, у рівновазі за перевагами гравців $(\hat{x}, \hat{\mu})$ будь-якому гравцю $i \in N$ не вигідно змінювати одночасно свою стратегію $\hat{x}_i$ і вектор параметрів $\hat{\mu}_i$, який характеризує його перевагу на множині критеріїв.

Має місце наступна теорема.

Теорема 2. Якщо набір $(\hat{x}, \hat{\mu})$ є рівновагою у перевагах гравців гри GR , то ситуація $\hat{x}$ є слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою гри G , а компоненти вектора $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ знаходяться за формулою (1).

Доведення. Нехай $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in RE$. Тоді за умовами (5) одержимо:

$$\min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_i^j) \geq \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{-i}) - S\mu_i^j) \quad \text{для}$$

$\forall x_i \in X_i, \forall \mu_i = (\mu_i^j)_{j \in J} \in M_i^{20}, i \in N$. Зокрема ці нерівності будуть виконуватися і для $\mu_i = \hat{\mu}_i, i \in N$, які знайдені за формулами (1).

$$\text{Тоді} \quad \min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_i^j) \geq \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{-i}) - S\hat{\mu}_i^j)$$

для $\forall x_i \in X_i, i \in N$. Тому за теоремою 1 одержимо $\hat{x} \in WIOE$. Теорему доведено.

Наступну властивість рівноваг у перевагах гравців встановлює

Теорема 3. Для того, щоб набір $(\hat{x}, \hat{\mu})$ був рівновагою у перевагах гравців гри GR необхідно й достатньо, щоб ситуація $\hat{x}$ для $\forall x_i \in X_i, i \in N$, задовольняла наступній системі нерівностей:

$$(\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) - S) / n \geq (\sum_{j \in J} u_j(x_i, \hat{x}_{-i}) - S) / n, \quad (6)$$

а компоненти вектора $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ обчислені за формулою (1).

Доведення. Нехай ситуація $\hat{x}$ для

$\forall x_i \in X_i, i \in N$, задовольняє системі нерівностей (6), а компоненти вектору $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ розраховуються за формулою (1). Тоді для $\forall x_i \in X_i, i \in N$, за лемою 1 $\min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_j') =$
 $= \max_{\mu_i \in M_i} \min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\mu_j') = (\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) - S)/n \geq$
 $\geq (\sum_{j \in J} u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S)/n = \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S\bar{\mu}_j') =$
 $= \max_{\mu_i \in M_i} \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S\mu_j')$. В останній рівності компоненти вектора $\bar{\mu} = (\bar{\mu}_i)_{i \in N}$ обчислюються за формулою (1) при $x^* = (x_i, \hat{x}_{N \setminus i})$. Звідси очевидно, що мають місце нерівності (5). Таким чином, одержимо $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in RE$.

Нехай $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in RE$. Тоді за умовами (5) $\min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_j') \geq \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S\mu_j')$ для $\forall x_i \in X_i, \forall \mu_i = (\mu_j')_{j \in J} \in M_i^{\geq 0}, i \in N$. Зокрема, ці нерівності будуть виконуватися і для $\mu_i = \bar{\mu}_i, i \in N$, які знайдені за формулами (1) для $x^* = (x_i, \hat{x}_{N \setminus i})$. Тоді для $\forall x_i \in X_i, i \in N$, випливає $\min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_j') \geq \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S\bar{\mu}_j')$.

Оцінимо ліві та праві частини цих нерівностей за лемою 1. Тоді одержимо, відповідно:

$$\begin{aligned} \max_{\mu_i \in M_i} \min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\mu_j') &= \min_{j \in J} (u_j(\hat{x}) - S\hat{\mu}_j') = \\ &= (\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) - S)/n, \quad \max_{\mu_i \in M_i} \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S\mu_j') = \\ &= \min_{j \in J} (u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S\bar{\mu}_j') = (\sum_{j \in J} u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S)/n. \end{aligned}$$

Таким чином, одержимо (6). Теорему доведено.

З теореми 3 випливають важливі наслідки.

Наслідок 2. Нехай набір $(\hat{x}, \hat{\mu})$ є рівновагою у перевагах гравців гри GR . Тоді вектори параметрів $\hat{\mu}_i$ гравців $i \in N$, які характеризують їх перевагу, задовольняють умовам:

$$\hat{\mu}_i' = \mu_i', i \in N, j \in J. \quad (7)$$

Справедливість цього наслідку безпосередньо випливає з теореми 3 і формул 1, які не залежать від індексу $i \in N$.

На підставі наслідку 2 можна сказати, що вектори параметрів $\hat{\mu}_i$ гравців $i \in N$ є "узгодженими" між собою. Іншими словами, бажання усіх гравців $i \in N$ щодо значення критерію $j \in J$ у досягнутому компромісі x^* співпадають між собою.

Наслідок 3. Нехай набір $(\hat{x}, \hat{\mu})$ є рівновагою

у перевагах гравців гри GR . Тоді значення функцій корисності гравців у цій рівновазі рівні між собою і залежать лише від вибору індивідуально-оптимальної рівноваги $\hat{x}$, а саме:

$$\xi(\hat{x}) = v_i(\hat{x}, \hat{\mu}_i) = (\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) - S)/n, i \in N.$$

Доведення цього наслідку безпосередньо випливає з нерівностей (6).

Позначимо підмножину ситуацій вихідної гри G , які утворюють набори рівноваг у перевагах гри GR , через $RE_X = \{x \in X | (x, \mu) \in RE, \mu \in M\}$.

Для вивчення властивостей множини RE_X нагадаємо, що оптимальними за Парето ситуаціями вихідної гри G називаються такі ситуації $x^* \in X$, для яких $\forall y \succ x, y \in X$. В цьому означенні відношення домінування $x \succ y \Leftrightarrow u_i(x) \geq u_i(y), i \in J; \exists j \in J : u_j(x) > u_j(y)$.

Позначимо через PO - множину оптимальних за Парето ситуацій гри G .

Зв'язок множини RE_X з множиною PO - оптимальних за Парето ситуацій вихідної гри G встановлює наступна теорема.

Теорема 4. Нехай ситуація $\hat{x}$ задовольняє умові

$$\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) = \max_{x \in X} \sum_{j \in J} u_j(x). \quad (8)$$

Тоді $\hat{x} \in PO \cap RE_X$.

Доведення. Нехай ситуація $\hat{x}$ задовольняє умові (8). Спочатку покажемо, що $\hat{x} \in PO$. Припустимо супротивне, що $\hat{x} \notin PO$. Тоді, за означенням, $\exists y \in X$, що $y \succ \hat{x}$. Тобто $u_i(y) \geq u_i(\hat{x}), i \in J; \exists j \in J : u_j(y) > u_j(\hat{x})$. Просумуємо ліві та праві частини цих нерівностей та одержимо $\sum_{j \in J} u_j(y) > \sum_{j \in J} u_j(\hat{x})$, що суперечить (8).

Покажемо, що $\hat{x} \in RE_X$. Для цього достатньо показати, що $\exists \hat{\mu} \in M$, для якого набір $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in RE$. За теоремою 3 для цього, у свою чергу, достатньо, щоб компоненти вектора $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ обчислювались за формулою (1) та виконувалися нерівності (6). Припустимо супротивне, що деяка з нерівностей (6) порушується. Тобто $\exists i \in N, \exists x_i \in X_i$, такі, що $(\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) - S)/n < (\sum_{j \in J} u_j(x_i, \hat{x}_{N \setminus i}) - S)/n$. Звідси очевидно випливає нерівність

$\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) < \sum_{j \in J} u_j(x^*, \hat{x}_{N \setminus i})$, яка суперечить (8).

Теорему доведено.

Серед наведених вище властивостей рівноваг у перевагах гравців особливої уваги заслуговує наслідок 3. Він наводить на думку, що серед рівноваг у перевагах гравців гри GR можна виділити такі, які максимізують спільну функцію корисності гравців.

Рівновагу у перевагах $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in RE$ гравців гри GR будемо називати оптимальною, якщо вона максимізує спільну функцію корисності гравців, тобто $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in \text{Arg max} \{ \xi(x) | (x, \mu) \in RE \}$. Будемо позначати множину оптимальних у перевагах рівноваг гри GR через ORE .

Умови оптимальності рівноваг у перевагах гри GR встановлює наступна теорема.

Теорема 5. Набір $(\hat{x}, \hat{\mu})$ буде оптимальною рівновагою у перевагах гри GR тоді й лише тоді, коли ситуація $\hat{x}$ задовольняє умові (8), а компоненти вектору $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ обчислюються за формулою (1). Ситуація $\hat{x}$, яка утворює оптимальну у перевагах рівновагу $(\hat{x}, \hat{\mu})$ гри GR , є Парето-оптимальною ситуацією вихідної гри G .

Доведення. Нехай $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in ORE$. Тоді, за означенням, $\xi(\hat{x}) = \max_{(x, \mu) \in RE} (\sum_{j \in J} u_j(x) - S)/n$.

Звідси очевидно випливає, що $\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) = \max_{x \in RE_X} \sum_{j \in J} u_j(x)$. Доведемо, що

$\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) = \sum_{j \in J} u_j(x^*) = \max_{x \in X} \sum_{j \in J} u_j(x)$. Припустимо

супротивне, що $\max_{x \in RE_X} \sum_{j \in J} u_j(x) < \sum_{j \in J} u_j(x^*)$.

Оскільки за теоремою 4 $x^* \in RE_X$, то звідси випливає нерівність $\sum_{j \in J} u_j(x^*) \leq \max_{x \in RE_X} \sum_{j \in J} u_j(x)$,

яка приводить до суперечності $\sum_{j \in J} u_j(x^*) < \sum_{j \in J} u_j(x^*)$. Таким чином, виконується

умова (8). Звідси, також, за теоремою 4 одержимо $\hat{x} \in PO$.

Нехай виконується умова (8). Тоді за теоремою 4 $\hat{x} \in RE_X$. Оскільки компоненти вектора $\hat{\mu} = (\hat{\mu}_i)_{i \in N}$ обчислюються за формулою (1), то за теоремою 3 набір $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in RE$. Тепер покажемо, що $(\hat{x}, \hat{\mu}) \in ORE$. Припустимо супротивне, що $\exists x^* \in RE_X$, для якого має місце нерівність $(\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) - S)/n < (\sum_{j \in J} u_j(x^*) - S)/n$.

Оскільки $RE_X \subseteq X$, то $\exists \bar{x} \in X$, для якого виконується нерівність $\sum_{j \in J} u_j(x^*) \leq \sum_{j \in J} u_j(\bar{x})$.

Звідси одержимо нерівність $\sum_{j \in J} u_j(\hat{x}) \leq \sum_{j \in J} u_j(\bar{x})$,

яка суперечить (8). Теорему доведено.

Умови існування оптимальних у перевагах рівноваг гри GR встановлює наступний наслідок.

Наслідок 4. Нехай у грі G множини стратегій гравців X_i , $i \in N$, компактні, а критеріальні функції u_i , $i \in J$, напів-неперервні зверху. Тоді множина ORE оптимальних у перевагах рівноваг гри GR є непорожньою компактною множиною.

Справедливість цього наслідку очевидно випливає з теореми 5, оскільки за відомою з аналізу [4] теоремою Вейрштраса умови наслідку 4 є достатніми для непорожності і компактності множини розв'язків задачі (8).

Як висновок відмітимо, що оптимальні за Парето ситуації, які максимізують сумарний виграш гравців мають велике значення в теорії ігор, особливо кооперативних ігор. У кооперативних іграх [1] з трансферабельною корисністю ці ситуації є основою угоди між гравцями для поділів, які можуть утворювати ядро гри, N -ядро, вектор Шеплі. Підхід, що був розглянутим у цій роботі, пропонує ще один погляд на такий вибір гравців, який дозволяє скласти стабільну угоду в одноцільових іграх, де гравці йдуть на компроміс заради спільної цілі.

Список використаних джерел

1. Мулен Э. Теория игр с примерами из математической экономики. – М.: Мир, 1985.
2. Мащенко С.О. Слабкі індивідуально-оптимальні рівноваги // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. -2006. -2. -С. 216-223.
3. Мащенко С.О. Исследование стабильности равновесий на основе принципа индивидуальной оптимальности // Кибернетика и системный анализ.-2007. -4. -С. 162-169.
4. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1986.

Надійшла до редколегії 28.09.09

УДК 519.6: 519.8

Наконечний О.Г., проф., д. ф-м. н.,
Репецький С.П., проф., д. ф-м. н.,
Стащук Б.В., аспірант.

Теорія електропереносу системами з вузькими енергетичними зонами в магнітному полі

Розвинуто метод розрахунку електропровідності кристалів, що магнітно впорядковуються. Метод ґрунтується на теорії багатократного розсіяння. Отримано кластерний розклад для двочастинкової функції Гріна (електропровідності) кристала з врахуванням електрон-електронної взаємодії. За нульове одновузлове наближення в цьому розкладі обране наближення когерентного потенціалу. Отримані вирази дозволяють дослідити явище спінового транспорту в сильнокорельованих системах.

Ключові слова: функція Гріна, Фур'є представлення, когерентний потенціал, спіновий транспорт, електропровідність

E-mail: nakonechniy@unicyb.kiev.ua, srepetsky@univ.kiev.ua, bogdan.stashchuk@gmail.com

Статтю представив д.м.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

В системах із сильними електронними кореляціями в зовнішньому електричному полі існує давно відоме явище переносу заряду та порівняно недавно відкрите явище переносу спінів електронів [1,2]. Суттєвий прогрес в дослідженні спин-залежного транспорту та перспективи застосування цього явища в мікроелектроніці стимулює велику кількість робіт як по фундаментальному вивченню цього явища, так і по практичному його застосуванню [3, 4].

Характерною рисою електронної структури сильнокорельованих систем є наявність кулонівської щільності в енергетичному спектрі електронів, виникнення якої пов'язано з кулонівським відштовхуванням електронів з протилежно напрямленими спінами. Встановлено, що характер атомного і магнітного впорядкування, магнітні й кінетичні властивості сильнокорельованих систем (наприклад, сплавів з вузькими енергетичними зонами) суттєво залежать від положення рівня Фермі по відношенню до щільності в їх енергетичному

O.G. Nakonechniy, prof., Dr.Sc., S.P. Repetsky,
prof., Dr.Sc., B.V. Stashchuk, PhD Student

The theory of electrocarrying in systems with narrow energetic bands in magnetic field

The method for calculation of conductivity of disorder systems with strong electron correlations is developed. The method is based on the theory of multiple scattering. The cluster expansion is derived for two-particle Green's function of a disorder system with the account electron-electron interaction. As a zero one-site approximation of that expansion it is chosen the coherent potential approximation. The received expressions allow investigating the phenomenon of spin transport in strong correlated systems.

Key Words: Green's function, Fourier transform, coherent potential, spin transport, electrical conductivity

спектрі [5,6]. Однак більшість робіт по дослідженню електропровідності кристалів виконані в одноелектронному наближенні без врахування електрон-електронної взаємодії. В даній роботі розвинено метод розрахунку провідності неупорядкованих систем з врахуванням електрон-електронних кореляцій з використанням добре відомої в феромагнетизмі моделі Хаббарда [7]. Для розрахунку тензора статичної електропровідності сплаву при нехтуванні непружним розсіянням можна скористатися формулою Кубо [8]

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \hbar}{2\pi V \Omega_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \text{Sp} \left(v_{\alpha} (G(\varepsilon^+) - G(\varepsilon^-)) v_{\beta} (G(\varepsilon^+) - G(\varepsilon^-)) \right), \quad (1)$$

$$\text{де } G(\varepsilon^{\pm}) \equiv G(\varepsilon \pm i\delta) = (\varepsilon^{\pm} - H)^{-1} \quad (2)$$

залізнювальна (відповідає знаку "+") та випереджувальна (відповідає знаку "-") функції

Гріна [9,6] системи, H – одноелектронний гамільтоніан сплаву, ε – енергетичний параметр, $\delta \rightarrow +0$, v_α – оператор α -компоненти вектора швидкості електрона, $f(\varepsilon)$ – функція Фермі, Ω_0 – об'єм елементарної комірки, N – число вузлів підгратки, e – заряд електрона.

З визначення (2) і умови самоспряженості гамільтоніана сплаву ($H = H^\dagger$) випливає

$$\begin{aligned} G(\varepsilon^-) &= G^+(\varepsilon^+); \quad \tilde{G}(\varepsilon^-) = \tilde{G}^+(\varepsilon^+); \\ T(\varepsilon^-) &= T^+(\varepsilon^+). \end{aligned} \quad (3)$$

Використовуючи властивість самоусереднення тензора електропровідності при нульовій температурі, коли $-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$ (ε_F – енергія Фермі), тоді вираз (1) запишемо у вигляді

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \hbar}{4\pi N v \Omega_0} \text{Sp} \sum_{r,r'=+,-} (2\delta_{rr'} - 1) v_\alpha K(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}. \quad (4)$$

$$\text{де } K(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) = \langle G(\varepsilon^r) v_\beta G(\varepsilon^{r'}) \rangle.$$

Підставляючи вираз для функції Гріна [9,10] в (4), отримаємо

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= -\frac{e^2 \hbar}{4\pi N v \Omega_0} \text{Sp} \sum_{r,r'=+,-} (2\delta_{rr'} - 1) [v_\alpha \tilde{K}(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) + \\ &+ \tilde{K}(\varepsilon^r, v_\alpha, \varepsilon^{r'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon^r) \langle T(\varepsilon^r) \rangle + \tilde{K}(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) v_\alpha \times \\ &\times \tilde{G}(\varepsilon^{r'}) \langle T(\varepsilon^{r'}) \rangle + \tilde{K}(\varepsilon^r, v_\alpha, \varepsilon^{r'}) \times \\ &\times \langle T(\varepsilon^r) \rangle \tilde{K}(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) \langle T(\varepsilon^{r'}) \rangle] \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}. \end{aligned} \quad (5)$$

де $\tilde{K}(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) = \tilde{G}(\varepsilon^r) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon^{r'})$. У виразі (5) матриці $\tilde{K}_{0m}^{ij}(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'})$ у вузловому представленні обчислюються за формулою

$$\begin{aligned} (\tilde{K}_{0m}^{ij})^{r_1 r_2}(\varepsilon^r, v_\beta, \varepsilon^{r'}) &= N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} [\tilde{G}_{r_1 r_2}(\mathbf{k}, \varepsilon^r) v_{\beta i} \times \\ &\times \tilde{G}_{r_1 r_2}(\mathbf{k}, \varepsilon^{r'})]^{r_1 r_2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_m + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_2)}, \end{aligned} \quad (6)$$

де оператор швидкості електрона v_β визначається виразом [11,12]

$$v_{\beta i}^{r_1 r_2} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{\mathbf{k}}^{r_1 r_2}}{\partial k_\beta},$$

в якому $h_{\mathbf{k}}^{r_1 r_2}$ – інтеграли перескоку записані в $\mathbf{k}$ -представленні.

Одержати вираз для матричних елементів оператора α -компоненти вектора швидкості електрона v_β в $\mathbf{k}$ -представленні можна скориставшись виразом для похідної по часу від оператора координати r , тобто

$$i\hbar \frac{dr}{dt} = [rH]. \quad (7)$$

Запишемо операторну рівність (7) у представленні Ван'є

$$i\hbar v_{nm}^{ij} = (r_{in} - r_{jm}) h_{nm}^{ij}, \quad (8)$$

де $r_{in} = r_n + \rho_i$ – радіус-вектор вузла (in), r_n визначає початок координат n -ої елементарної комірки сплаву, що впорядковується, ρ_i – положення вузла i -ої підгратки в елементарній комірці.

Переходячи у виразі (8) від представлення Ван'є до $\mathbf{k}$ -представлення, замінюючи підсумовування по $\mathbf{k}$ інтегруванням, отримаємо

$$v_{\beta \mathbf{k} \mathbf{k}'}^{r_1 r_2} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{\mathbf{k}}^{r_1 r_2}}{\partial k_\beta} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}, \quad (9)$$

де $h_{\mathbf{k}}^{r_1 r_2}$ – Фур'є-представлення інтеграла перескоку [7]

$$h_{nm}^{r_1 r_2} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^{r_1 r_2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n + \rho_{r_1} - \mathbf{r}_m - \rho_{r_2})}. \quad (10)$$

Зрозуміло, що квазіхвильовий вектор $\mathbf{k}$ в формулі (10) змінюється в межах першої зони Брилюєна сплаву.

Без обмеження загальності функції Ван'є можна вибрати дійсними, що призводить до умови

$$h_{nm}^{ij} = h_{mn}^{ji}. \quad (11)$$

З умови (11) і формули (10) випливає $h^{ij}(\mathbf{k}) = h^{ji}(-\mathbf{k})$, а з останньої рівності й формули (9) отримаємо

$$v_{\alpha \mathbf{k} \mathbf{k}'}^i = v_{\alpha}^i(\mathbf{k}) = -v_{\alpha}^i(-\mathbf{k}). \quad (12)$$

З формул Дайсона [9] та (11) можна отримати

$$\tilde{G}_{nm}^{ij} = \tilde{G}_{mn}^{ji}. \quad (13)$$

Останнє співвідношення у k -представленні має вигляд [6,13]

$$\tilde{G}_{kk}^{ij} \equiv \tilde{G}^{ij}(k) = \tilde{G}^{ji}(-k). \quad (14)$$

З формул (12) і (14) випливає

$$[\tilde{G} v_{\alpha} \tilde{G}]_{mn}^{ji} = -[\tilde{G} v_{\alpha} \tilde{G}]_{nm}^{ij}.$$

Диференціюючи матричні елементи інтегралів перескоку в формулі (10) в k -представленні по відповідних компонентах хвильового вектора отримаємо матричні елементи оператора швидкості (9) в k -представленні.

Тензор електропровідності сплаву можна обчислити, якщо скористатися кластерним розкладом для T -матриці розсіювання [6,13] та провести у виразі (5) конфігураційне усереднення [10]. Нехтуючи внеском процесів розсіювання на кластерах із трьох і більше атомів слід підставити вираз для T -матриці у формулу (5) та зберегти лише суми по одному індексу $(i_1 n_1)$ та по двом індексам $(i_1 n_1), (i_2 n_2) \neq (i_1 n_1)$.

Конфігураційне середнє від добутку T -матриць $\langle T(\epsilon') \tilde{K}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') T(\epsilon') \rangle$ у виразі (5) для тензора електропровідності, як і розглянуте вище конфігураційне середнє від T -матриці $\langle T(\epsilon) \rangle$, можна записати у діаграмному вигляді [9,14]. Внески вказаних діаграм в електропровідність сплаву (5) пропорційні $\tilde{K}_{00}^{ii}(\epsilon', v_{\alpha}, \epsilon')$. Для кристалів кубічної симетрії виконується умова $\tilde{K}_{00}^{ii}(\epsilon', v_{\alpha}, \epsilon') = 0$ [15]. Тому внески зазначених діаграм в електропровідність обертаються в нуль. В наближенні діагонального безладу діаграми відповідають усім можливим діаграмам з відмінними зовнішніми індексами вузлів (in) , (jm) , у яких функція $\langle \tilde{G}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2}(\epsilon) \rangle$ може бути замінена на $\langle \tilde{K}_{n_1 n_2}^{i_1 i_2}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \rangle$.

Нехтуючи внесками процесів розсіювання на кластерах із трьох і більше атомів вираз $\langle T(\epsilon') \tilde{K}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') T(\epsilon') \rangle$ зводиться до рядів геометричної прогресії, що точно підсумовуються.

Нехтуючи внесками процесів розсіювання на кластерах з трьох і більше частинок отримаємо

$$\langle T(\epsilon') \tilde{K}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') T(\epsilon') \rangle_k^{q_2} = \sum_{(n_2 m) \neq (n_1 0)} \tilde{M}_{n_2 m}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \times \exp[ik(r_m + \rho_{n_2} - \rho_{n_1})], \quad (15)$$

де

$$\begin{aligned} M_{i_2 j_2 m}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') &= (x_i x_j + \epsilon_{0m}^y) M_{i_2 j_2 m}^{AA}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') + \\ &+ (x_i y_j - \epsilon_{0m}^y) M_{i_2 j_2 m}^{AH}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') + (y_i x_j - \epsilon_{0m}^y) \times \\ &\times M_{i_2 j_2 m}^{HA}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') + (y_i y_j + \epsilon_{0m}^y) M_{i_2 j_2 m}^{HH}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon'), \\ M_{i_2 j_2 m}^{AA}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') &= p_i^A p_j^A \langle p_{i_0}^A(\epsilon') - r_{i_0}^A(\epsilon') \rangle \tilde{K}_{i_2 j_2 m}^{AA}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \langle p_{j_0}^A(\epsilon') - \\ &- r_{j_0}^A(\epsilon') \rangle + p_i^A \langle p_{i_0}^A(\epsilon') - r_{i_0}^A(\epsilon') \rangle \tilde{K}_{i_2 j_2 m}^{AB}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \langle p_{j_0}^B(\epsilon') - \\ &+ T_{i_2 j_2 m}^{AA}(\epsilon') \tilde{K}_{i_2 j_2 m}^{AA}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') + T_{i_2 j_2 m}^{AB}(\epsilon') \tilde{K}_{i_2 j_2 m}^{AB}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \rangle \times \\ &\times [p_j^B \langle p_{j_0}^B(\epsilon') - r_{j_0}^B(\epsilon') \rangle + T_{j_2 m}^{AB}(\epsilon') \tilde{K}_{j_2 m}^{AB}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') + T_{j_2 m}^{BB}(\epsilon') \times \\ &\times \tilde{K}_{j_2 m}^{BB}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') T_{i_2 j_2 m}^{BB}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon')], \end{aligned} \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} T_{i_2 j_2 m}^{AA} &= (p_i^A)^2 p_j^A (1 - p_i^A p_j^A a_{n_2 m}^y a_{n_2 m}^y)^{-1} a_{n_2 m}^y a_{n_2 m}^y (p_{i_0}^A - r_{i_0}^A), \\ T_{j_2 m}^{AB} &= p_i^A p_j^B (1 - p_i^A p_j^B a_{n_2 m}^y a_{n_2 m}^y)^{-1} a_{n_2 m}^y (p_{j_0}^B - r_{j_0}^B), \\ (\lambda_1 \lambda_2 &= A, B), \quad p_i^A = -y_i, \quad p_i^B = x_i. \end{aligned}$$

Величини, що присутні в виразах (15), (15a), є матрицями по відношенню до індексів енергетичних зон χ, χ' .

Рівень Фермі ϵ_F у виразі для електропровідності (5) визначається рівнянням [7]

$$xZ^A + yZ^B = \int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon, \quad (16)$$

де Z^A, Z^B – число електронів, що припадає на один атом відповідно для компонентів сплаву A і B .

Вираз для електропровідності (5) при нульовій температурі та нульовому зовнішньому магнітному полі, коли немає залежності від спінового індексу (i по ньому проведено підсумовування), має наступний кінцевий вигляд

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi v \Omega_0} S p \sum_{i,j} \sum_{n_1, n_2} [2\delta_{i,j} - 1] \langle v_{\alpha} \tilde{K}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \rangle_{00}^{n_1 n_2} + \\ &+ \sum_{(j_2 m) \neq (i_2 0)} [\langle \tilde{K}(\epsilon', v_{\alpha}, \epsilon') v_{\beta} \tilde{G}(\epsilon') \rangle_{00}^{i_2 j_2 m} T_{i_2 j_2 m}^d(\epsilon') + \langle \tilde{K}(\epsilon', v_{\beta}, \epsilon') \times \\ &\times v_{\alpha} \tilde{G}(\epsilon') \rangle_{00}^{j_2 i_2 m} T_{j_2 i_2 m}^d(\epsilon') + \langle \tilde{K}(\epsilon', v_{\alpha}, \epsilon') \times v_{\beta} \tilde{G}(\epsilon') \rangle_{00}^{i_2 i_2 m} \times \end{aligned}$$

$$\times T_{jmi0}^n(\varepsilon') + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') p_\alpha \tilde{G}(\varepsilon')]_{0m}^j T_{jmi0}^n(\varepsilon') + \\ + \tilde{K}_{0m}^j(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') M_{jmi0}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}, \quad (17)$$

$$\text{де } T_{i0jm}^d = (A_{0m}^j)^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_{0m}^j a_{m0}^j + \varepsilon_{0m}^j) \times \\ \times [x_i - y_i + x_i y_i (x_j - y_j) a_{0m}^j a_{m0}^j] a_{0m}^j a_{m0}^j (t_{i0}^j - t_{j0}^j), \\ T_{i0jm}^n = (A_{0m}^j)^{-1} (x_i x_j y_i y_j a_{0m}^j a_{m0}^j + \varepsilon_{0m}^j) \times \\ \times [1 - x_i x_j y_i y_j (a_{0m}^j a_{m0}^j)^2] a_{0m}^j a_{m0}^j (t_{i0}^j - t_{j0}^j),$$

а величини $M_{jmi0}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon')$ визначаються формулою (15).

$$\sigma_{\alpha\beta,\varepsilon} = -\frac{e^2 \hbar}{4\pi V_0 v} \sum_{\varepsilon, \varepsilon' = \pm, -} (2\delta_{\varepsilon\varepsilon'} - 1) \sum_{\gamma, j} \{ [v_\beta \tilde{K}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon')]_{i0,0} + \sum_{\lambda, m_\lambda} p_{i0}^{\lambda, m_\lambda} \sum_{\substack{j \neq i0 \\ \lambda, m_\lambda}} p_{jl}^{\lambda, m_\lambda / \lambda, m_\lambda} [\tilde{K}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') v_\alpha \times \\ \times \tilde{G}(\varepsilon')]_{0,0} T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon')]_{i0,jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') v_\beta \times \\ \times \tilde{G}(\varepsilon')]_{0,0} T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') v_\beta \tilde{G}(\varepsilon')]_{i0,jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + \tilde{K}_{i0,jl}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') \times (18)$$

$$\times (t_{jl}^{\lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') t_{i0}^{\lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + t_{jl}^{\lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + \\ + T_{(jl,i0)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') t_{i0}^{\lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + T_{(jl,i0)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') \times \\ \times T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{i0,jl}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F},$$

$$\text{де } T_{(n_1, n_2)}^{(2n)} = [I - t^{n_1} \tilde{G} t^{n_2} \tilde{G}]^{-1} t^{n_1} \tilde{G} t^{n_2}, \\ T_{(n_1, n_2)}^{(2d)} = T_{(n_1, n_2)}^{(2n)} \tilde{G} t^{n_1}. \quad (19)$$

Формули для густини електронних станів [10] і електропровідності (18) дають можливість досліджувати кінетичні властивості сильнокорельованих систем в залежності від орієнтації спінів носіїв заряду, тобто спіновий транспорт, та пов'язати його особливості з

Якщо в гамільтоніані системи електронів неупорядкованого сплаву врахувати зєсманівську добавку за рахунок взаємодії магнітного моменту електрона із зовнішнім магнітним полем ($H \neq 0$), то у виразі (17) слід виділити доданки, що будуть відповідати різній орієнтації спінів електронів. При цьому різниця потоків електронів з різними напрямками спінів буде обумовлювати явище спінового транспорту.

При наявності зовнішнього магнітного поля вираз для спінових компонент тензора статичної електропровідності сплаву матиме вигляд

будовою енергетичного спектра електронів у таких матеріалах.

У випадку кінцевих температур ($T \neq 0$ K) у виразі для тензора статичної електропровідності з'явиться інтегрування за енергією (див. формулу (1)), а при розрахунку функції Гріна системи необхідно враховувати масовий оператор електрон-фононої взаємодії [10,6]. Тоді для спінових компонент тензора електропровідності можна записати найбільш загальні вирази

$$\sigma_{\alpha\beta,\varepsilon} = -\frac{e^2 \hbar}{4\pi V_0 v} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f(\varepsilon, \varepsilon_F)}{\partial \varepsilon} \right) \times \sum_{\varepsilon, \varepsilon' = \pm, -} (2\delta_{\varepsilon\varepsilon'} - 1) \sum_{\gamma, j} \{ [v_\beta \tilde{K}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon')]_{i0,0} + \sum_{\lambda, m_\lambda} p_{i0}^{\lambda, m_\lambda} \times \\ \times \sum_{\substack{j \neq i0 \\ \lambda, m_\lambda}} p_{jl}^{\lambda, m_\lambda / \lambda, m_\lambda} [[\tilde{K}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon')]_{0,0} T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + \\ + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon')]_{i0,jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') v_\beta \tilde{G}(\varepsilon')]_{0,0} \times \\ \times T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') + T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{i0,jl}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda, m_\lambda \lambda, m_\lambda}(\varepsilon') \} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & \times T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') + [\tilde{K}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') v_\beta \tilde{G}(\varepsilon')]_{i0,jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') + \tilde{K}_{i0,jl}(\varepsilon', v_\beta, \varepsilon') \times \\ & \times (t_{jl}^{\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') t_{i0}^{\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') + t_{jl}^{\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') + \\ & + T_{(jl,i0)}^{(2d)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') t_{i0}^{\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') + T_{(jl,i0)}^{(2d)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') \times \\ & \times T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') + T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon') \tilde{K}_{i0,jl}(\varepsilon', v_\alpha, \varepsilon') T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda,m_\lambda,\lambda,m_\lambda}(\varepsilon')) \}^{sy, \sigma} \end{aligned}$$

Зауважимо, що при використанні масового оператора електрон-фононої взаємодії слід розраховувати матричні елементи V . Ці матричні елементи визначаються виразом [10]

$$V_{\gamma_1, \gamma_2}^{\lambda} = \int \varphi_{\gamma_1}(\vec{r}) \left[-e_{nc} \frac{d}{dr} V^{\lambda}(|\vec{r}|) \right] \varphi_{\gamma_2}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (21)$$

Тут $\varphi_{\gamma}(\vec{r}) = R_{\gamma}(|\vec{r}|) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ хвильові функції центровані на одному вузлі, причому $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – дійсні. Враховуючи, що $e_{nc} = \cos \theta$, отримаємо

$$\begin{aligned} V_{\gamma_1, \gamma_2}^{\lambda} = & \int dr R_{\gamma_1}(r) R_{\gamma_2}(r) \left[-\frac{d}{dr} V^{\lambda}(r) \right] r^2 \int d\varphi \times \\ & \times \int d\theta Y_{l_1 m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi) \sin \theta \cos \theta. \end{aligned} \quad (22)$$

Виконуючи в (22) чисельне диференціювання та інтегрування, отримаємо матричні елементи V .

В якості системи для чисельного дослідження електропровідності та ефекту спінового транспорту в залежності від напруженості зовнішнього магнітного поля був обраний сплав $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$.

На рис. 1 представлені сумарна електропровідність системи σ_{xx} в залежності від величини напруженості H цього поля.

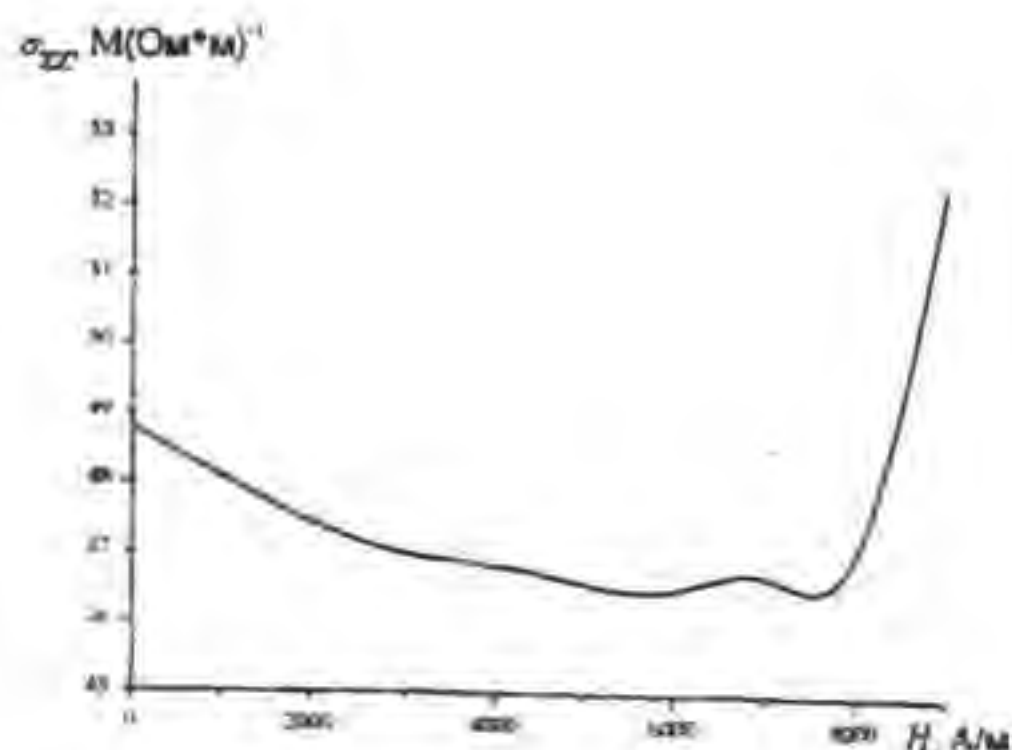


Рис. 1. Залежність електропровідності σ_{xx} сплаву $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$ від величини напруженості H зовнішнього магнітного поля.

Можна бачити, що при зростанні напруженості магнітного поля величина σ_{xx} немонокотонно змінюється, що пов'язано з зсманівським зміщенням енергетичних зон для електронів з різною спіноюю поляризацією (див. рис. 2).

Встановлено, що основний внесок в електропровідність дають електрони в стані з проекцією спіна, орієнтованого проти напрямку зовнішнього поля. Це викликано тим, що в зовнішньому магнітному полі власні магнітні моменти електронів орієнтуються переважно вздовж поля.

При нульовому зовнішньому магнітному полі умовні парціальні густини станів задовольняють рівностям

$$g_{\sigma}^{\mu}(\varepsilon) = g_{-\sigma}^{\mu}(\varepsilon), \quad g_{\sigma}^{\mu}(\varepsilon) = g_{-\sigma}^{\mu}(\varepsilon). \quad (23)$$

Густини станів для електронів з проекцією спіна вздовж і проти напрямку поля будуть однаковими $g_{\sigma} = g_{-\sigma}$. На рівні Фермі густина електронних станів для електронів з різною орієнтацією спіна відносно напрямку

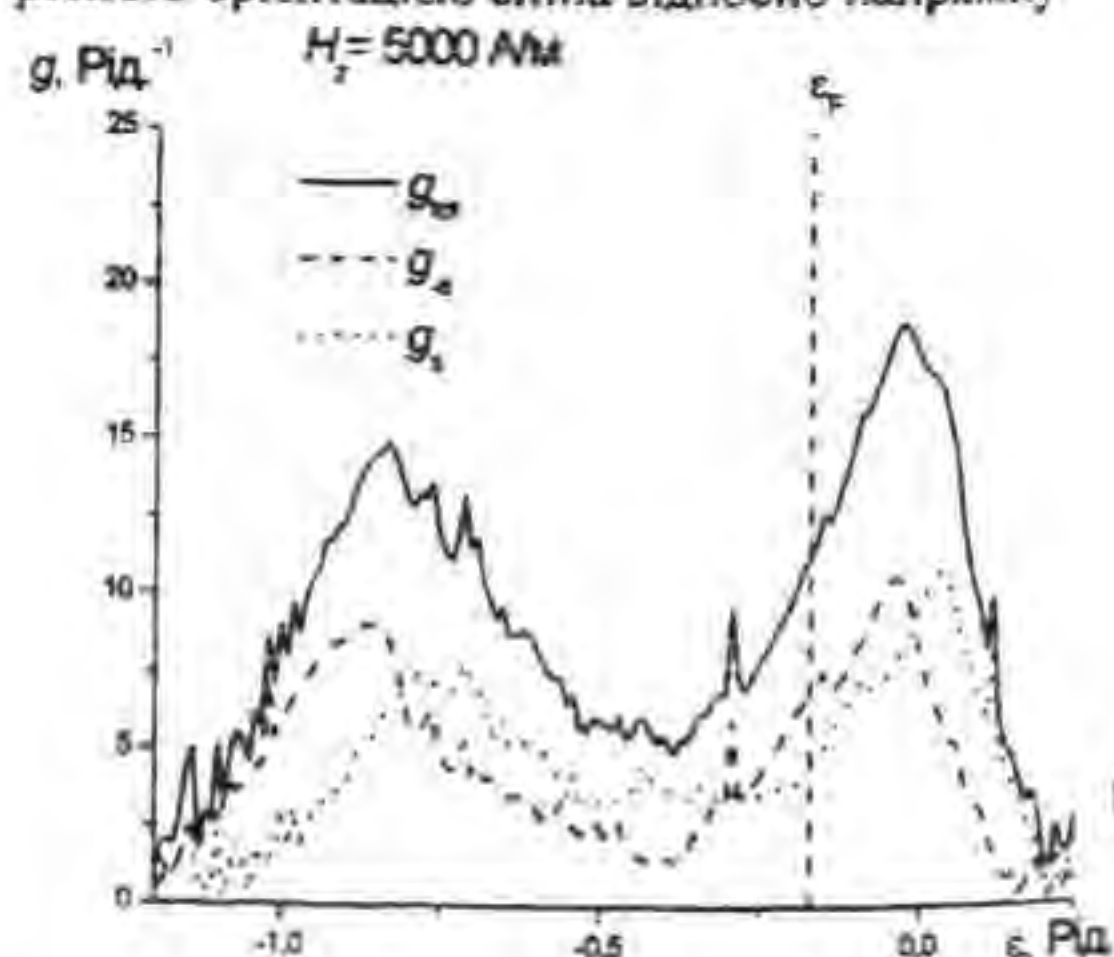


Рис. 2. Енергетичні залежності густини електронних станів $g(\varepsilon)$ сплаву $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}$ в магнітному полі з напруженістю $H=5000$ А/м.

магнітного поля теж буде однаковою. В результаті цього, електрони з різною орієнтацією спіна відносно магнітного поля будуть давати однаковий внесок в електропровідність. У випадку, коли напруженість магнітного поля не дорівнює нулю, рівності (20) не виконуються. На рівні Фермі густина електронних станів стає різною для електронів з різною орієнтацією спіна відносно напрямку зовнішнього магнітного поля. Спіни електронів переорієнтуються таким чином, щоб локалізований магнітний момент на вузлах ґратки був спрямований вздовж поля. Густина електронних станів на рівні Фермі, спіт яких зорієнтований протилежно напрямку магнітного поля (власні магнітні моменти орієнтовані уздовж поля), стане вищою, ніж густина станів електронів із протилежно орієнтованими спінами.

Необхідною умовою існування ефекту спінового транспорту є наявність кулонівської щільності в енергетичному спектрі електронів (рівень Фермі лежить в області щільності).

При сильних зовнішніх магнітних полях більшість електронів набуває спінової поляризації проти напрямку поля, що визначає їхній внесок в ефект спінового транспорту, і приводить до збільшення сумарної електропровідності неупорядкованої системи (внаслідок збільшення ступеня магнітного порядку). Ефект спінового транспорту може бути використаний у приладах мікроелектроніки для зміни досить слабкими магнітними полями поляризації електронів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Prinz G.A. Spin-polarized transport // *Physics Today* – 1995. – Vol. 48, № 58. – P. 58-63.
2. Tsoi M.V. et al. Excitation of a Magnetic Multilayer by an Electric Current // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – Vol. 80. – P. 4281-4284.
3. Flederling R., Kelm M., Reuseher G., Ossan W., Schmidt G., Waag A., Molencamp L.W. Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode // *Nature* – 1999. – Vol. 402, № 6763. – P. 787-790.
4. Борухович А.С. Особенности квантового туннелирования в мультислоях и гетероструктурах, содержащих ферромагнитные полупроводники // *УФН* – 1999. – Т. 169, № 7. – P. 737-751.
5. Гаркуша В.В., Лось В.Ф., Репецкий С.П. Выход за рамки одноузельного приближения с учетом ближнего и дальнего порядков в сплавах // *ТМФ*. – 1990. – Т. 84, № 1. – С. 91-100.
6. Репецкий С.П., Шатний Т.Д. Термодинамический потенциал системы электронов и фононов неупорядоченного сплава // *ТМФ*. – 2002. – Т. 131, № 3. – С. 456.
7. Изюмов Ю.А. Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций // *УФН* – 1995. – Т. 165, № 4. – С. 403-427.
8. Velicky B. Theory of Electronic Transport in Disordered Binary Alloys: Coherent - Potential approximation // *Phys. Rev.* – 1969. – Vol. 184, № 3. – P. 614-627.
9. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. – М.: Физматгиз. 1962. – 444 с.
10. Лось В.Ф., Репецкий С.П. Методы теории неупорядоченных систем. – Киев: Наукова думка, 1995. – 175 с.
11. Смирнов А.А. Обобщенная теория упорядочения сплавов. – Киев: Наукова думка, 1986. – 168 с.
12. Elliott R.J., Krumhansl J.A., Leath P.L. The theory and properties of randomly disordered crystals and related physical systems // *Rev. Mod. Phys.* – 1974. – Vol. 46, № 3. – P. 465-543.
13. Los' V.F., Repetsky S.P. A theory for the electrical conductivity of an ordered alloy // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 1994. – Vol. 6. – P. 1707-1730.
14. Imamura H., Kobayashi N., Takahashi S., Maekawa S. Conductance Quantization and Magnetoresistance in Magnetic Point Contacts // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 84. – P. 1003-1006.
15. Butler W.H., Nickel B.G. Problems in strong-scattering binary alloys // *Phys. Rev. Lett.* – 1973. – Vol. 30, № 9. – P. 373-377.

Надійшла до редколегії 28.04.09

УДК 519.8

Юрій К. Подлипенко, д.ф.-м.н., проф.
Микола Ю. Горбатенко, аспірант

**Оцінювання функціоналів від розв'язків
лінійних еліптичних рівнянь, при
повністю невідомих правих частинах**

В припущенні, що праві частини лінійних еліптичних рівнянь другого порядку повністю невідомі, одержано новий клас систем варіаційних рівнянь, через розв'язки яких виражаються мінімаксні оцінки функціоналів від невідомих розв'язків цих еліптичних рівнянь.

Ключові слова: мінімаксні оцінки, спостереження, функціонали від розв'язків.

E-mail: yourip@mail.ru

Статтю представив доктор фіз.-мат. наук, професор Акіменко В.В.

Вступ. Дана стаття є продовженням роботи [1]. При цьому зберігаються всі позначення і означення, прийняті в [1]. Посилання вигляду (1.1) буде далі скрізь означати посилання на формулу (1) роботи [1].

В далій статті, використовуючи методи робіт [1] і [2], одержано представлення для мінімакських оцінок значень функціоналів від розв'язків крайових задач для лінійних еліптичних рівнянь другого порядку при відсутності інформації відносно правих частин цих рівнянь.

Постановка задачі оцінювання. Нехай стан системи характеризується функцією $\varphi(x)$, яка визначаються як узагальнений розв'язок крайової задачі Діріхле:

$$-\operatorname{div}(A \operatorname{grad} \varphi) = B f_0 \quad \text{в } D, \quad (1)$$

$$\varphi = 0 \quad \text{на } \Gamma, \quad (2)$$

або з системи першого порядку:

$$A^{-1} j = \operatorname{grad} \varphi \quad \text{в } D, \quad (3)$$

$$\operatorname{div} j = B f_0 \quad \text{в } D, \quad \varphi = 0 \quad \text{на } \Gamma, \quad (4)$$

яка еквівалентна задачі (1), (2), де $j = -A \operatorname{grad} \varphi$, $A = A(x) = (a_{ij}(x))$ $n \times n$ -матриця, що задовольняє умовам, описаним в [1], f_0 – невідомий елемент гільбертового простору H_0 , B – лінійний неперервний оператор, що відображає H_0 в $L^2(D)$.

У відповідності з [3], під узагальненим розв'язком задачі (3)–(4) будемо розуміти пару

Yuri K. Podlipenko, professor,
Mykola Yu. Gorbatenko, post-graduate student.

**Estimation of functionals from solutions
to linear elliptic equations with completely
unknown right-hand sides**

Under the assumption that right-hand sides of the second order linear elliptic equations are completely unknown, we obtain a new class of systems of variational equations via whose solutions the minimax estimates of functionals from their unknown solutions are expressed.

Key Words: minimax estimates, observations, functionals from solutions.

функцій $(j, \varphi) \in H(\operatorname{div}; D) \times L^2(\Omega)$, що задовольняють співвідношенням (1.8), (1.9) при $f = B f_0$.

Задача, що досліджується в даній роботі, полягає в тому, щоб за спостереженням випадкових елементів вигляду (1.11), оцінити значення лінійного функціоналу $l(j, \varphi)$, вигляду (1.12) в класі оцінок виду (1.13). де (j, φ) – невідомий узагальнений розв'язок задачі (3)–(4).

Означення 1. Оцінку вигляду (1.15) будемо називати мінімаксною оцінкою $l(j, \varphi)$, якщо елементи $\tilde{u}_1 \in H_1$, $\tilde{u}_2 \in H_2$ і число $\tilde{c}$ визначаються із умови

$$\sup_{\tilde{f}_0 \in H_0, (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2) \in G_1} E |l(\tilde{j}, \tilde{\varphi}) - \widehat{l(\tilde{j}, \tilde{\varphi})}|^2 = \inf_{u_1 \in H_1, u_2 \in H_2, c \in \mathbb{R}^1} \quad (5)$$

де $(\tilde{j}, \tilde{\varphi})$ розв'язок задачі (3)–(4) при $\tilde{f}_0(x) = \tilde{f}_0(x)$. Величину

$$\rho := \{E |l(j, \varphi) - \widehat{l(j, \varphi)}|^2\}^{1/2} \quad (6)$$

будемо називати потімкою мінімаксного оцінювання виразу $l(j, \varphi)$.

Представлення для мінімакських оцінок і похибок оцінювання. Введемо до розгляду при фіксованому $u := (u_1, u_2) \in H := H_1 \times H_2$ пару функцій $(z_1(\cdot; u), z_2(\cdot; u)) \in H(\operatorname{div}; D) \times L^2(D)$, як єдиний розв'язок наступної варіаційної задачі:

$$\int_D (A^{-1}(x) z_1(x; u), q(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D z_2(x; u) \operatorname{div} q(x) dx = \int_D (l_1(x) - (C_1^t J_{H_1} u_1)(x), q(x))_{\mathbb{R}^n} dx \quad \forall q \in H(\operatorname{div}, D), \quad (7)$$

$$\int_D v(x) \operatorname{div} z_1(x; u) dx = \int_D (l_2(x) - (C_2^t J_{H_2} u_2)(x)) v(x) dx \quad \forall v \in L^2(D), \quad D. \quad (8)$$

Визначимо на просторі H відображення C : Тоді з цієї умови випливає, що множина U $H \rightarrow H_0^*$ за формулою $Cu = B^* z_2(\cdot; u)$, де через $B^* \in \mathcal{L}(L^2(D); H_0^*)$ позначено оператор, спряжений до оператора B . Тоді в силу того, що розв'язок задачі (7), (8) можна представити у вигляді $z_1(x; u) = \tilde{z}_1(x; u) + z_1^0(x)$ і $z_2(x; u) = \tilde{z}_2(x; u) + z_2^0(x)$, де через $\tilde{z}_1(x; u)$, $\tilde{z}_2(x; u)$ позначено розв'язок цієї задачі при $l_1 = 0$, $l_2 = 0$ а через $z_1^0(x)$, $z_2^0(x)$ розв'язок при $u = 0$, похідна Фреппе відображення C є лінійним обмеженим оператором $\tilde{C} \in \mathcal{L}(H; H_0^*)$, який визначений співвідношенням $\tilde{C}u = B^* \tilde{z}_2(\cdot; u)$. Припустимо, що виконується умова

$$\operatorname{Im} \tilde{C} = H_0^*,$$

яку ми будемо називати умовою регулярності відображення C , і позначимо через U множину

$$U := \{u = (u_1, u_2) \in H : B^* z_2(\cdot; u) = 0\}.$$

Лема 1. Задача знаходження мінімаксної оцінки виразу $l(v, p)$ еквівалентна задачі оптимального керування системою, що описується варіаційною задачею (7) - (8) з функцією вартості вигляду

$$I(u) = (\tilde{Q}_1^{-1} u_1, u_1)_{H_1} + (\tilde{Q}_2^{-1} u_2, u_2)_{H_2} \rightarrow \inf_{u \in U}. \quad (9)$$

Доведення. Дослівно повторюючи відповідні міркування з роботи [1] отримаємо при (u_1, u_2)

$$\begin{aligned} l(\tilde{j}, \tilde{\varphi}) - \widehat{l(\tilde{j}, \tilde{\varphi})} &= \\ &= (l_1 - C_1^t J_{H_1} u_1, \tilde{j})_{L^2(D)^n} + (l_2 - C_2^t J_{H_2} u_2, \tilde{\varphi})_{L^2(D)} - \\ &\quad - (u_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2} - c. \end{aligned} \quad (10)$$

Перетворемо праву частину (10). Для цього покладемо в (7) і (8) $q_1 = \tilde{j}$ і $v = \tilde{\varphi}$. Тоді дістанемо

$$\int_D (A^{-1}(x) \tilde{j}(x), z_1(x; u))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D z_2(x; u) \operatorname{div} \tilde{j}(x) dx = \int_D (l_1(x) - (C_1^t J_{H_1} u_1)(x), \tilde{j}(x))_{\mathbb{R}^n} dx, \quad (11)$$

$$\int_D \tilde{\varphi}(x) \operatorname{div} z_1(x; u) dx = \int_D (l_2(x) - (C_2^t J_{H_2} u_2)(x)) \tilde{\varphi}(x) dx. \quad (12)$$

З іншого боку, покладаючи в (1.8) і (1.9) $q_1 = z_1(\cdot; u)$, $v = z_2(\cdot; u)$ і $f = B \tilde{f}_0$, знаходимо

$$\int_D (A^{-1}(x) \tilde{j}(x), z_1(x; u))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \tilde{\varphi}(x) \operatorname{div} z_1(x; u) dx = 0, \quad (13)$$

$$\int_D z_2(x; u) \operatorname{div} \tilde{j}(x) dx = \int_D (B \tilde{f}_0)(x) z_2(x; u) dx. \quad (14)$$

Із (11)–(14) дістаємо

$$\begin{aligned} &(l_1 - C_1^t J_{H_1} u_1, \tilde{j})_{L^2(D)^n} + (l_2 - C_2^t J_{H_2} u_2, \tilde{\varphi})_{L^2(D)} \\ &= \int_D (A^{-1}(x) \tilde{j}(x), z_1(x; u))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D z_2(x; u) \operatorname{div} \tilde{j}(x) dx \\ &+ \int_D \tilde{\varphi}(x) \operatorname{div} z_1(x; u) dx = \int_D (A^{-1}(x) \tilde{j}(x), z_1(x; u))_{\mathbb{R}^n} dx \\ &+ \int_D \tilde{\varphi}(x) \operatorname{div} z_1(x; u) dx + \int_D z_2(x; u) \operatorname{div} \tilde{j}(x) dx \\ &= 0 + ((B \tilde{f}_0)(x), z_2(\cdot; u))_{L^2(D)} = (\tilde{f}_0, B^* z_2(\cdot; u))_{H_0}. \end{aligned}$$

Звідси і із (10) випливає, що

$$l(\tilde{j}, \tilde{\varphi}) - \widehat{l(\tilde{j}, \tilde{\varphi})} = (\tilde{f}_0, B^* z_2(\cdot; u))_{H_0} - (u_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} - (u_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2} - c.$$

Далі, з цієї рівності і з міркувань, що містяться в роботі [1], знаходимо

$$\mathbb{E} |l(\tilde{j}, \tilde{\varphi}) - \widehat{l(\tilde{j}, \tilde{\varphi})}|^2 = |(\tilde{f}_0, B^* z_2(\cdot; u))_{H_0} - c|^2 + \mathbb{E}[(u_1, \tilde{\eta}_1)_{H_1} + (u_2, \tilde{\eta}_2)_{H_2}]^2.$$

З останнього співвідношення дістаємо

$$\begin{aligned} \inf_{c \in \mathbb{R}} \sup_{\tilde{f}_0 \in H_0, (\tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_2) \in G_1} \mathbb{E} |l(\tilde{j}, \tilde{\varphi}) - \widehat{l(\tilde{j}, \tilde{\varphi})}|^2 \\ = \inf_{c \in \mathbb{R}} \sup_{\tilde{f}_0 \in H_0} [(\tilde{f}_0, B^* z_2(\cdot; u))_{H_0} - c]^2 \\ + \sup_{(\tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_2) \in G_1} \mathbb{E}[(\tilde{\eta}_1, u_1)_{H_1} + (\tilde{\eta}_2, u_2)_{H_2}]^2 \\ = \begin{cases} \infty, & \text{при } B^* z_2(\cdot; u) \neq 0, \\ 0, & \text{при } B^* z_2(\cdot; u) = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

$$+ \sup_{(\tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_2) \in G_1} \mathbb{E}[(\tilde{\eta}_1, u_1)_{H_1} + (\tilde{\eta}_2, u_2)_{H_2}]^2, \quad (15)$$

де інфімум по c досягається при $c = 0$. Далі, як і в [1], звідси знаходимо

$$\inf_{c \in \mathbb{R}} \sup_{\tilde{f}_0 \in H_0, (\tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_2) \in G_1} \mathbb{E} |l(\tilde{j}, \tilde{\varphi}) - \widehat{l(\tilde{j}, \tilde{\varphi})}|^2 = I(u).$$

при $c = 0$, а $I(u)$ визначається формулою (9). Цим лема доведена.

В результаті розв'язування задачі оптимального керування (7) – (9) із застосуванням методу невизначених множників Лагранжа, приходимо до наступного результату.

Теорема 1 Існує єдина мінімаксна оцінка значення $l(j, \varphi)$, яка має вигляд

$$\widehat{l(j, \varphi)} = (y_1(j; \eta_1), \hat{u}_1)_{H_1} + (y_2(\varphi; \eta_2), \hat{u}_2)_{H_2} + \hat{c}$$

де $\hat{c} = 0$, $\hat{u}_1 = \tilde{Q}_1 C_1 p_1$, $\hat{u}_2 = \tilde{Q}_2 C_2 p_2$, а функції $p_1 \in H(\operatorname{div} D)$ і $p_2 \in L^2(D)$, а також допоміжні функції $\hat{z}_1 \in H(\operatorname{div} D)$ $\hat{z}_2 \in L^2(D)$ та множник Лагранжа $\lambda \in H_0$ знаходяться з розв'язку наступної системи варіаційних рівнянь:

$$\begin{aligned} \int_D (A^{-1}(x) \hat{z}_1(x), q_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \hat{z}_2(x) \operatorname{div} q_1(x) dx \\ = \int_D (l_1(x) - C_1^T J_{H_1} \tilde{Q}_1 C_1 p_1(x), q_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx \quad \forall q_1 \in H(\operatorname{div}, D). \end{aligned} \quad (16)$$

$$\int_D v_1(x) \operatorname{div} \hat{z}_1(x) dx = \int_D (l_2(x) - C_2^T J_{H_2} \tilde{Q}_2 C_2 p_2(x)) v_1(x) dx \quad \forall v_1 \in L^2(D), \quad (17)$$

$$B^* \hat{z}_2 = 0, \quad (18)$$

$$\int_D (A^{-1}(x) p_1(x), q_2(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D p_2(x) \operatorname{div} q_2(x) dx = 0 \quad \forall q_2 \in H(\operatorname{div}, D), \quad (19)$$

$$\int_D v_2(x) \operatorname{div} \hat{p}_1(x) dx = \int_D v_2(x) B \lambda(x) dx \quad \forall v_2 \in L^2(D). \quad (20)$$

Задача (16) – (20) однозначно розв'язна, яких $\tau \in \mathbb{R}$ і $w = (w_1, w_2) \in H_0$ виконується Потім мінімаксного оцінювання ϱ визначається співвідношення формулою

$$\varrho = l(p_1, p_2)^{1/2}. \quad (21)$$

$$\frac{d}{dt} I_\lambda(\hat{u} + \tau w) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad (22)$$

Доведення Неважко показати, що множина U замкнена і опукла в просторі H . Звідси та із вигляду функціоналу $I(u)$ приходимо до висновку, що існує єдиний елемент $\hat{u} := (\hat{u}_1, \hat{u}_2) \in U$, на якому досягається мінімум цього функціоналу, тобто $I(\hat{u}) = \inf_{u \in U} I(u)$.

Використовуючи знов умову регулярності, внаслідок теорема на с.73 з [4] одержимо, що існує множник Лагранжа $\lambda \in H_0$ такий, що для будь-

де через I_λ позначена функція Лагранжа, що відповідає функціоналу I , яка визначається за формулою

$$I_\lambda(u) = I(u) + 2(\lambda, B^* z_2(\cdot, u))_{H_0}.$$

Обчислюючи похідну в (22) приходимо до співвідношення

$$\begin{aligned} (B \lambda, \hat{z}_2(\cdot; w))_{L^2(D)} \\ + (\tilde{Q}_1^{-1} \hat{u}_1, w_1)_{H_1} + (\tilde{Q}_2^{-1} \hat{u}_2, w_2)_{H_2} = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Далі, введемо функції $p_1 \in H(\operatorname{div}, D)$ і $p_2 \in L^2(D)$ як єдиний розв'язок задачі

$$\begin{aligned} & \int_D (A^{-1}(x) p_1(x), q_2(x))_{\mathbb{R}^n} dx \\ & + \int_D p_2(x) \operatorname{div} q_2(x) dx = 0 \quad \forall q_2 \in H(\operatorname{div}, D), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & \int_D v_2(x) \operatorname{div} p_1(x) dx \\ & = \int_D v_2(x) B\lambda(x) dx \quad \forall v_2 \in L^2(D). \end{aligned} \quad (25)$$

Тоді покладаючи в (24) $q_2 = \tilde{z}_1(\cdot; w)$, а в (25) $v_2 = \tilde{z}_2(\cdot; w)$, отримаємо

$$\begin{aligned} & \int_D (A^{-1}(x) p_1(x), \tilde{z}_1(x; w))_{\mathbb{R}^n} dx \\ & + \int_D p_2(x) \operatorname{div} \tilde{z}_1(x; w) dx = 0, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} & \int_D \tilde{z}_2(x; w) \operatorname{div} p_1(x) dx \\ & = \int_D \tilde{z}_2(x; w) B\lambda(x) dx. \end{aligned} \quad (27)$$

Із (26) і (27) знаходимо

$$\begin{aligned} & (B\lambda(x), \tilde{z}_2(\cdot; w))_{L^2(D)} = \int_D \tilde{z}_2(x; w) \operatorname{div} p_1(x) dx \\ & + \int_D (A^{-1}(x) p_1(x), \tilde{z}_1(x; w))_{\mathbb{R}^n} dx \\ & + \int_D p_2(x) \operatorname{div} \tilde{z}_1(x; w) dx \\ & = \int_D (A^{-1}(x) \tilde{z}_1(x; w), p_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx \\ & + \int_D \tilde{z}_2(x; w) \operatorname{div} p_1(x) dx \\ & + \int_D p_2(x) \operatorname{div} \tilde{z}_1(x; w) dx \end{aligned}$$

$$= -(w_1, C_1 p_1)_{H_1} - (w_2, C_2 p_2)_{H_2}.$$

Приймаючи до уваги рівність (23), маємо

$$\begin{aligned} & (w_1, C_1 p_1)_{H_1} + (w_2, C_2 p_2)_{H_2} \\ & = (\tilde{Q}_1^{-1} \hat{u}_1, w_1)_{H_1} + (\tilde{Q}_2^{-1} \hat{u}_2, w_2)_{H_2}. \end{aligned}$$

Звідси випливає, що

$$\hat{u}_1 = \tilde{Q}_1 C_1 p_1, \quad \hat{u}_2 = \tilde{Q}_2 C_2 p_2. \quad (28)$$

Заміняючи в правих частинах рівностей (7), (8) u_1 і u_2 на $\hat{u}_1$ і $\hat{u}_2$, котрі визначаються виразами (28), і, вводячи позначення $z_1(x; \hat{u}) =: \hat{z}_1(x)$, $z_2(x; \hat{u}) =: \hat{z}_2(x)$, отримуємо, що функції $(\hat{z}_1, \hat{z}_2)$ і (p_1, p_2) задовольняють системі рівнянь (16) – (20), однозначна розв'язність якої випливає з єдиності елементу $\hat{u} = (\hat{u}_1, \hat{u}_2)$.

Знайдемо далі похибку оцінювання. Враховуючи (6), (28) і той факт, що $B^* \hat{z}_2 = 0$, отримуємо

$$\varrho = I(\hat{u}) = (B\lambda, \hat{z}_2)_{L^2(D)}$$

$$\begin{aligned} & + (\tilde{Q}_1^{-1} \hat{u}_1, \hat{u}_1)_{H_1} + (\tilde{Q}_2^{-1} \hat{u}_2, \hat{u}_2)_{H_2} = (B\lambda, \hat{z}_2)_{L^2(D)} \\ & + (C_1 p_1, \tilde{Q}_1 C_1 p_1)_{H_1} + (C_2 p_2, \tilde{Q}_2 C_2 p_2)_{H_2}. \end{aligned} \quad (29)$$

Покладаючи в (19) і (20) $q_2 = \hat{z}_1$ і $v_2 = \hat{z}_2$, знаходимо

$$\begin{aligned} & \int_D (A^{-1}(x) p_1(x), \hat{z}_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx \\ & + \int_D p_2(x) \operatorname{div} \hat{z}_1(x) dx = 0, \end{aligned}$$

$$\int_D \hat{z}_2(x) \operatorname{div} p_1(x) dx = \int_D \hat{z}_2(x) B\lambda(x) dx.$$

З останніх двох співвідношень і з системи варіаційних рівнянь (16) і (17), в яких покладено $q_1 = p_1$ і $v_1 = p_2$ матимемо

$$\begin{aligned} 0 & = \int_D \hat{z}_2(x) \operatorname{div} p_1(x) dx \\ & + \int_D (A^{-1}(x) p_1(x), \hat{z}_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D p_2(x) \operatorname{div} \hat{z}_1(x) dx \\ & = \int_D (A^{-1}(x) \hat{z}_1(x), p_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \hat{z}_2(x) \operatorname{div} p_1(x) dx \\ & + \int_D p_2(x) \operatorname{div} \hat{z}_1(x) dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_D (l_1(x) - C_1^t J_{H_1} \bar{Q}_1 C_1 p_1(x), p_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D (l_2(x) - C_2^t J_{H_2} \bar{Q}_2 C_2 p_2(x)) p_2(x) dx \\
 &= \int_D (l_1(x), p_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D l_2(x) p_2(x) dx \\
 &\quad - (C_1 p_1, \bar{Q}_1 C_1 p_1)_{H_1} - (C_2 p_2, \bar{Q}_2 C_2 p_2)_{H_2}.
 \end{aligned} \tag{30}$$

З (28) і (30) випливає співвідношення (21) вигляд

$$\widehat{l(\hat{j}, \varphi)} = l(\hat{j}, \hat{\varphi}).$$

для виразу похибки оцінювання. Теорема доведена. Використовуючи теорему 1, отримано представлення для мінімаксної оцінки виразу $l(\hat{j}, \varphi)$, що не залежить від конкретного вигляду функціоналу l .

де випадкові поля $\hat{j} \in L^2(\Omega, H(\operatorname{div}, D))$ і $\hat{\varphi} \in L^2(\Omega, L^2(D))$, а також допоміжні випадкові поля $\hat{p}_1 \in L^2(\Omega, H(\operatorname{div}, D))$ і $\hat{p}_2 \in L^2(\Omega, L^2(D))$ та елемент $\bar{\lambda}$ знаходяться з розв'язку наступної системи стохастичних рівнянь:

Теорема 2. Мінімаксна оцінка виразу $l(\hat{j}, \varphi)$ має

$$\begin{aligned}
 \int_D (A^{-1}(x) \hat{p}_1(x, \omega), q_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \hat{p}_2(x, \omega) \operatorname{div} q_1(x) dx &= \int_D (C_1^t J_{H_1} \bar{Q}_1 (y_1(\hat{j}, \eta_1(\omega)) \\
 &\quad - C_1 \hat{j}(\cdot, \omega))(x), q_1(x))_{\mathbb{R}^n} dx \quad \forall q_1 \in H(\operatorname{div}, D).
 \end{aligned} \tag{31}$$

$$\int_D v_1(x) \operatorname{div} \hat{p}_1(x, \omega) dx = \int_D (C_2^t J_{H_2} \bar{Q}_2 (y_2(\varphi, \eta_2(\omega)) - C_2 \hat{\varphi}(\cdot, \omega))(x) v_1(x) dx \quad \forall v_1 \in L^2(D). \tag{32}$$

$$B^* \hat{p}(\cdot, \omega) = 0, \tag{33}$$

$$\int_D (A^{-1}(x) \hat{j}(x, \omega), q_2(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \hat{\varphi}(x, \omega) \operatorname{div} q_2(x) dx = 0 \quad \forall q_2 \in H(\operatorname{div}, D), \tag{34}$$

$$\int_D v_2(x) \operatorname{div} \hat{j}(x, \omega) dx = \int_D v_2(x) ((B \bar{\lambda})(x, \omega) + f_0(x)) dx \quad \forall v_2 \in V_2. \tag{35}$$

в яких рівності (31) – (35) виконуються з задачі ймовірністю 1. Задача (31) – (35) має єдиний розв'язок.

В якості прикладу розглянемо випадок, коли $H_0 = \mathbb{R}^m$, $f_0 = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, $B f_0(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i w_i(x)$, де $w_i \in L^2(D)$, $i = \overline{1, m}$ – задані в D лінійно незалежні функції. Тоді $B^* \nu = (\int_D w_1 \nu dx, \dots, \int_D w_m \nu dx)$. В цьому випадку неважко переконатися, що умова регулярності відображення C , яке в даному випадку має вигляд

$$\begin{aligned}
 \int_D (A^{-1}(x) v_1^{(i)}(x), q(x))_{\mathbb{R}^n} dx \\
 + \int_D v_2^{(i)}(x) \operatorname{div} q(x) dx = 0 \quad \forall q \in H(\operatorname{div}, D).
 \end{aligned} \tag{36}$$

$$\begin{aligned}
 \int_D \nu(x) \operatorname{div} v_1^{(i)}(x) dx \\
 = \int_D w_i(x) \nu(x) dx \quad \forall \nu \in L^2(D).
 \end{aligned} \tag{37}$$

$$\operatorname{Im} \left(\int_D w_1 \bar{z}_2(\cdot; u) dx, \dots, \int_D w_m \bar{z}_2(\cdot; u) dx \right) = \mathbb{R}^m.$$

Для оператора B , що розглядається в цьому прикладі, рівняння (18) і (33) приймуть вигляд $\int_D w_i(x) \bar{z}(x) dx = 0$ і $\int_D w_i(x) \bar{p}(x) dx$, $i = \overline{1, m}$, відповідно. Дійсно, нехай функції $v_1^{(i)}$, $v_2^{(i)}$, $i = \overline{1, m}$, задовольняють рівняння (36), (37). Приймаючи до уваги, що функції $\bar{z}_1(x; u)$ і $\bar{z}_2(x; u)$ є розв'язком наступної варіаційної задачі:

буде виконуватись, якщо система елементів $(C_1 v_1^{(i)}, C_2 v_2^{(i)})$, $i = \overline{1, m}$, буде лінійно незалежною в просторі $H = H_1 \times H_2$, де $(v_1^{(i)}, v_2^{(i)})$ розв'язок

$$\begin{aligned}
 \int_D (A^{-1}(x) \bar{z}_1(x; u), q(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \bar{z}_2(x; u) \operatorname{div} q(x) dx = \\
 - \int_D ((C_1^t J_{H_1} u_1)(x), q(x))_{\mathbb{R}^n} dx \quad \forall q \in H(\operatorname{div}, D).
 \end{aligned} \tag{38}$$

$$\int_D v(x) \operatorname{div} \bar{z}_1(x; u) dx = - \int_D (C_2^t J_{H_2} u_2)(x) v(x) dx \quad \forall v \in L^2(D). \quad (39)$$

Поклавши в (36) $q(x) = \bar{z}_1(x; u)$ і в (37) $v(x) = \bar{z}_2(x; u)$, отримаємо

$$\int_D (A^{-1}(x) v_1^{(i)}(x), \bar{z}_1(x; u))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D v_2^{(i)}(x) \operatorname{div} \bar{z}_1(x; u) dx = 0, \quad (40)$$

$$\int_D \bar{z}_2(x; u) \operatorname{div} v_1^{(i)}(x) dx = \int_D w_i(x) \bar{z}_2(x; u) dx. \quad (41)$$

Далі, покладаючи в (38) $q(x) = v_1^{(i)}(x)$ і в (39) $v(x) = v_2^{(i)}(x)$, прийдемо до співвідношень

$$\int_D (A^{-1}(x) \bar{z}_1(x; u), v_1^{(i)}(x))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D \bar{z}_2(x; u) \operatorname{div} v_1^{(i)}(x) dx = - \int_D ((C_1^t J_{H_1} u_1)(x), v_1^{(i)}(x))_{\mathbb{R}^n} dx. \quad (42)$$

$$\int_D v_2^{(i)}(x) \operatorname{div} \bar{z}_1(x; u) dx = - \int_D (C_2^t J_{H_2} u_2)(x) v_2^{(i)}(x) dx. \quad (43)$$

З рівностей (40)–(43) маємо

$$\int_D w_i(x) \bar{z}_2(x; u) dx = \int_D \bar{z}_2(x; u) \operatorname{div} v_1^{(i)}(x) dx$$

$$= \int_D (A^{-1}(x) v_1^{(i)}(x), \bar{z}_1(x; u))_{\mathbb{R}^n} dx + \int_D ((C_1^t J_{H_1} u_1)(x), v_1^{(i)}(x))_{\mathbb{R}^n} dx$$

$$= - \int_D v_2^{(i)}(x) \operatorname{div} \bar{z}_1(x; u) dx + \int_D ((C_1^t J_{H_1} u_1)(x), v_1^{(i)}(x))_{\mathbb{R}^n} dx$$

$$= \int_D (C_2^t J_{H_2} u_2)(x) v_2^{(i)}(x) dx + \int_D ((C_1^t J_{H_1} u_1)(x), v_1^{(i)}(x))_{\mathbb{R}^n} dx$$

$$= (u_1, C_1 v_1^{(i)})_{H_1} + (u_2, C_2 v_2^{(i)})_{H_2} = ((u_1, u_2), (C_1 v_1^{(i)}, C_2 v_2^{(i)}))_H.$$

Виконання умови регулярності відображення C , тепер впливає з прикладу на с. 55 з [4].

Висновки. В даній роботі досліджені задачі мінімаксного середньоквадратичного оцінювання параметрів крайових задач для лінійних еліптичних рівнянь з частинними похідними при заданих квадратичних обмеженнях на невідомі статистичні характеристики шумів в спостереженнях та при відсутності інформації відносно правих частин цих рівнянь.

Використовуючи змішані варіаційні постановки крайових задач, що розглядаються

в роботі, а також метод невизначених множників Лагранжа в абстрактній формі, отримані:

Нові твердження про зведення задач мінімаксного оцінювання до спеціальних задач оптимального керування систем, які описуються еліптичними рівняннями з квадратичними критеріями якості;

Системи еліптичних рівнянь, через розв'язки яких виражаються відповідні мінімаксні оцінки і похибки оцінювання.

Список використаних джерел

- [1] Ю.К. Поддипенко, М.Ю. Горбатенко. Оцінювання узагальнених розв'язків лінійних еліптичних рівнянь, що допускають змішане варіаційне формулювання – Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки 2008, 3.
- [2] Наконечний О.Г. Оптимальне керування та оцінювання в рівняннях із частинними похідними. – Київський університет. Київ 2004. – 103 с.
- [3] F. Brezzi, M. Fortin. Mixed and hybrid finite element methods. – Springer-Verlag, New York, 1991 – 350 p.
- [4] Иоффе А.Д., Тихомиров В.М. Теория экстремальных задач. – М.: Наука, 1974. – 479 с.

Надійшла до редколегії 25.06.09

УДК 519.21

Пророченко О.С., студент
Чечельницький О.А., к. ф.-м. н., доц.

Стационарні характеристики мережевої моделі з неординарним пуассонівським вхідним потоком вимог

Досліджено стаціонарний режим мережевої моделі з неординарним вхідним пуассонівським потоком вимог. Отриманий ергодичний розподіл процесу обслуговування.

Ключові слова: мережева модель, неординарний пуассонівський вхідний потік, ергодичний розподіл.

Статтю представив д.т.н., професор Акіменко В.В.

1. Опис моделі.

Багато сучасних об'єктів, які виконують ті чи інші технологічні процеси, мають мережеву форму організації. В різних сферах нашого життя звичними стали комп'ютерні мережі, телефонні мережі, мережі банкоматів тощо. В загальному плані будь-яка мережа складається з певної кількості функціонуючих елементів, які прийнято називати вузлами мережі. Вузли взаємодіють між собою. Задачею вузлів є обробка вимог (завдань), які надходять на них з зовні. Дуже часто завдання, яке надходить, є завданням не для одного вузла, а відразу для декількох, або навіть для всіх вузлів мережі. Ось чому, велике значення має аналіз властивостей математичних моделей мережевих структур з неординарними вхідними потоками, тобто потоками, з яких вимоги надходять одночасно на всі вузли мережі.

У даній статті ми розглянемо модель мережі Джексона, елементами якої є системи масового обслуговування типу $M/M/\infty$ з пуассонівським вхідним потоком вимог $\nu(t)$ з параметром, $b > 0$. Вимоги з потоку $\nu(t)$ прибувають парами. Одна на першу систему, а друга вимога з потоку прибуває на другу систему обслуговування. Нехай $\mu_i > 0, i = 1, 2$ параметри показникових розподілів часу обслуговування відповідно в першій та другій системі. Позначимо також через $X_i(t)$ число вимог, які обслуговуються в першій системі $M/M/\infty$ в

Prorochenko O.S.
Chechelnitsky O.A.

The stationary characteristics of the network model with the nonordinary Poisson input flow of customers.

The stationary regime of the network model with the nonordinary Poisson input flow of customers is investigated here. An ergodic distribution was obtained for the service process.

Key Words: network model, nonordinary Poisson input flow, ergodic distribution.

момент часу t , а через $X_2(t)$ - число вимог у другій системі в момент часу t . Після обслуговування в першому вузлі вимога з ймовірністю p_{12} надходить на обслуговування до другої системи, або з ймовірністю p_{13} залишає нашу мережу. Аналогічно, після обслуговування в другому вузлі вимога з ймовірністю p_{21} переходить на обслуговування до першого вузла, або з ймовірністю p_{22} залишає мережу.

Однією з ключових проблем, яка розв'язується в рамках теорії масового обслуговування, є дослідження стаціонарних характеристик моделі. Очевидно, що найбільш повним успіхом на цьому шляху є випадки, коли вдається знайти стаціонарний розподіл процесу обслуговування $(X_1(t), X_2(t))$. В зв'язку з цим має місце наступна теорема.

Теорема 1. Нехай мережа Джексона $(M/M/\infty)^2$ є відкритою, тобто хоча б для одного індексу $i=1, 2$ має місце строга нерівність: $p_{i3} > 0$. Тоді процес обслуговування $(X_1(t), X_2(t))$ в мережі Джексона $(M/M/\infty)^2$ з неординарним пуассонівським потоком вимог $\nu(t)$ має ергодичний розподіл з генератрисою наступного вигляду:

$$\begin{aligned} \varphi(z_1, z_2) &= Mz_1^{X_1} z_2^{X_2} = \\ &= \exp\{-c_1(1-z_1) - c_2(1-z_2) - \end{aligned}$$

$$-c_3(1-z_1z_2)-c_4(1-z_1^2)-c_5(1-z_2^2)\},$$

де константи розподілу c_1, c_2, c_3, c_4 та c_5 мають наступний вигляд

$$c_1 = b \left(\frac{(s_1 + \mu_2)(s_1 - \mu_1 - \mu_2 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_2}{s_1 s_2} + \right. \\ \left. + \frac{(s_2 + \mu_1)(-s_2 + \mu_1 + \mu_2 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_2 p_{21}}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \right. \\ \left. + \frac{\mu_2 p_{21}(-s_2 + \mu_1 + \mu_2 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_2 p_{21}}{s_1 s_2} \right),$$

$$c_2 = b \left(\frac{(s_1 + \mu_1)(s_1 - \mu_2 - \mu_1 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_1}{s_1 s_2} + \right. \\ \left. + \frac{(s_2 + \mu_1)(-s_2 + \mu_2 + \mu_1 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_1 p_{12}}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \right. \\ \left. + \frac{\mu_1 p_{12}(-s_2 + \mu_2 + \mu_1 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_1 p_{12}}{s_1 s_2} \right),$$

$$c_3 = b \left(\frac{(s_1 + \mu_2)(\mu_1 - s_1)}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \frac{(s_2 + \mu_1)(s_2 - \mu_1)}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} - \right. \\ \left. - \frac{\mu_1 p_{12} \mu_2 p_{21} (s_1 - s_2)^2 - 2s_1 s_2}{(s_1 - s_2)^2 2s_1 s_2 (s_1 + s_2)} \right),$$

$$c_4 = b \frac{(s_1 + \mu_2) \mu_2 p_{21}}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} - \frac{(s_2 + \mu_1) \mu_1 p_{12}}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)}$$

$$c_5 = \frac{(s_1 + \mu_1) \mu_1 p_{12}}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} - \frac{(s_2 + \mu_2) \mu_2 p_{21}}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)}$$

В останніх виразах s_1 та s_2 є розв'язками рівняння $s^2 + s(\mu_1 + \mu_2) + \mu_1 \mu_2 (1 - p_{12} p_{21}) = 0$:

$$s_{1,2} = \frac{-(\mu_1 + \mu_2) \pm \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 p_{12} p_{21}}}{2}$$

Доведення. Процес обслуговування $(X_1(t), X_2(t))$ є двовимірним ланцюгом Маркова з неперервним часом та зліченною множиною станів. Ергодичний розподіл для цього процесу співпадає з єдиним розв'язком системи лінійних алгебраїчних рівнянь для стаціонарних ймовірностей. Але знаходження цього розв'язку є задачею досить непростю з причини зліченного числа алгебраїчних рівнянь та

двовимірності нашого процесу. В даній статті ми скористаємося іншим підходом, який базується на конструктивному представленні стохастичного процесу $(X_1(t), X_2(t))$ через суми індикаторних випадкових величин на вхідному пуассонівському потоці, кожна з яких буде описувати процес обслуговування окремо розглянутої вимоги. У подальшому, не обмежуючи загальності, вважаємо, що в початковий момент часу вимог у вузлах мережі не було.

Нехай $\xi(t), t \geq 0$ - ланцюг Маркова з інфінітезимальною матрицею $Q = \|q_{ij}\|_{i,j=1}^3$, елементи якої мають наступний вигляд:

$$q_{ij} = \begin{cases} -\mu_i, & i = j = 1, 2 \\ \mu_i p_{ij}, & i \neq j, i = 1, 2; j = 1, 2, 3. \\ 0, & i = 3, j = 1, 2, 3. \end{cases}$$

Вочевидь, що для ланцюга Маркова $\xi(t)$ множина станів $\{1, 2\}$ є неістотною, а стан $\{3\}$ є поглинаючим.

Через $p_{ij}(t) = P\{\xi(t) = j / \xi(0) = i\}$ будемо позначати ймовірності переходів ланцюга $\xi(t)$. Легко помітити, що ланцюг Маркова $\xi(t)$ описує процес обслуговування вимоги у вузлах відкритої мережі Джексона $(M/M/\infty)^2$, при цьому потрапляння ланцюга Маркова $\xi(t)$ в стан $\{3\}$ інтерпретується як вихід вимоги з мережі.

Введемо до розгляду два сімейства незалежних двовимірних випадкових величин з наступними розподілами. Двовимірна випадкова величина $\chi_k^1(t)$ нехай приймає значення $(1, 0)$ з ймовірністю $p_{11}(t)$, значення $(0, 1)$ з ймовірністю $p_{12}(t)$ та значення $(0, 0)$ з ймовірністю $p_{13}(t)$. Випадкова величина $\chi_k^2(t)$ приймає значення $(1, 0)$ з ймовірністю $p_{21}(t)$, значення $(0, 1)$ з ймовірністю $p_{22}(t)$ та значення $(0, 0)$ з ймовірністю $p_{23}(t)$.

Тоді з ймовірністю 1 для двовимірного процесу обслуговування має місце наступне представлення у вигляді сум індикаторних випадкових величин на пуассонівському потоці вимог, які надходять зовні до нашої моделі:

$(X_1(t), X_2(t)) = \sum_{k=1}^{v(t)} \{X_k^1(t-t_k) + X_k^2(t-t_k)\}$, де $t_k, k=1, 2, \dots$ є моментами приходу вимог відповідно з потоку $v(t)$. Введемо до розгляду двовимірну генератрису величини $(X_1(t), X_2(t))$: $\varphi(z_1, z_2, t) = Mz_1^{X_1(t)} z_2^{X_2(t)}$. Використовуючи властивості умовного математичного сподівання, можемо записати: $\varphi(z_1, z_2, t) =$

$$= M \left\{ M \left\{ z_1^{X_1(t)} z_2^{X_2(t)} / t_1, \dots, t_{v(t)} \right\} \right\} =$$

$$= M \prod_{k=1}^{v(t)} A_i(z_1, z_2, t-t_k) A_2(z_1, z_2, t-t_k),$$

де $A_i(z_1, z_2, t) = p_{i3}(t) + z_1 p_{i1}(t) + z_2 p_{i2}(t)$, $i=1, 2$.

Для знаходження генератриси з останнього виразу знову скористаємося умовним математичним сподіванням, але стосовно величини $v(t)$. Тоді можемо записати:

$$\varphi(z_1, z_2, t) =$$

$$= M \left\{ M \left\{ A_1(z_1, z_2, t-t_1) A_2(z_1, z_2, t-t_1) / v(t) \right\} \right\}$$

При фіксації числа стрибків пуассонівського процесу $v(t)$ на довільному інтервалі часу $[0, t]$, моменти стрибків ведуть себе як незалежні випадкові величини, які мають рівномірний на $[0, t]$ розподіл. Скористаємось цим для підрахунку умовного математичного сподівання в останньому виразі. Тоді ми отримаємо:

$$\varphi(z_1, z_2, t) =$$

$$= M \left\{ \frac{1}{t} \int_0^t A_1(z_1, z_2, u) A_2(z_1, z_2, u) du \right\}^{v(t)}$$

В останньому виразі коефіцієнт $\frac{1}{t}$ є щільністю рівномірного на проміжку $[0, 1]$ розподілу.

Після відповідних перетворень з добутком генератрис $A_1(z_1, z_2, u)$ та $A_2(z_1, z_2, u)$ функція $\varphi(z_1, z_2, t)$ буде мати наступний вигляд:

$$\varphi(z_1, z_2, t) =$$

$$= \exp \{ -c_1(t)(1-z_1) - c_2(t)(1-z_2) -$$

$$-c_3(t)(1-z_1 z_2) - c_4(t)(1-z_1^2) - c_5(t)(1-z_2^2) \}, \text{ де}$$

$$c_1(t) = b \int_0^t (p_{13}(u) p_{21}(u) + p_{11}(u) p_{23}(u)) du;$$

$$c_2(t) = b \int_0^t (p_{13}(u) p_{22}(u) + p_{12}(u) p_{23}(u)) du;$$

$$c_3(t) = b \int_0^t (p_{11}(u) p_{22}(u) + p_{12}(u) p_{21}(u)) du;$$

$$c_4(t) = b \int_0^t p_{11}(u) p_{21}(u) du;$$

$$c_5(t) = b \int_0^t p_{12}(u) p_{22}(u) du.$$

Для знаходження границі при $t \rightarrow +\infty$ функції $\varphi(z_1, z_2, t)$ треба відповідні границі останніх інтегралів. З цією метою знайдемо явний вираз для ймовірностей переходів ланцюга Маркова $\xi(t)$.

Враховуючи структуру інфінітізімальної матриці Q , пряма система диференціальних рівнянь Колмогорова для матриці перехідних ймовірностей $P(t) = \|p_{ij}(t)\|_{i,j=1}^2$ буде мати вигляд:

$$\begin{cases} p'_{11}(t) = -\mu_1 p_{11}(t) + \mu_2 p_{21} p_{12}(t) \\ p'_{12}(t) = \mu_1 p_{12} p_{11}(t) - \mu_2 p_{12}(t) \\ p'_{21}(t) = \mu_2 p_{21} p_{22}(t) - \mu_1 p_{21}(t) \\ p'_{22}(t) = -\mu_2 p_{22}(t) + \mu_1 p_{12} p_{21}(t) \end{cases}$$

Для роз'язку цієї системи скористаємось перетворенням Лапласа функцій перехідних

ймовірностей $p_{ij}^*(s) = \int_0^{+\infty} p_{ij}(t) e^{-st} dt, i, j=1, 2$.

Неважко також помітити, що перші два і останні два рівняння записаної вище системи утворюють незалежні системи диференціальних рівнянь і можуть бути розглянуті окремо. Отже, можемо виписати систему алгебраїчних рівнянь для відповідних перетворень Лапласа:

$$\begin{cases} s p_{11}^*(s) - 1 = -\mu_1 p_{11}^*(s) + \mu_2 p_{21} p_{12}^*(s) \\ s p_{12}^*(s) = \mu_1 p_{12} p_{11}^*(s) - \mu_2 p_{12}^*(s) \end{cases}$$

З останньої системи знаходимо перетворення Лапласа функцій $p_{12}(t)$ та $p_{11}(t)$:

$$p_{12}^*(s) = \frac{\mu_1 p_{12} p_{11}^*(s)}{s + \mu_2},$$

$$p_{11}^*(s) = \frac{s + \mu_2}{s^2 + s(\mu_1 + \mu_2) + \mu_1\mu_2(1 - p_{12}p_{21})}.$$

Нескладно перекоонатися, що квадратне рівняння $s^2 + s(\mu_1 + \mu_2) + \mu_1\mu_2(1 - p_{12}p_{21}) = 0$ має два дійсних від'ємних розв'язки

$$s_{1,2} = \frac{-(\mu_1 + \mu_2) \pm \sqrt{(\mu_1 - \mu_2)^2 + 4\mu_1\mu_2 p_{12}p_{21}}}{2}.$$

Тоді функції $p_{11}^*(s)$ та $p_{12}^*(s)$ можна представити у вигляді:

$$p_{11}^*(s) = \frac{1}{s - s_2} + (s_1 + \mu_2) \frac{1}{s - s_1} \cdot \frac{1}{s - s_2},$$

$$p_{12}^*(s) = \mu_1 p_{12} \frac{1}{(s - s_1)(s - s_2)}.$$

Беручи обернене перетворення Лапласа, знаходимо явний вираз перехідних ймовірностей $p_{11}(t)$ та $p_{12}(t)$:

$$p_{11}(t) = e^{s_1 t} \frac{s_1 + \mu_2}{s_1 - s_2} - e^{s_2 t} \frac{s_2 + \mu_2}{s_1 - s_2},$$

$$p_{12}(t) = e^{s_1 t} \frac{\mu_1 p_{12}}{s_1 - s_2} - e^{s_2 t} \frac{\mu_1 p_{12}}{s_1 - s_2}.$$

Перехідну ймовірність $p_{13}(t)$ можна знайти з умови нормування:

$$p_{11}(t) + p_{12}(t) + p_{13}(t) = 1.$$

Подібним чином знаходимо перехідні ймовірності $p_{21}(t)$, $p_{22}(t)$ та $p_{23}(t)$:

$$p_{21}(t) = e^{s_1 t} \frac{\mu_2 p_{21}}{s_1 - s_2} - e^{s_2 t} \frac{\mu_2 p_{21}}{s_1 - s_2},$$

$$p_{22}(t) = e^{s_1 t} \frac{s_1 + \mu_1}{s_1 - s_2} - e^{s_2 t} \frac{s_2 + \mu_1}{s_1 - s_2},$$

$$p_{23}(t) = 1 - p_{21}(t) - p_{22}(t) =$$

$$= 1 - e^{s_1 t} \left(\frac{s_1 + \mu_1}{s_1 - s_2} + \frac{\mu_2 p_{21}}{s_1 - s_2} \right) + e^{s_2 t} \left(\frac{s_2 + \mu_1}{s_1 - s_2} + \frac{\mu_2 p_{21}}{s_1 - s_2} \right)$$

Тепер, використовуючи отримані результати, можна визначити константи граничного розподілу. Після знаходження відповідних інтегралів отримаємо явний вигляд визначених вище констант:

$$c_1 = b \left(\frac{(s_1 + \mu_2)(s_1 - \mu_1 - \mu_2 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_2}{s_1 s_2} + \right.$$

$$+ \frac{(s_2 + \mu_2)(-s_2 + \mu_1 + \mu_2 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_2 p_{21}(s_1 - \mu_2 - \mu_1 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} +$$

$$\left. + \frac{\mu_2 p_{21}(-s_2 + \mu_2 + \mu_1 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_2 p_{21}}{s_1 s_2} \right),$$

$$c_2 = b \left(\frac{(s_1 + \mu_1)(s_1 - \mu_2 - \mu_1 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_1}{s_1 s_2} + \right.$$

$$+ \frac{(s_2 + \mu_1)(-s_2 + \mu_2 + \mu_1 p_{12})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_1 p_{12}(s_1 - \mu_1 - \mu_2 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} +$$

$$\left. + \frac{\mu_1 p_{12}(-s_2 + \mu_1 + \mu_2 p_{21})}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} + \frac{\mu_1 p_{12}}{s_1 s_2} \right),$$

$$c_3 = b \left(\frac{(s_1 + \mu_2)(\mu_1 - s_1)}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} + \frac{(s_2 + \mu_2)(s_2 - \mu_1)}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)} - \right.$$

$$\left. - \frac{\mu_1 p_{12} \mu_2 p_{21}(s_1 - s_2)^2 - 2s_1 s_2}{(s_1 - s_2)^2 2s_1 s_2(s_1 + s_2)} \right).$$

$$c_4 = \frac{(s_1 + \mu_2) \mu_2 p_{21}}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} - \frac{(s_2 + \mu_2) \mu_2 p_{21}}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)}$$

$$c_5 = \frac{(s_1 + \mu_1) \mu_1 p_{12}}{(s_1 - s_2) 2s_1(s_1 + s_2)} - \frac{(s_2 + \mu_1) \mu_1 p_{12}}{(s_1 - s_2) 2s_2(s_1 + s_2)}$$

Теорема доведена. Зробимо ряд висновків.

Перш за все слід відзначити, що якщо вхідний двовимірний потік до нашої моделі мав дві залежних одновимірні пуассонівські компоненти, з параметром b , то структура двовимірного процесу обслуговування налічує вже п'ять незалежних компонент. Це означає, що в стаціонарному режимі одновимірний розподіл процесу обслуговування має наступну будову: $X_1 = x_1 + x_3 + 2x_4$, $X_2 = x_2 + x_3 + 2x_5$, де $x_i, i = 1, 5$ незалежні випадкові величини, розподілені за законами Пуассона з параметрами: c_1 для x_1 , c_2 для x_2 , c_3 для x_3 , c_4 для x_4 та c_5 для x_5 . Таким чином, в структурі процесу обслуговування з'являється чотири додаткові незалежні компоненти x_1 , x_2 , x_4 та x_5 . З цього можна зробити висновок, що наша модель в процесі свого функціонування послаблює залежність між компонентами потоків вимог.

Список використаних джерел

1. Griffiths R.S., Milne R.K. A class of bivariate Poisson process, jom." Multivar. Anal." Issue 8, №3, 1978, p.380-396.
2. Анисимов В.В., Лебедев Е.А. Стохастические сети обслуживания, Лыбидь, (1992).

Надійшла до редакції 01.10.2009

УДК 517.97

Є. М. Рисай, асп.
В. В. Семенов, к.ф.-м.н., доц.*

F^* -розширення некоерцитивних екстремальних задач

Для некоерцитивних задач мінімізації в сепарабельних банахових просторах запропоновано і досліджено узагальнену постановку.

Ключові слова: банахів простір, узагальнений розв'язок, нормальний розв'язок, екстремальна задача, некоерцитивний функціонал.

*e-mail: snakkar@univ.kiev.ua

Представив: д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

В роботах [1, 2] для задачі мінімізації неперервного опуклого функціоналу на замкненій опуклій та обмеженій підмножині сепарабельного банахова простору було запропоновано природну узагальнену постановку – F^* -розширення задачі.

Метою даної статті є дослідження можливості побудови аналогічної постановки для задач мінімізації некоерцитивних функціоналів.

Нехай $(E, \|\cdot\|_E)$ – сепарабельний банахів простір, $f: E \rightarrow \mathbb{R}$ – неперервний опуклий функціонал, X – опукла підмножина простору E . Розглянемо задачу

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X}. \quad (1)$$

Використовуючи результати робіт [1, 2], будемо узагальнену постановку задачі (1). А саме: оберемо лінійний підпростір характеристики одиниця $F \subseteq E^*$ такий, що:

- 1) F – сепарабельний підпростір простору E^* ;
- 2) якщо $x_n \rightarrow x$ в топології $\sigma(E, F)$, то

$$f(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} f(x_n);$$

- 3) X – секвенційно $\sigma(E, F)$ -замкнена множина.

Далі розглянемо $\tilde{f}: F^* \rightarrow \mathbb{R}$ – опукле та секвенційно $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперерване знизу продовження f на F^* , побудоване за формулою

$$\tilde{f}(\bar{x}) = \inf \left\{ \liminf_{n \rightarrow \infty} f(x_n) : x_n \in E, jx_n \rightarrow \bar{x} \right\}$$

E. M. Rysai, PhD stud.
V. V. Semenov, PhD, assoc. prof.

F^* -extension of noncoercive extremal problems

Generalized statement for noncoercive minimization problems in separable Banach spaces is offered and investigated.

Key Words: Banach space, generalized solution, normal solution, extremal problem, noncoercive functional.

в топології $\sigma(F^*, F)$, (x_n) обмежена}, та $\tilde{X} \subseteq F^*$ – секвенційне замикання множини $j(X)$ в топології $\sigma(F^*, F)$. Тут j – оператор канонічного вкладення простору E в F^* [1, 2].

Узагальненою постановкою задачі (1) є екстремальна задача

$$\tilde{f}(\bar{x}) \rightarrow \inf_{\bar{x} \in \tilde{X}}. \quad (2)$$

Нагадаємо класичне означення.

Означення 1. Функціонал $f: E \rightarrow \mathbb{R}$ називаємо коерцитивним, якщо

$$f(x) \rightarrow +\infty \text{ при } \|x\|_E \rightarrow +\infty \quad (3)$$

або рівносильно $\forall \alpha > \inf_E f$ лебегова множина

$$\{f \leq \alpha\} = \{x \in E : f(x) \leq \alpha\}$$

обмежена.

Якщо функціонал f коерцитивний, то очевидно, що

$$\arg \inf_{\tilde{X}} \tilde{f} \neq \emptyset,$$

тобто множина узагальнених розв'язків задачі (1) непорожня. Дійсно, тоді для f існує обмежена мінімізуюча послідовність $x_n \in X$. Можна вважати, що

$$jx_n \rightarrow \bar{x} \text{ в топології } \sigma(F^*, F).$$

З секвенційної $\sigma(F^*, F)$ -замкненості множини $\tilde{X}$, випливає, що $\bar{x} \in \tilde{X}$.

А з $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервності знизу $\tilde{f}$ випливає, що

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\bar{x}) &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{f}(jx_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = \\ &= \inf_X f = \inf_{\bar{X}} \tilde{f},\end{aligned}$$

тобто,

$$\bar{x} \in \arg \inf_{\bar{X}} \tilde{f}.$$

Існує багато важливих задач мінімізації, в яких цільові функціонали не задовольняють умову (3). Наприклад, задачі вигляду

$$f(x) = g(Ax) \rightarrow \inf_{x \in E},$$

де $g: Y \rightarrow \mathbb{R}$ – коерцитивний опуклий неперервний функціонал, заданий на банаховому просторі $(Y, \|\cdot\|_Y)$, $A: E \rightarrow Y$ – лінійний неперервний оператор з нетривіальним ядром $N(A) \neq \{0\}$.

З'ясуємо, за яких умов можна гарантувати існування узагальнених розв'язків задачі (1) з некоерцитивним функціоналом f .

З задачею мінімізації (2) пов'яжемо послідовність задач

$$\tilde{f}(\bar{x}) \rightarrow \inf_{\bar{x} \in \bar{X} \cap B_n(F^*)}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (4)$$

Ясно, що кожна задача (4) має непорожню множину розв'язків. Оберемо з $\arg \inf_{\bar{X} \cap B_n(F^*)} \tilde{f}$ деякий елемент $\bar{x}_n$. Якщо побудована послідовність $(\bar{x}_n)$ обмежена, то вона має граничні точки відносно топології $\sigma(F^*, F)$, на яких функціонал $\tilde{f}$ досягає свого мінімуму на множині $\bar{X} \subseteq F^*$.

Висновок: слід знайти достатні умови, за яких можлива побудова обмеженої в просторі F^* послідовності $(\bar{x}_n)$, $\bar{x}_n \in \arg \inf_{\bar{X} \cap B_n(F^*)} \tilde{f}$.

Природно обирати точки $\bar{x}_n \in \arg \inf_{B_n(F^*)} \tilde{f}$ з умови мінімальності норми:

$$\|\bar{x}_n\|_{F^*} = \min \left\{ \|\bar{x}\|_{F^*} : \bar{x} \in \arg \inf_{\bar{X} \cap B_n(F^*)} \tilde{f} \right\}.$$

Тобто, елементи послідовності $(\bar{x}_n)$ суть нормальні розв'язки екстремальних задач (4) [3].

В попередніх міркуваннях ми ніде не використовували опуклості f , тому все справедливо для неопуклих функціоналів $f: E \rightarrow \mathbb{R}$, які є секвенційно $\sigma(E, F)$ -напівнеперервними знизу для заданого сепарабельного лінійного підпростору $F \subseteq E^*$ характеристики одиниця.

Оскільки принциповими для нас є лише факти $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервності знизу $\tilde{f}$ на F^* і $\sigma(F^*, F)$ -замкненості множини $\bar{X} \subseteq F^*$, то замість задачі (1) та її узагальненої постановки (2) для спрощення нотацій розглянемо задачу, поставлену у спряженому просторі F^* до деякого нескінченновимірного банахова простору F . Точніше, будемо вивчати задачу вигляду

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X}, \quad (5)$$

де X – замкнена в топології $\sigma(F^*, F)$ підмножина простору F^* , $f: F^* \rightarrow \mathbb{R}$ – напівнеперервний знизу в топології $\sigma(F^*, F)$ функціонал. Подальші результати будемо формулювати саме для задачі (5).

Має місце наступна теорема.

Теорема 1. Нехай $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервний знизу функціонал $f: F^* \rightarrow \mathbb{R}$ та $\sigma(F^*, F)$ -замкнена множина $X \subseteq F^*$ задовольняють умови:

1) якщо для послідовності (x_n) , $x_n \in X$

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty,$$

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} f(x_n) < +\infty,$$

$$\text{то } \|y_n - y\|_{F^*} \rightarrow 0;$$

2) якщо для $y \in F^*$ існує така послідовність (x_n) , $x_n \in X$, що

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty,$$

$$\frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x_n)}{\|x_n\|_{F^*}} \leq 0,$$

то існує таке $\alpha > 0$, що

$$x_n - \alpha y \in X, \quad f(x_n) \geq f(x_n - \alpha y) \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Тоді задача мінімізації

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X}$$

має непо-рожню множину розв'язків.

Доведення. Розглянемо послідовність задач

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X \cap B_n(F^*)}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Множина $\operatorname{arginf}_{X \cap B_n(F^*)} f$ непорожня та компактна в топології $\sigma(F^*, F)$.

Нехай (x_n) – послідовність розв'язків з мінімальною нормою:

$$\|x_n\|_{F^*} = \min \left\{ \|x\|_{F^*} : x \in \operatorname{arginf}_{X \cap B_n(F^*)} f \right\}.$$

Якщо послідовність (x_n) обмежена, то можна вважати, що

$$x_n \rightarrow x' \text{ в топології } \sigma(F^*, F).$$

Крім того, з секвенціальної $\sigma(F^*, F)$ -замкненості множини X випливає, що $x' \in X$. Беремо довільний елемент $x \in X$. Тоді

$$\exists n_0 \in \mathbb{N} \quad \forall n \geq n_0 \quad x \in X \cap B_n(F^*).$$

Отже,

$$f(x_n) \leq f(x) \quad \forall n \geq n_0.$$

Звідси, маємо

$$f(x') \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} f(x_n) \leq f(x) \quad \forall x \in X.$$

Таким чином, $x' \in \operatorname{arginf}_X f \neq \emptyset$.

Покажемо, що послідовність (x_n) не може бути необмеженою. Міркуємо від супротивного. Припустимо, що

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty.$$

Тоді ми можемо вважати (у разі необхідності перейшовши до підпослідовності), що

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F).$$

Оскільки при $n < m$ маємо, що

$$f(x_n) \leq f(x_m),$$

то

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} f(x_n) < +\infty.$$

Отже, за умовою 1), маємо

$$\|y_n - y\|_{F^*} \rightarrow 0.$$

Крім того, має місце нерівність

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x_n)}{\|x_n\|_{F^*}} \leq 0.$$

Отже, за умовою 2), існує таке число $\alpha > 0$ що

$$x_n - \alpha y \in X, \quad f(x_n) \geq f(x_n - \alpha y) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (6)$$

Має місце нерівність

$$\|x_n - \alpha y\|_{F^*} = \left\| \left(1 - \frac{\alpha}{\|x_n\|_{F^*}} \right) x_n + \frac{\alpha x_n}{\|x_n\|_{F^*}} - \alpha y \right\|_{F^*} \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq \left(1 - \frac{\alpha}{\|x_n\|_{F^*}} \right) \|x_n\|_{F^*} + \alpha \|y_n - y\|_{F^*} = \\ &= \|x_n\|_{F^*} + \alpha \{ \|y_n - y\|_{F^*} - 1 \}. \end{aligned} \quad (7)$$

З сильної збіжності послідовності (y_n) до точки y випливає, що, починаючи з деякого номера, вираз у фігурних дужках у правій частині нерівності (7) є від'ємним. Таким чином,

$$\exists n_0 \in \mathbb{N} : \|x_n - \alpha y\|_{F^*} < \|x_n\|_{F^*} \quad \forall n \geq n_0. \quad (8)$$

Але (6) і (8) суперечить тому, що $x_n \in F^*$ розв'язок з мінімальною нормою екстремальної задачі

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X \cap B_n(F^*)}, \quad n \geq n_0.$$

Отримане протиріччя і доводить теорему. ■

Зауваження 1. Теорема 1 близька до результатів, що опубліковані в [4, 5, 6]. В [4] досліджувались некоерцитивні задачі в рефлексивних банахових просторах, в [5] – скінченновимірні опуклі задачі, в роботі [6] увага приділена опуклим задачам в рефлексивних банахових просторах. Умова 1) співпадає з умовою компактності (compactness condition) робіт [4, 6], а умова 2) відмінна від умов сумісності (compatibility condition) цитованих робіт.

Розглянемо клас екстремальних задач вигляду

$$f(x) = \|Ax\|_G^2 + g(x) \rightarrow \inf_{x \in F^*},$$

де A – лінійний неперервний оператор, що діє з F^* в простір Банаха $(G, \|\cdot\|_G)$, а $g : F^* \rightarrow \mathbb{R}$ – опуклий та $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервний знизу функціонал.

Лема 1. Нехай лінійний неперервний оператор $A \in L(F^*, G)$ та функціонал $g : F^* \rightarrow \mathbb{R}$ задовольняють умови:

- 1) $\dim N(A) < +\infty$;
- 2) $F^* = N(A) \oplus Y$, де Y замкнений лінійний підпростір F^* і оператор A коерцитивний на Y , тобто $\exists c > 0$:

$$c\|x\|_{F^*} \leq \|Ax\|_G \quad \forall x \in Y;$$

- 3) функціонал g – $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервний знизу та опуклий.

Тоді $F^* \ni x \mapsto f(x) = \|Ax\|_G^2 + g(x)$ задовольняє умову 1) теореми 1 з $X = F^*$.

Доведення. Розглянемо довільну послідовність (x_n) ($x_n \in F^*$) таку, що

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty,$$

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} f(x_n) < +\infty.$$

З опуклості та $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервності знизу функціонала g випливає існування $z \in F$, $d \in \mathbb{R}$ таких, що

$$g(x) \geq \langle x, z \rangle_{F^*, F} + d \quad \forall x \in F^*.$$

Маємо

$$\begin{aligned} 0 &\geq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x_n)}{\|x_n\|_{F^*}^2} = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\|x_n\|_{F^*}^2} \{ \|Ax_n\|_G^2 + g(x_n) \} \geq \\ &\geq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \left\| \frac{Ax_n}{\|x_n\|_{F^*}} \right\|_G^2 + \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{g(x_n)}{\|x_n\|_{F^*}^2} \geq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \|Ay_n\|_G^2 + \\ &+ \underbrace{\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle x_n, z \rangle_{F^*, F} + d}{\|x_n\|_{F^*}^2}}_{=0} = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \|Ay_n\|_G^2 \geq \\ &\geq \underline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \|Ay_n\|_G^2 \geq \|Ay\|_G^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Отже $\lim_{n \rightarrow \infty} \|Ay_n\|_G^2 = 0$ та $y \in N(A)$.

З умови 2) випливає, що

$$x_n = x'_n + x''_n, \quad x'_n \in N(A), \quad x''_n \in Y,$$

та

$$\begin{aligned} \|Ay_n\|_G^2 &= \left\| \frac{Ax_n}{\|x_n\|_{F^*}} \right\|_G^2 = \frac{\|Ax''_n\|_G^2}{\|x_n\|_{F^*}^2} \geq \\ &\geq c^2 \frac{\|x''_n\|_{F^*}^2}{\|x_n\|_{F^*}^2} = c^2 \left\| \frac{x''_n}{\|x_n\|_{F^*}} \right\|_{F^*}^2. \end{aligned}$$

З останньої нерівності робимо висновок, що

$$\frac{x''_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow 0 \text{ сильно в } F^*.$$

Оскільки $y_n = \frac{x'_n}{\|x_n\|_{F^*}} + \frac{x''_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y$ в топології

$\sigma(F^*, F)$, то $\frac{x'_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y$ в топології $\sigma(F^*, F)$.

Але ядро $N(A)$ оператора A скінченновимірне.

Через це маємо, що

$$\frac{x'_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ сильно в } F^*.$$

Звідки отримуємо $\|y_n - y\|_{F^*} \rightarrow 0$. ■

Теорема 2. Нехай лінійний неперервний оператор $A \in L(F^*, G)$ та функціонал $g : F^* \rightarrow \mathbb{R}$ задовольняють умови леми 1 та $\forall y \in N(A)$ $\exists \alpha > 0$:

$$g(x) \geq g(x - \alpha y) \quad \forall x \in F^*. \quad (9)$$

Тоді задача мінімізації

$$f(x) = \|Ax\|_G^2 + g(x) \rightarrow \inf_{x \in F^*}$$

має непорожню множину розв'язків.

Зауваження 2. Якщо $g : F^* \rightarrow \mathbb{R}$ – лінійний неперервний в топології $\sigma(F^*, F)$ функціонал, то умова (9) рівносильна наступному включенню

$$N(A) \subseteq \{y \in F^* : g(y) = 0\}.$$

Доведення теореми 2 подібне до міркувань з доведення теореми 1.

Зауваження 3. Твердження леми 1 та теореми 2 залишаються справедливими для функціоналів вигляду

$$F^* \ni x \mapsto \|Ax\|_G^p + g(x),$$

де $p \in (1, +\infty)$.

Узагальнимо теорему 1 на ширший клас функціоналів. Для цього послабимо умову 1) за максимального збереження умови 2) згаданої теореми.

Твердження 1. Якщо $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервний знизу функціонал $f : F^* \rightarrow \mathbb{R}$ задовольняє умову 1) теореми 1 з $X = F^*$, тоді він матиме наступну властивість:

якщо для послідовності точок (x_n)

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty,$$

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\|x_n\|_{F^*} \leq \|x_n - y\|_{F^*} \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

то $\exists x \in F^*$:

$$f(x) < \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n).$$

Зауваження 4. Якщо F^* – простір зі скалярним добутком, то в умові твердження 1 елемент y може бути лише нулем. Дійсно, з

$$\|x_n\|_{F^*} \leq \|x_n - y\|_{F^*}$$

впливає нерівність

$$(x_n, y)_{F^*} \leq \frac{1}{2} \|y\|_{F^*}^2.$$

Звідки

$$(y_n, y)_{F^*} \leq \frac{\|y\|_{F^*}^2}{2 \|x_n\|_{F^*}}.$$

Перейшовши при $n \rightarrow \infty$ до границі в останній нерівності, приходимо до $\|y\|_{F^*}^2 = 0$.

Доведення твердження 1. Нехай функціонал f задовольняє умову 1) теореми 1. Візьмемо довільну послідовність (x_n) , що має наступні властивості:

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty$$

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\|x_n\|_{F^*} \leq \|x_n - y\|_{F^*} \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Покажемо, що $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = +\infty$. Цим і доведемо твердження.

Міркуємо від супротивного. Припустимо, що $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n) < +\infty$. Тоді

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} f(x_n) < +\infty.$$

Звідси $\|y_n - y\|_{F^*} \rightarrow 0$. Але тоді матимемо

$$\|x_n - y\|_{F^*} < \|x_n\|_{F^*} \quad \forall n \geq n_0,$$

що суперечить вибору послідовності (x_n) . Дійсно, має місце нерівність

$$\begin{aligned} \|x_n - y\|_{F^*} &= \left\| \left(1 - \frac{1}{\|x_n\|_{F^*}}\right) x_n + \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} - y \right\|_{F^*} \leq \\ &\leq \left(1 - \frac{1}{\|x_n\|_{F^*}}\right) \|x_n\|_{F^*} + \|y_n - y\|_{F^*} = \\ &= \|x_n\|_{F^*} + \{\|y_n - y\|_{F^*} - 1\}. \end{aligned}$$

З сильної збіжності y_n до y випливає, що, починаючи з деякого номера, вираз у фігурних дужках у правій частині нерівності є від'ємним. ■

Зауважимо, що властивість 1) з теореми 1 строго сильніша за властивість з твердження 1. Побудуємо відповідний приклад.

Візьмемо неперервну зростаючу та обмежену функцію $[0, +\infty) \xrightarrow{\Phi} [0, A)$, $A > 0$, $\Phi(0) = 0$, $\lim_{t \rightarrow +\infty} \Phi(t) = A$ (наприклад, $\Phi(t) = \arctg t$, $t \geq 0$). Покладемо

$$f(x) = \Phi(\|x\|_{F^*}), \quad x \in F^*.$$

Побудований функціонал $f \in \sigma(F^*, F)$ -напівнеперервним знизу. Дійсно, якщо $x_n \rightarrow x$ в топології $\sigma(F^*, F)$, то з неперервності і монотонності Φ випливає

$$\begin{aligned} f(x) &= \Phi(\|x\|_{F^*}) \leq \Phi\left(\lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n\|_{F^*}\right) = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(\|x_n\|_{F^*}) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n). \end{aligned}$$

Покажемо, що функціонал f не має властивості 1) з теореми 1. Оберемо послідовність точок $y_n \in S_1(F^*)$ таку, що не містить сильно збіжних підпослідовностей. Покладемо

$$x_n = n \cdot y_n.$$

Тоді $\|x_n\|_{F^*} = n \rightarrow +\infty$. Можна вважати, що

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \in B_1(F^*) \text{ в топології } \sigma(F^*, F)$$

(цього завжди можна досягти, перейшовши до деякої підпослідовності). Ясно, що

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} f(x_n) < +\infty.$$

Але (y_n) не збігається сильно до y .

Тепер візьмемо послідовність $x_n \in F^*$ таку, що $\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty$. Тоді

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = A > 0 = f(0).$$

Отже, функціонал f має властивість з твердження 1.

Має місце наступна теорема.

Теорема 3. Нехай $\sigma(F^*, F)$ -напівнеперервний знизу функціонал $f: F^* \rightarrow \mathbb{R}$ та $\sigma(F^*, F)$ -замкнена множина $X \subseteq F^*$ задовольняють умови:

1) якщо для послідовності (x_n) , $x_n \in X$

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty,$$

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\|x_n\|_{F^*} \leq \|x_n - y\|_{F^*} \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

то $\exists x \in X: f(x) < \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n)$;

2) якщо для $y \in F^*$ існує така послідовність (x_n) , $x_n \in X$, що

$$\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty,$$

$$\frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F),$$

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x_n)}{\|x_n\|_{F^*}} \leq 0,$$

то

$$x_n - y \in X, \quad f(x_n) \geq f(x_n - y) \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Тоді задача мінімізації

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X}$$

має непорожню множину розв'язків.

Доведення. Розглянемо послідовність екстремальних задач

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X \cap B_n(F^*)}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Нехай (x_n) – послідовність її нормальних розв'язків. Якщо послідовність (x_n) обмежена, то можна вважати, що

$$x_n \rightarrow x' \text{ в топології } \sigma(F^*, F).$$

З секвенціальної $\sigma(F^*, F)$ -замкненості множини X випливає, що $x' \in X$.

Беремо довільний елемент $x \in X$. Тоді

$$\exists n_0 \in \mathbb{N} \quad \forall n \geq n_0 \quad x \in X \cap B_n(F^*).$$

Отже,

$$f(x_n) \leq f(x) \quad \forall n \geq n_0.$$

Звідси маємо

$$f(x') \leq \lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) \leq f(x) \quad \forall x \in X.$$

Таким чином, $x' \in \arg \inf_X f \neq \emptyset$.

Покажемо тепер, що послідовність (x_n) не може бути необмеженою. Від супротивного. Припустимо, що $\|x_n\|_{F^*} \rightarrow +\infty$. Тоді можна вважати, що

$$y_n = \frac{x_n}{\|x_n\|_{F^*}} \rightarrow y \text{ в топології } \sigma(F^*, F).$$

Оскільки при $n < m$ маємо, що

$$f(x_m) \leq f(x_n)$$

(бо $X \cap B_n(F^*) \subseteq X \cap B_m(F^*)$), то

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x_n)}{\|x_n\|_{F^*}} \leq 0.$$

Отже, за умовою 2), маємо

$$x_n - y \in X, \quad f(x_n) \geq f(x_n - y) \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (10)$$

Нехай існує таке $n \in \mathbb{N}$, що

$$\|x_n\|_{F^*} > \|x_n - y\|_{F^*}. \quad (11)$$

Але (10) і (11) суперечить тому, що $x_n \in X$ – нормальний розв'язок задачі

$$f(x) \rightarrow \inf_{x \in X \cap B_n(F^*)}.$$

Отже, маємо

$$\|x_n\|_{F^*} \leq \|x_n - y\|_{F^*} \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

З умови 1) теореми випливає існування такого $x \in X$, що

$$f(x) < \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n).$$

Але для всіх достатньо великих $n \in \mathbb{N}$

$$x \in X \cap B_n(F^*)$$

і, відповідно,

$$f(x_n) \leq f(x).$$

Звідки

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} f(x_n) \leq f(x).$$

Отримане протиріччя і доводить теорему. ■

Список використаних джерел

1. Семенов В. В. Узагальнені екстремальні елементи опуклих функціоналів // Вісник Київського університету. С.: фіз.-мат. науки, вип. 3. – 2007 – С. 189-193.
2. Ляшко С. И., Номировский Д. А., Петунин Ю. И., Семенов В. В. Двадцатая проблема Гильберта. Обобщенные решения операторных уравнений. – М.: ООО «И.Д. Вильямс», 2009. – С. 192.
3. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. – Москва: Наука, 1979. – 288 с.
4. Auslender A. Noncoercive optimization problems // Mathematics of Operations Research, Vol. 21, 1996, No. 4, pp. 769-782.
5. Auslender A. Existence of optimal solutions and duality results under weak conditions // Math. Program., Ser. A 88, 2000, pp. 45-59.
6. S. Adly, D. Goeleven, M. Thera Recession mappings and noncoercive variational inequalities // Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications, Vol. 26, No. 9, pp. 1573-1603, 1996.

Надійшла до редколегії 4.09.09

УДК 531.37

Рубльов Б.В., д.ф.-м. н., проф.,
Шкуліна О.В., аспірант
Шейман Б.С., завідувач відділення токсикології
УДСЛ "ОХМАТДИТ"
Колесник Л.О., студент

Застосування t-критерію Стьюдента в кластеризації точок у багатовимірному просторі.

В статті розглядається математична модель розпізнавання етіологічних факторів токсикозу у людини з використанням t-критерію Стьюдента.

Ключові слова: t-критерій Стьюдента, кореляціїз, ендотоксикоз, токсикометрія

B.V. Rublyov, D.Sci.(Phys.-Math.), professor
O.V. Shkulipa, a PhD student
B. S. Sheyman, chief of toxicology department
"OHMATDUT"
L.O Koiesnik, student

Student's t-test for data clustering in multidimensional space

In this paper mathematical model of people's etiological factor recognition using Student's t-test is described.

Key Words: Student's t-test, correlation, endotoxycosis, toxicometry

*E-mail: b_v@mail.univ.kiev.ua, elena.andruschak@gmail.com, toxicon@ukr.net

Статтю представив чл.-кор. НАНУ, д.ф.-м. н., проф. Ляшко С.І.

Відомо, що перебіг більшості з відомих на сучасному етапі захворювань супроводжується розвитком токсемії (накопичення у кров'яному руслі речовин – токсинів - ендо- або екзогенного походження, характерною ознакою яких є наявність в них пошкоджуючої активності у відношенні до біологічних мішеней організму). Токсемія обумовлює формування процесу токсикозу, клінічною маніфестацією якого є інтоксикаційний синдром. Про негативний вплив токсикозу на перебіг та вихід захворювання в медичній літературі існує багато повідомлень. Саме тому, лікувальні заходи, що скеровані на протидію пошкоджуючій активності токсинів, увійшли в різні лікувальні протоколи багатьох хвороб, та отримали назву "детоксикаційної терапії", а розробка нових ефективних технологій детоксикації (знешкодження токсинів) є актуальним завданням сучасної медицини.

Досягнення науки за останнє десятиріччя в області токсикогеноміки, імуногенетики та протеоміки, дозволяють розглянути алгоритм формування і реалізації токсикозу, як послідовне виникнення ряду взаємозалежних процесів від етапу проникнення етіологічного чинника (безпосередня причина захворювання) в організм людини, експресії генів (токсикогеноміка) з синтезом та накопиченням біологічно активних речовин у кров'яному руслі (транскриптоміка), зміни у білках крові з утворенням токсичних протеомів (токсинів) аж до пошкодження біологічної мішені організму, порушення функціонального стану органу або системи у вигляді метаболічних змін.

Широкому медичному загалу добре відомі етіологічні чинники, які існують в оточуючому людину середовищі, та, за певних умов, можуть виступати в ролі збудників різних захворювань. Серед них бактерії, віруси, паразити, хімічні речовини, тощо. Саме вони являються причиною виникнення змін у генах людини, що в наступному реалізується у вигляді захворювання (пошкодження органів та систем) з накопиченням у кров'яному руслі токсичних протеомів (токсинів), виникненням токсикозу.

Ми зробили гіпотетичне припущення про те, що існування взаємозв'язків між етіологічним чинником захворювання, експресією генів, токсичними протеомами крові (токсинами) та метаболічними змінами в ушкоджених органах та системах повинно віддзеркалюватися на характеристиках токсинів зокрема на їх пошкоджуючій активності, розмірах часток і молекул, місцях їх переважного накопичення у кров'яному руслі (альбумінах, глобулінах, клітинних мембранах або у вільній циркуляції). Виходячі з зазначеного вище, ми припустили, що характеристики токсинів повинні мати специфічні відмінності, притаманні для кожного з етіологічних чинників, який викликав їх утворення. А визначення специфічних властивостей токсичних протеомів повинно привести до підвищення діагностики з верифікації етіологічного фактору захворювання і оперативного призначення методів етіотропної терапії для лікування пацієнта. Саме визначенню специфічних відмінностей у параметрах токсемії, що виникає в пацієнтів та їх значущості у

встановленні етіологічної причини захворювання й була присвячена наукова робота.

Для вирішення поставленої задачі було зроблено наступне:

1. Проведено комплексне токсикометричне дослідження параметрів токсемії у пацієнтів з різними етіологічними чинниками захворювання (верифікація етіологічного чинника відбувалась з використанням традиційних методів дослідження в медицині) [3].

2. Отримані результати токсикометричних досліджень були систематизовані в групи в залежності від виду етіологічного чинника: аномалії нирок, бактеріальний, вірусно-паразитарний, аутоалергічний, екзогенні отрути, травматична деструкція тканин та ін.

3. Систематизовані у групи токсикометричні параметри були усереднені та визначені рівні відхилень ($M \pm m$) кожного з токсикометричних параметрів.

4. Побудована бібліотека з токсикометричними характеристиками токсемії, що супроводжує перебіг захворювань, що обумовлені різними етіологічними чинниками [4].

Математична постановка задачі:

Для заданого хворого $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, де n – кількість показників визначити етіологічний фактор, який є причиною виникнення хвороби у пацієнта.

Побудована система складається з двох послідовних етапів: формування бібліотек та власне визначення етіологічного чинника захворювання. Розглянемо послідовно кожен з етапів.

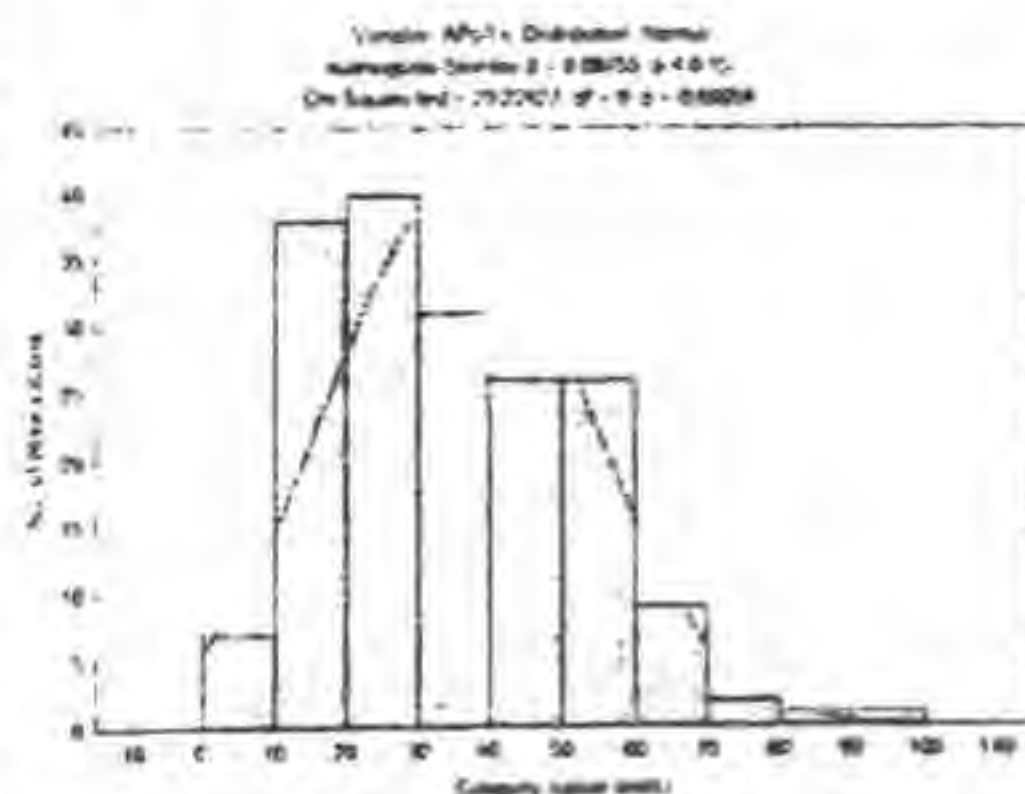
Побудова бібліотек:

Побудова бібліотеки є першим і головним етапом алгоритму. Принциповим моментом є визначення «значимих» параметрів, за якими ми будемо в подальшому відрізняти одну етіологію від іншої. Для побудови бібліотек було використано токсикометричні параметри 811 хворих в яких клініко-лабораторними методами встановлено етіологічний фактор. Тобто задана множина $X = (x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{nk})$, де k – це номер етіологічного чинника, до якого належить хвороба у пацієнта; n – кількість

токсикометричних параметрів; та i_k – i -тий хворий що належить k -тій етіології.

Першим кроком алгоритму є визначення токсикометричних параметрів, що мають найбільший вплив на етіологічний фактор. Саме для цього використовується кореляційний аналіз, а точніше кореляція Пірсона. Обраховується попарна кореляція для визначення залежності між етіологією та токсикометричними параметрами. Для подальшого аналізу використовуються лише ті фактори які корелюють.

Для застосування наступного кроку потрібно перевірити, що данні розподілені нормально. Перевірка проводиться за допомогою критерію Колмогорова [1]. Наведемо приклад перевірки вибірки на нормальність на прикладі «Аутоалергічної» етіології, токсикометричного параметру «АРУЛ-к» (аутологічне розеткоутворення клітинних мембран):



Перевірка проводиться по всіх токсикометричних параметрах, що корелюють окремо для кожного з видів етіологічних факторів. Всі токсикометричні параметри, що не задовольняють нормальному розподілу не враховуються в подальшому обчисленні.

Наступним кроком побудови бібліотеки є обчислення для кожного етіологічного фактору його математичного сподівання за кожним з токсикометричних показників, тобто для кожного етіологічного фактору ми отримуємо множину:

$$m_k = (m_{1k}, m_{2k}, \dots, m_{nk}), \text{ де } k - \text{номер етіології.}$$

Також обраховується стандартне відхилення:

$$\sigma_k = (\sigma_{1k}, \sigma_{2k}, \dots, \sigma_{nk}), \text{ де } k - \text{номер етіології.}$$

Розглянемо на прикладі побудову бібліотеки. В табл. 1 наведено результати для двох етіологічних факторів: «Ауто-алергічного» та «Аномалії нирок»:

Таблиця 1

Математичне сподівання та стандартне відхилення

	АРУЛ-к	АРУЛ-п	АРУЛ-а	АРУЛк-СВ	АРУЛа-СВ	АРУЛс-МВ	ЦАЛг	ЦАЛа-МВ	ЦАЛс-МВ
m_1	35,4	49,4	50,8	34,3	15,9	40,1	32,3	49,6	35,5
σ_1	1,3	1,2	1,2	1,2	1,0	1,0	0,9	0,9	0,9
m_2	38,5	53,0	54,3	43,5	12,4	45,5	47,5	54,3	45,1
σ_2	1,5	1,3	1,4	1,7	1,0	1,4	1,2	1,0	1,1

Примітка:

- 1) АРУЛ-к - (аутологічне розеткоутворення токсинів, що асоційовані з клітинними мембранами);
- 2) АРУЛ-а - (аутологічне розеткоутворення альбумін-асоційованих токсинів);
- 3) АРУЛк-СВ - (аутологічне розеткоутворення токсинів з частками розміром 10-200 нм, що асоційовані з клітинними мембранами);
- 4) АРУЛа-СВ - (аутологічне розеткоутворення токсинів з частками розміром 10-200 нм, що асоційовані з альбумінами);
- 5) АРУЛс-МВ - (аутологічне розеткоутворення вільно циркулюючих токсинів з молекулами розміром <10 нм);
- 6) ЦАЛг - цитолітична активність глобулін-асоційованих токсинів;
- 7) ЦАЛа-МВ - (цитолітична активність альбумінів-асоційованих токсинів з молекулами розміром <10 нм);
- 8) ЦАЛс-МВ - (цитолітична активність вільно циркулюючих токсинів з молекулами розміром <10 нм).

Далі проходить попарне порівняння кожного з етіологічних факторів за допомогою t-критерію

Стьюдента, тобто виникає завдання знайти фактори за якими можна відрізнити етіології:

$$t_{im} = \frac{|m_i - m_m|}{\sqrt{\frac{\sigma_i^2}{N_i} + \frac{\sigma_m^2}{N_m}}}$$

Де m_i , m_m - математичні сподівання по i-тому фактору; σ_i^2 та σ_m^2 - стандартні відхилення по i-тому фактору; N_i та N_m - кількість хворих в i та m етіологіях відповідно. Тобто висуваються дві гіпотези:

H_0 - головна, нульова гіпотеза, в якій висувається припущення, що етіології не можливо відрізнити по i-тому фактору.

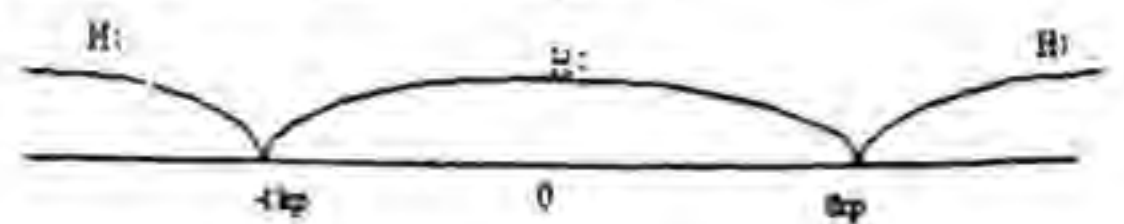
H_1 - альтернативна гіпотеза до H_0 - що обидві вибірки відрізняються по i-тому фактору.

Прийняття однієї з статистичних гіпотез та формулювання остаточного висновку здійснюють шляхом порівняння обчисленого значення критерію Стьюдента (див. формулу (1)) з його критичним значенням ($t_{кр}$).

Нульову гіпотезу відкидають за умови:

$$|t_{im}| > t_{кр}$$

Гіпотезу H_1 приймають, якщо $|t_{im}| > t_{кр}$, більш детально зображено на рис. 1



В медицині рівень значущості прийнятий рівним 5%. Відповідно за таблицею визначено критичне значення $t_{кр} = 2$

За допомогою першого кроку знаходяться i-ті показники за якими етіологічні фактори відрізняються, тобто визначаються значущі фактори за якими в подальшому невідомий хворий порівнюватиметься з бібліотекою. Кількість факторів, що відповідає за розрізнення однієї етіології підраховується та складає еталонне значення. В подальшому процент розпізнавання конкретної етіології буде розраховуватися відштовхуючись від еталонного. Тобто підраховується кількість факторів, за якими можна відрізнити одну етіологію від іншої, і на наступному кроці порівнюються з отриманими факторами по яких було отримано приналежність конкретного хворого до тієї чи іншої етіології, що і буде складати процент розпізнавання хворого в порівнянні з еталонним значенням.

Повернемося до прикладу з "Ауто алергічною" етіологією токсемії та "Аномалії нирок".

За допомогою t-критерію Стьюдента визначаються значимі токсиметричні параметри, які будуть використані в подальшому

аналізі. Відповідно – АРУЛ-п, АРУЛк-СВ, АРУЛв-СВ, АРУЛс-МВ, ЦАЛг, ЦАЛв-МВ, ЦАЛс-МВ, за допомогою чинника від іншого.

Таблиця 2

Порівняння етіологічних факторів: “Ауто-алергічний” та “Аномалії нирок”.

	АРУЛ-к	АРУЛ-п	АРУЛ-в	АРУЛк-СВ	АРУЛв-СВ	АРУЛс-МВ	ЦАЛг	ЦАЛв-МВ	ЦАЛс-МВ
t_{lm}	-1,57	-2,04	-1,91	-4,37	2,40	-3,10	-10,14	-3,55	-6,68
Значущі фактори	0,00	1,00	0,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00

Порівняння

Наступним важливим етапом є власне визначення етіологічного фактора хворого, який відбувається шляхом порівняння його з кожним етіологічним чинником, припускаючи по черзі, що причина токсемії у хворого завідомо належить до однієї з етіологічних груп, і відповідно для порівняння проводиться лише за тими етіологічними, що є значимими, тобто були обчисленні на попередньому етапі побудови бібліотек.

Задається хворий $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, далі припускаємо, що хворий хворіє l -тою хворобою. Тобто

$$t_{lm} = \frac{|x_l - m_{lm}|}{\sqrt{\frac{\sigma_{il}^2}{N_l} + \frac{\sigma_{lm}^2}{N_m}}}$$

Де замість m_{lm} підставлено значення x_l показника хворого в якого невідомий етіологічний фактор тобто припускається, що він належить до l -тої етіології відповідно має стандартне відхилення l -тої етіологічної групи.

В результаті гіпотеза набуває вигляду:

H_0 – головна, нульова гіпотеза, у якій висувається припущення, що обидві вибірки нічим не відрізняються по j -тому показнику.

H_1 – альтернативна гіпотеза до H_0 – що обидві вибірки відрізняються по j -тому показнику.

Рівень значущості залишається рівний двом. Відповідно звернувшись до розглянутого прикладу, отримаємо:

Таблиця 3

Порівняння хворого з бібліотекою

	АРУЛ-к	АРУЛ-п	АРУЛ-в	АРУЛк-СВ	АРУЛв-СВ	АРУЛс-МВ	ЦАЛг	ЦАЛв-МВ	ЦАЛс-МВ
t_{lm}	-0,74408	-4,57374	-12,6289	-12,0313	22,59159	-16,2768	-1,55246	-10,2212	-5,26014
Оцінка	0	1	0	1	1	1	0	1	1

Як видно, 6 з 7 факторів вказують на те, що у хворого причиною виникнення токсемії є перша етіологія – “Ауто-алергічна”.

Моделювання алгоритму було проведено за допомогою моделюючої програми, розробленої Microsoft Visual Studio 2008 та з використанням результатів обрахованих в пакеті Statistica 8.0. Ведеться подальша робота по вдосконаленню алгоритму.

Список використаних джерел

1. *Большев Л.Н., Смирнов Н.В.* Таблицы математической статистики. 3-е издание – Москва «Наука», 1983. – 417 с.

2. *Amiya Nayak, Ivan Stojmenovic* Handbook of applied algorithm. Solving scientific, engineering and practical problem. – Willey interscience, 2008 – 541 p.

3. Проданчук М.Г., Шейман Б.С., Осадча О.І., Волошина Н.О. Спосіб діагностики етіологічного чинника токсемії. Патент України на винахід № 76227 G01N 33/48. А61В10/00; 17.07.2006, Бюл. № 7, 2006 р., с.1-16.

4. Проданчук М.Г., Шейман Б.С., Осадча О.І., Волошина Н.О. Спосіб вибору методу детоксикаційної терапії. Патент України на винахід № 74280 G01N33/48, А61В10/00; 15.11.2005, Бюл. № 11, 2005 р., с.1-24.

Надійшла до редколегії 11 червня 2009р.

УДК 519.8

Семенова Н.В., канд. фіз.-мат. наук, ст.
наук. співр., Машенко* О.С., студ.

Оптимізація на комбінаторній множині перестановок в умовах неточно заданих даних

Досліджені задачі дискретної оптимізації на комбінаторній множині перестановок, що виникають та розв'язуються за умов неточно заданих даних. На основі вивчення властивостей допустимої області задачі побудовано та обгрунтовано декомпозиційний метод знаходження її розв'язку за принципом абсолютно гарантованого результату.

Ключові слова: дискретна оптимізація, неточно задані дані, комбінаторна множина перестановок.

*E-mail: takutoka@ukr.net

Статтю представив доктор техн. наук, проф. Акіменко В.В.

Задачі дискретної оптимізації виникають при дослідженні багатьох теоретичних та прикладних проблем. Вони розв'язуються, при проектуванні мереж зв'язку, технічних пристроїв та машин, керуванні рухом транспорту, плануванні та в багатьох інших випадках. При розв'язанні різноманітних народногосподарських проблем важливу роль відіграють оптимізаційні задачі на комбінаторних множинах. Досить часто, на практиці виникають оптимізаційні задачі з неточно заданими параметрами. Застосовувати до таких задач методи, які припускають точно задані параметри моделей є некоректним, тому треба розвивати нові методи розв'язання задач дискретної оптимізації на комбінаторних множинах з неточними даними.

Розглянемо дискретну оптимізаційну задачу вигляду $P: \max\{c^T x \mid Ax \leq b, x \in D\}$, де вектор $c \in C$, C – опуклий многогранник в n -вимірному евклідовому просторі R^n , $A = [a_j]_{m,n} \in H$, H – замкнена множина в $R^{m,n}$. Для кожної координати x_j , $j \in N_n = \{1, \dots, n\}$, вектора $x = (x_1, \dots, x_n)$ визначимо множину $D_j \in R$, $j \in N_n$ її можливих значень. Отже $D = D_1 \times D_2 \times \dots \times D_n$, $D \in R^n$.

Відомі дві основні стратегії розв'язання задач дискретного програмування за умов

Semenova N.V., C.Sci(Phys-Math.), Senior
Res., Mashchenko* O.S., stud.

Optimization on the combinatorial set of permutations in inexact input data conditions

There are researched the problems of discrete optimization on combinatorial set of permutations that appear and are solved in conditions of inexact input data. There are built and grounded the decompositional method finding of a solution by principle of the absolutely assured result on the basis of research a possible set of problem.

Key words: discrete optimization problem, inexact input data, combinatorial set of permutations.

множинно заданих даних – оптимістична і консервативна [1–4].

За оптимістичною стратегією здійснюється пошук оптимального розв'язку задачі, що є допустимим для деяких (хоча б для одного) вектора $c \in C$ і матриці $A \in H$. Такий розв'язок є найкращим з усіх можливих розв'язків задачі P .

Оптимістична стратегія дає верхню границю $\bar{z} = \max\{c^T x^* \mid c \in C\}$ всіх можливих значень цільової функції задачі P , і оптимальний розв'язок $x^* \in Y = \{x \mid \exists A \in H: Ax \leq b, x \in D\}$, тобто для $\forall x \in Y: \max\{c^T x^* \mid c \in C\} \geq \max\{c^T x \mid c \in C\}$.

Консервативна стратегія полягає в знаходженні оптимального розв'язку задачі P одночасно допустимого для всіх можливих значень $c \in C$ і $A \in H$. Вона дає мінімально-гарантоване значення $\underline{z}$ цільової функції задачі P , $\underline{z} = \min\{c^T x^* \mid c \in C\}$, $x^* \in X$.

$X = \{x \mid Ax \leq b, \forall A \in H, x \in D\}$, де x^* – її оптимальний розв'язок. Тобто виконується нерівність: $\min\{c^T x^* \mid c \in C\} \geq \min\{c^T x \mid c \in C\}$, $\forall x \in X$. Визначивши значення $\underline{z}$ і $\bar{z}$, можна охарактеризувати стійкість задачі до змін її вхідних даних. Неважко побачити, що буде мати місце нерівність $\underline{z} \leq \max\{c^T x \mid c \in C, x \in X\} \leq \bar{z}$, де $X = \{x \mid Ax \leq b, A \in H, x \in D\}$. Інформація про

оптимальні розв'язки x^* і x^* , які одержані відповідно за оптимістичною і консервативною стратегіями, становить інтерес для особи, що приймає рішення, про вибір визначеного плану.

Наведемо постановку задачі дискретного програмування на комбінаторній множині перестановок з неточно заданими даними цільової функції та матриці обмежень. Побудуємо метод її розв'язання на основі принципу найкращого абсолютно гарантованого результату (песимістичної стратегії) [4].

Математичне формулювання цього принципу приводить до задачі наступного вигляду:

$P1: \max\{\min\{c^T x \mid c \in C\} \mid x \in X\}$, де $X = \{x \mid Ax \leq b, \forall A \in H, x \in D\}$.

Економічну інтерпретацію задачі $P1$ можна представити так: для деякої задачі планування потрібно встановити план, виконання якого абсолютно гарантоване при будь-яких поєднаннях невизначених параметрів із множини їх можливих значень. При цьому він повинен бути у певному розумінні найкращим. Оптимальним розв'язком задачі $P1$ є пара $(\bar{c}, \bar{x})$, елементи якої $\bar{c} \in C$, $\bar{x} \in X$ задовольняють умовам: $\bar{c}^T \bar{x} = \min\{c^T x \mid c \in C\} \geq \min\{c^T x \mid c \in C\} \forall (c, x)$ таких, що $c \in C$ і $x \in X$.

Введемо додаткову змінну $z \in R$ і запишемо початкову задачу $P1$ в еквівалентному вигляді:

$$\max\{z \mid z \leq c^T x, \forall c \in C, Ax \leq b, \forall A \in H, x \in D\}. \quad (1)$$

Нехай A_i^* , $i \in N_m$ – множина рядків A матриці A . Визначимо множину $X = \bigcap_{i \in N_m} X_i$, де

$$X_i = \{x \mid A_i x \leq b, \forall A_i \in A_i^*, x \in D\}, \quad i \in N_m.$$

Вважаємо, що множина X обмежена. Розглянемо, випадок, коли коефіцієнти матриці A задаються інтервалами їх можливих значень:

$$A' \leq A \leq A'', \quad (2)$$

де $A' = [a'_{ij}]_{m,n}$, $A'' = [a''_{ij}]_{m,n}$ – фіксовані матриці, $A' \leq A''$. Враховуючи нерівності: $A'x \leq Ax \leq A''x$, множина X набуває наступного вигляду:

$$X = \{x \mid A''x \leq b, x \in D\}. \quad (3)$$

Розглянемо простір D^{n+1} , множина точок якого є декартовим добутком множин R і D , тобто складається з усіх пар вигляду (z, x) , де $z \in R$, $x \in D$. Визначимо в D^{n+1} множини:

$$S = \{(z, x) \mid z \leq c^T x, \forall c \in C, z \in R, x \in D\},$$

$$G = \{(z, x) \in S \mid x \in X\}.$$

Теорема 1. Справедливі наступні твердження.

1. Задача $P1$ не має допустимих розв'язків тоді і тільки тоді, коли множина G порожня.

2. Якщо $(\bar{c}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі $P1$ і $\bar{z} = \bar{c}^T \bar{x}$, то $(\bar{z}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі:

$$\max\{z \mid (z, x) \in G\}, \quad (4)$$

а $\bar{c}$ – оптимальний розв'язок задачі:

$$\min\{c^T \bar{x} \mid c \in C\} \quad (5)$$

3. Якщо $(\bar{z}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі (4), то оптимальне значення цільової функції (5) дорівнює $\bar{z}$. Якщо $\bar{c}$ – оптимальний розв'язок задачі (5), то $(\bar{c}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі $P1$ зі значенням $\bar{z}$ її цільової функції.

Доведення. Якщо (z, c, x) – допустимий розв'язок задачі (1), то (z, x) – допустимий розв'язок задачі (4), що випливає з визначення множини G . Якщо (z, x) – допустимий розв'язок задачі (4), то існує таке $c \in C$, що (z, c, x) – допустимий розв'язок задачі (1). Оскільки задачі $P1$ і (1) – еквівалентні, це доводить перший пункт теореми. Звідси також випливає, що, якщо $(\bar{c}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі $P1$ і $\bar{z} = \bar{c}^T \bar{x}$, то $(\bar{z}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі (4). Якщо $(\bar{z}, \bar{x})$ – оптимальний розв'язок задачі (4), то існує така точка $\bar{c} \in C$, що $(\bar{z}, \bar{c}, \bar{x})$ є оптимальним розв'язком задачі (1), тоді $\bar{z} = \bar{c}^T \bar{x}$. Оскільки $\bar{c}^T \bar{x} \geq \bar{z}$ для будь-якого допустимого розв'язку $(c, \bar{x})$ задачі $P1$, одержуємо, що $\bar{c}$ – оптимальний розв'язок задачі (5). Теорему доведено.

Отже розв'язання вхідної задачі $P1$ зводиться до розв'язання двох задач: задачі дискретного програмування з однією неперервною змінною вигляду (4) і задачі лінійного програмування вигляду (5). Якщо задача (4) не має допустимих розв'язків, то не має допустимих розв'язків також і задача $P1$. Якщо (4) має оптимальний розв'язок $(\bar{z}, \bar{x})$, то для побудови оптимального розв'язку $(\bar{c}, \bar{x})$ задачі $P1$ потрібно розв'язання задачі (5).

Для знаходження розв'язку задачі $P1$ треба виписати всі обмеження, що визначають область G , тобто ті, що визначають множини S і D . Але знаходження оптимального розв'язку задачі (4)

більш важливо, ніж сама множина G , тому достатньо побудувати тільки ті обмеження G , що визначають оптимальний розв'язок цієї задачі. Нехай $c^j \in C$, $j \in J = \{1, \dots, k, \dots\}$,

$$S_j^k = \{(z, x) | z \leq (c^j)^T x, z \in R^1, x \in D\}, \quad S^k = \bigcap_{j \in J} S_j^k,$$

$$G^k = \{(z, x) \in S^k | x \in X\}.$$

Теорема 2. Нехай (z, x) – оптимальний розв'язок задачі

$$\max\{z | (z, x) \in G^k\}. \quad (6)$$

Він також є оптимальним розв'язком задачі (4) тоді і тільки тоді, коли

$$z = \min\{c^T x | c \in C\}. \quad (7)$$

Доведення. Оптимальний розв'язок (z, x) задачі (6) є оптимальним розв'язком задачі (4) тоді і тільки тоді, коли він належить множині G . Необхідність цієї умови є очевидною. Оскільки $G^k \supseteq G$, то $\max\{z | (z, x) \in G^k\} \geq \max\{z | (z, x) \in G\}$. Отже, умова $(z, x) \in G$ є також достатньою. З визначення множини G випливає, що $(z, x) \in G$ тоді і тільки тоді, коли $x \in D$ і

$$z \leq \min\{c^T x | c \in C\}. \quad (8)$$

Оскільки (c, x) є допустимим розв'язком задачі $P1$, то з теореми 1 і включення $G^k \supseteq G$ маємо:

$$\min\{c^T x | c \in C\} \leq \max\{z | (z, x) \in G\} \leq \max\{z | (z, x) \in G^k\} = z \quad (9)$$

Із співвідношень (8), (9) випливає рівність (7). Теорему доведено.

Для розв'язання задачі (6) немає потреби у побудові всіх обмежень, що визначають область G^k , тому будемо розглядати тільки ті з них, що визначають оптимальний розв'язок цієї задачі. Запропонований алгоритм дозволяє розв'язати задачу $P1$ без знання всіх обмежень.

Числа $r_i(x) = \max\{A_i x | A_i \in A_i^*\} - b_i$ будемо називати відхиленнями точки $x \in D$ від границі множин X_i , $i \in N_m$, а $r(x) = \max\{r_i(x) | i \in N_m\}$ – відхиленням $x \in D$ від границі множини X .

Розглянемо задачу частково-дискретного лінійного програмування вигляду:

$$\max\{z | (z, x) \in G_l^k\}, \quad (10)$$

$$\text{де } G_l^k = \{(z, x) \in S^k | x \in P_l\}, \quad (11)$$

$$P_l \supseteq X, \quad k, l = 1, 2, \dots, \quad P_1 = \{x | x \in D\}, \\ P_{l+1} = P_l \cap \{x | A_s^l x \leq b_s, s \in N_m\}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (12) \\ A_s^l \in \bigcup_{i \in N_m} A_i^*.$$

Якщо задача (10) не має допустимих розв'язків, то, з огляду на (11), задача (6) також не має допустимих розв'язків. Оскільки $G^k \supseteq G$, та на підставі пункту 1 теореми 1 робимо висновок, що задача $P1$ також не має допустимих розв'язків.

Теорема 3. Якщо (z, x) – оптимальний розв'язок задачі (10), то для того, щоб він був оптимальним і для задачі (6), необхідно і достатньо, щоб

$$r(x) \leq 0. \quad (13)$$

Доведення. Відзначимо, що $\forall l = 1, 2, \dots$, задача (10) є релаксованою стосовно задачі (5), тому достатньо показати, що для того, щоб точка $(z, x) \in G_l^k$ належала множині G^k , необхідно і достатньо виконання умови (13). Припустимо, що $(z, x) \in G^k$. З визначення множини G^k випливає, що $(z, x) \in S^k$ і $x \in X$. Оскільки $x \in X$, то для всіх $i \in N_m$, $x \in X_i$, тобто $r_i(x) \leq 0$. Отже, має місце нерівність (13).

Покажемо, що з умови (13) випливає належність точки (z, x) області G^k . Виконання нерівності (13) означає, що $\forall i \in N_m$, $A_i x \leq b_i$, $A_i \in A_i^*$, тобто $x \in X$. Оскільки за умовою теореми $(z, x) \in G_l^k$, то $(z, x) \in S^k$. На підставі того, що $G^k = \{(z, x) \in S^k | x \in X\}$, маємо $(z, x) \in G^k$. Теорему доведено.

Наведемо алгоритм розв'язання задачі $P1$.

Початковий крок. Вибираємо $c^1 \in C$. Нехай $k = 1$, $S^1 = \{(z, x) | z \leq (c^1)^T x, z \in R, x \in D\}$, $l = 1$, $P_1 = \{x | x \in D\}$.

Частина 1.

1. Розв'язуємо задачу вигляду (10). Якщо вона не має допустимих розв'язків, то задача $P1$ недопустима. Це можливо лише для $k = 1$. Якщо (z^1, x^1) – оптимальний розв'язок задачі (10), переходимо до пункту 2. Якщо розв'язок задачі (10) виявиться необмеженим, переходимо до пункту 2, вибираючи за координати вектора x^1 досить великі цілі числа.

2. Знаходимо відхилення $r(x^l)$ і елемент $A_s^l \in \bigcup_{i \in N_m} A_i^*$, для якого воно досягається.

3. Якщо

$$r(x^l) \leq 0, \quad (14)$$

то на підставі теореми 3 робимо висновок, що (z^l, x^l) – оптимальний розв'язок задачі (6). Переходимо до частини 2 алгоритму, покладаючи $(z^k, x^k) = (z^l, x^l)$. Інакше переходимо до пункту 4.

4. Утворюємо множину P_{l+1} за формулою (12). Змінюючи l на $l+1$, переходимо на пункт 1.

Частина 2.

Розв'язуємо задачу лінійної оптимізації:

$$\min \{c^T x^k \mid c \in C\}. \quad (15)$$

Нехай c^{k+1} – її оптимальний розв'язок.

2. Якщо

$$(c^{k+1})^T x^k = z^k, \quad (16)$$

то алгоритм закінчується. Відповідно до теореми 2 точка (x^k, x^k) – оптимальний розв'язок задачі (4). Тоді на підставі пункту 3 теореми 1 робимо висновок, що (c^{k+1}, x^k) – оптимальний розв'язок задачі P1 зі значенням z^k її цільової функції. Інакше переходимо до пункту 3.

3. Утворюємо множину $S^{k+1} = S^k \cap \{(z, x) \mid z \leq (c^{k+1})^T x\}$. Заміняючи k на $k+1$ переходимо до частини 1 алгоритму.

Для обчислення $r(x)$ треба розв'язати m задач $\max \{A_i x \mid A_i \in A_i^*\}$.

Зауваження 1. Якщо коефіцієнти матриці A задаються інтервалами їх можливих значень (2), частина 1 алгоритму зводиться до розв'язання задачі (6), де X описується формулою (3).

Зауваження 2. Якщо, крім коефіцієнтів матриці обмежень, інтервалами можливих значень задаються також коефіцієнти $c = (c_1, \dots, c_n)$ цільової функції, тобто $\hat{c} \leq c \leq \bar{c}$, де $(\hat{c})^T = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$, $(\bar{c})^T = (\bar{c}_1, \dots, \bar{c}_n)$ – фіксовані вектори, $\hat{c} \leq \bar{c}$. Тоді вихідна задача P1 зводиться до задачі цілочислового лінійного програмування вигляду: $\max \{(c')^T x \mid A' x \leq b, x \in D\}$.

Економічна інтерпретація цієї задачі полягає в наступному. При прагненні до гарантованого результату треба будувати планування

орієнтуючись на нижній рівень цін, а також на гранично високі значення витрат на одиницю випуску продукції.

Зауваження 3. Якщо H – опуклий многогранник в $R^{m \times n}$, то після k -го кроку алгоритму розрахунки можна припинити, одержавши при цьому наближений розв'язок (c^{r+1}, x^r) , $r \in J$, задачі P1 і границі для оптимального значення z^k цільової функції: $y_r \leq z^r \leq z^k$, де $y_r = \max \{(c^{j+1})^T x_j, j \in J\}$, r – індекс, для якого досягається максимум.

Теорема 4. Якщо H – опуклий многогранник в $R^{m \times n}$, то алгоритм збігається до оптимального розв'язку задачі P1 за скінчене число кроків, яке не перевищує $R+1$, де R – кількість вершин опуклого многогранника C . Інакше алгоритм закінчується на першому кроці з висновком, що задача P1 недопустима.

Доведення. Оскільки розглянутий алгоритм складається з двох частин, в яких окремо розв'язуються оптимізаційні задачі вигляду (10) і (15), то варто довести скінченність алгоритмів розв'язання цих задач.

Розглянемо частину 1 алгоритму. Якщо на деякому кроці для точки x^l не виконується умова (14), то в задачу (10) вводиться обмеження $A_s^l x \leq b_s$, $s \in I$. Оскільки H – опуклий многогранник, то неважко довести, що $A_s^l, i \in I$ – також опуклий многогранник. Це означає, що для кожного $i \in I$ може бути знайдено не більш ніж N_i різних значень r_i , де N_i – число вершин многогранника A_i^* . Отже за число ітерацій, що не перевищує величини $\sum_{i \in N_m} N_i$ (що складає один

крок алгоритму) виконається рівність (14) або будуть виписані всі обмеження, що визначають множину X , і знайдено розв'язок задачі (6).

Частина 2 алгоритму закінчується після виконання умови (16). Інакше до задачі (10) додається нове обмеження вигляду $z \leq (c^{k+1})^T x$.

Оскільки опуклий многогранник C має R вершин, у яких незалежно від величини x досягається оптимум задачі (15), то за скінченне число кроків виконається умова (16), або буде виписана вся множина обмежень, яка визначає область S і в такий спосіб буде знайдений розв'язок задачі (4), а разом з нею і задачі P1.

Жоден з векторів c^{k+1} до виконання умови (16) не може бути знайдений повторно. Якщо $c^{k+1} = c^{l+1}$, то $(c^{k+1})^T x^k = (c^{l+1})^T x^l = z^l$, і

виконується критерій оптимальності. Отже кількість кроків алгоритму не перевищує $R+1$.

Алгоритм закінчується, коли задача $P1$ не має допустимих розв'язків. Це виявляється згідно пункту 1 теореми 1 і того, що $G_1^k \supseteq G^k \supseteq G$ тоді і тільки тоді, коли задача (10) не має розв'язків на першому кроці. Теорему доведено.

Опуклою оболонкою комбінаторної множини перестановок є загальний переставний многогранник, множина вершин якого дорівнює множині перестановок [5, 6]. Дана властивість переставного многогранника дає можливість звести розв'язання задачі, визначеної на дискретній комбінаторній множині, до її розв'язання на неперервній допустимій множині.

На основі встановленого зв'язку між оптимізаційними задачами на комбінаторних множинах і задачами оптимізації на неперервній допустимій множині з'являється можливість застосовувати класичні методи неперервної оптимізації та розвивати нові оригінальні методи розв'язання, використовуючи властивості комбінаторних множин та їх опуклих оболонок [6, 7].

Нехай задана мультимножина $A = \{a_1, \dots, a_q\}$, її основа $S(A) = \{e_1, \dots, e_k\}$, де $e_j \in R$, $\forall j \in N_k$ і кратність елементів $k(e_j) = r_j$, $j \in N_k$, $r_1 + r_2 + \dots + r_k = q$. Впорядкованою n -вибіркою із мультимножини A називається набір

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n), \quad (17)$$

де $a_i \in A$, $\forall i \in N_n$, $\forall j \in N_n$, $i_s \neq i_t$, $s \neq t$, $\forall s \in N_n$.

Означення 1. Множина $E(A)$, елементами якої є n -вибірки з мультимножини A вигляду (17), будемо називати евклідовою комбінаторною множиною, якщо для довільних її елементів $\bar{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$, $\bar{a}' = (a'_1, a'_2, \dots, a'_n)$, виконуються умови: $\bar{a} \neq \bar{a}'$, $j \in J_n: a_j \neq a'_j$.

Тобто множина $E(A)$ має таку властивість: два її елементи відмінні один від іншого, якщо вони відрізняються порядком розміщення символів, які їх утворюють.

Означення 2. Перестановкою скінченної множини A називається довільна бієктивна функція $\pi: A \rightarrow A$. Всього існує $n!$ різних перестановок, де $n = |A|$.

Вважаємо, що елементи мультимножини упорядковані за неспаданням: $\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \dots \geq \alpha_n$.

Нехай P_n – множина всіх перестановок з n чисел мультимножини A . Кожній перестановці $a = (a_1, a_2, \dots, a_n) \in P_n$ поставимо у відповідність точку $\alpha_j = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$ за правилом $x_i = a_j$, $i, j \in N_n$.

Означення 3. Опуклу оболонку точок $\{\alpha^i = (a_1, \dots, a_n): \forall \alpha^i \in P_n\}$ будемо називати многогранником перестановок і позначати Π_{nk} .

Теорема 5 (Радю [8]). Многогранник перестановок задається наступною системою лінійних обмежень:

$$\sum_{j=1}^n x_j = \sum_{j=1}^n \alpha_j, \quad \sum_{j=1}^i x_{\alpha_j} \geq \sum_{j=1}^i \alpha_j,$$

$$\alpha_j \in N_n, \alpha_j \neq \alpha_i, \forall j \neq i, i, j \in N_n, \forall i \in N_{n-1}.$$

Розглянемо задачу комбінаторної оптимізації з неточно заданими даними на множині перестановок:

$$\max \{c^T x \mid Ax \leq b \quad \forall A \in H, x \in D, \forall b \in B, c \in C\}, \quad (18)$$

де вектор $c \in R^n$, $U = [a_j]_{m,n} \in H$, H – замкнена множина в $R^{m \times n}$, D – простір n -вимірних векторів, P_n – комбінаторна множина перестановок, яку можна описати у вигляді многогранника перестановок Π_{nk} , вершинами якого є перестановки.

Твердження. Якщо для елементів мультимножини A і коефіцієнтів c_j , $j \in N_n$, цільової функції задачі $f(x) = \max \{c^T x \mid x \in \Pi_{nk}(A)\}$ виконуються відповідно умови $a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq a_n$ і $c_{i_1} \leq c_{i_2} \leq \dots \leq c_{i_n}$, $i_n \in N_n$, то максимум функції $f(x)$ на допустимій множині досягається в точці $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) \in \Pi_{nk}(A)$, де $x_j^* = a_j$, $\forall j \in N_n$, а мінімум – в точці $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, де $y_{i_j+1} = a_{n-j}$, $\forall j \in N \cup \{0\}$.

Алгоритм розв'язання комбінаторної задачі:

Початковий крок. Нехай $\bar{f} = \infty, s = 0$.

1. За початкову точку x^s вибираємо деякий елемент загальної множини перестановок.
2. Опишемо обмеження, які відповідають точці x^s і визначають вершину загального переставного многогранника Π_{nk}^s :

$$x^s \in \Pi_{nk}^s, \quad \Pi_{nk}^s \supset \Pi_{nk}. \quad (19)$$

3. Знаходимо відхилення $r_i(x^s)$, $\forall i \in N_q \setminus X_s$, де q - загальне число обмежень, p - число обмежень переставного многогранника, за формулами:

$$r_i(x^s) = \sum_{j=1}^i X_{a_j} - \sum_{j=1}^i a_j, \quad i \in N_p,$$

$$r_i(x) = \max\{U_i, x | U_i \in U_i^* \} - d_i, \quad i \in N_q \setminus N_p.$$

4. Вибираємо $r(x^s) = \max\{r_i(x^s) | i \in N_q\}$ і номер $i_s \in R$, при якому досягається максимум.

5. Перевіряємо нерівність $r(x^s) \leq 0$. Якщо вона виконується, то точка x^s - оптимальний розв'язок задачі. Якщо $r(x^s) > 0$, то обмеження не виконуються і переходимо до наступного пункту.

6. Додаємо отримане обмеження до обмежень задачі (19). Формуємо допустиму множину задачі таким чином:

$$G^{s+1} = G^s \cap \{x \in R^s | \langle H_{i_s}, x \rangle \leq g_{i_s}\} \quad (20)$$

7. Якщо $f(x^s) < \bar{f}$, то визначаємо множину індексів $N^n(x^s) \subset X_s, X_s \setminus N^n(x^s)$. Покладаємо $\bar{f} = f(x^s)$, $s = s + 1$ і розв'язуємо нову задачу.

8. Розв'язуємо задачу лінійної оптимізації:

$$\max\{c^T x | x \in G^{s+1}\}. \quad (21)$$

Якщо вона не має розв'язків, то немає розв'язків і вихідна задача (18). Інакше одержимо оптимальний розв'язок x^s .

9. Знаходимо суміжні з точкою x^s вершини многогранника перестановок і будуємо відтинання вигляду $\langle H_{i_s}, x \rangle \leq g_{i_s}$, яке проходить через суміжні з точкою x^s вершини і якому не задовольняє точка x^s . Формуємо систему обмежень за формулою (20). Переходимо до пункту 7 алгоритму.

Зауваження. Якщо x^s - елемент загальної множини перестановок $P_m(A)$, то до множини $N^n(x^s)$ неактивних обмежень, які виключаються з множини X , слід віднести всі обмеження многогранника $P_m(A)$, крім тих, які визначають точку x^s .

Робота алгоритму завершується після розв'язання скінченного числа задач і приводить до оптимального розв'язку задачі (18) або до побудови такої множини обмежень, при якій

задача вигляду (21) не буде мати розв'язків, отже розв'язків не матиме і початкова задача.

Таким чином, досліджено задачу оптимізації на комбінаторній множині перестановок в умовах неточно заданих даних. Вивчені властивості многогранника перестановок. Запропоновано алгоритм розв'язання задачі оптимізації. Подальший розвиток даної роботи може бути спрямованим на дослідження задач з іншими видами невизначеностей та на інших комбінаторних множинах.

Список використаних джерел

1. Сергиенко И.В. Математические модели и методы решения задач дискретной оптимизации. - К.: Наук. думка, 1988. - 472 с.
2. Семенова Н.В. Методы поиска гарантирующих и оптимистических решений задач целочисленной оптимизации в условиях неопределенности данных // Кибернетика и системный анализ - 2007. - №1 - С. 103-114.
3. Сергиенко И.В., Рошин В.А., Семенова Н.В. Некоторые задачи целочисленного программирования с неоднозначно заданными данными и их решение // Проблемы управления и информатики. - 1998. - №6 - С. 117-123.
4. Рошин В.А., Семенова Н.В., Сергиенко И.В. Вопросы решения и исследования одного класса задач неточного целочисленного программирования // Кибернетика. - 1989. - №2 - С. 42-47.
5. Стоян Ю.Г., Яковлев С.В. Математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования. - Киев: Наук. думка, 1986. - 265 с.
6. Стоян Ю.Г., Емец О.О. Теория і методи евклідової комбінаторної оптимізації. - К.: Ін-т систем. досліджень освіти, 1993. - 188 с.
7. Семенова Н.В., Колечкина Л.Н., Нагорная А.Н. Подход к решению векторных задач дискретной оптимизации на комбинаторном множестве перестановок // Кибернетика и системный анализ. - 2008 - № 3. - С. 158-172.
8. Емельчев В.А., Ковалев М.М., Кравцов М.К. Многогранники, графы, оптимизация. - М.: Наука, 1981. - 344 с.

Надійшла до редколегії 29.09.09

УДК 004.519.712, 004.94

Терещенко В.М., к.ф.-м.н., доц.,
Григоренко Д.П., студент

Персептронна модель прогнозування ринкових котирувань

В роботі запропоновано модель для прогнозування біржових котирувань на фінансових, фондових, товарних та індексних ринках. Ця модель є задачею багатокритеріальної оптимізації і базується на теорії нейронних мереж.

Ключові слова: нейронні мережі, персептрон, прогнозування процесів, ринки, автоматизовані торговельні системи (АТС), графічний технічний аналіз.

*E-mail: dmitrygrig@gmail.com

Статтю представив д. ф. - м. н., проф. Анісімов А.В.

Вступ

Постановка проблеми. Існує два головних підходи до прогнозування ринкових котирувань: фундаментальний та технічний аналіз. Перший з них працює з різними економічними показниками, політичними подіями, погодними умовами тощо. Другий пов'язаний безпосередньо з котируваннями ринку. Обидва підходи мають як позитивні, так і негативні сторони. Проте основною їх метою є визначення якнайбільш точного прогнозу для ціни акції, товару чи валюти впродовж певного часу в майбутньому.

Аналіз останніх досліджень. З поміж основних підходів технічного аналізу можна виділити наступні:

- **Графічна аналітика** [1]. Для прогнозу використовується лише графік інструменту і графічні побудови, виконані на ньому. Ефективний в комплексі з іншими методиками, але значний вплив має суб'єктивний психологічний фактор.
- **Прогнозування, засноване на згладжуванні даних.** Привабливими є ринки, яким притаманна поступова зміна тенденцій, відсутність різких стрибків котирувань та наявність виражених трендів. Так як таких ринків дуже мало, то і застосовуються дані методи в основному в комбінації з іншими методами технічного аналізу [1].

Tereschenko V.M., C. Sci(Phys-Math.), Ass.Prof.,
Grygorenko D.P., student

Perceptron model for forecasting market quotations

In this paper is proposed a model for forecasting stock price on the financials, stocks, commodities and indices markets. This model is a multiobjective optimization problem. It's based on the theory of neural networks.

Key Words: neural networks, perceptrons, process forecasting, stocks, automated trading systems, graphic technical analysis.

- **Регресійні методи.** Ці методи будують моделі множинної регресії, коефіцієнти якої підбираються на основі спостережень у минулому. Вони показують стабільні результати на спокійних ринках, але погано пристосовуються до різких змін тенденцій.
- **Методи Бокса-Дженкінса.** Схожі до регресійних методів [2].
- **Гармонійний аналіз Фур'є** [3]. У цьому випадку котирування ринку представляють у вигляді рядів або інтегралів Фур'є. Ці методи ще називають спектральними, тому що вони відшукують спектр амплітуд деякого стаціонарного процесу. Але проблема в тому, що котирування різноманітних фінансових інструментів – нестационарні. В статистиці для зведення нестационарного процесу до стаціонарного використовують різницеві перетворення. Головним аргументом неможливості ефективного використання даних методів є нестабільність спектру. С технічної точки зору, це дійсно дуже затрудняє використання спектральних методів для аналізу ринку.

Нелінійні методи аналізу економічної та фінансової інформації. В умовах зростаючої некерованості світових процесів у фінансовій сфері традиційні лінійні методи все частіше виявляються нездатними розпізнати ключові переломи в тенденціях ринку. Так було, наприклад, у випадках із крахом фондового

ринку в 1987 році або початком глибокого спаду в економіці Великобританії. Це змусило повернутись до ідей, згідно з якими зміна ринкових показників у часі не є чисто випадковим явищем. Загальною рисою нових методів є можливість розпізнавання образів і встановлення узагальнюючих правил. Їх істотними складовими є нейронні мережі й генетичні алгоритми. Про методи обох видів говорять, що вони керують даними, на противагу підходу, заснованому на застосуванні правил, який прийнятий в експертних системах. Системи, засновані на знаннях, мають один недолік. Побудовані на їхній основі методи торгівлі виявляються досить негнучкими.

Нарешті зовсім інший підхід пропонує теорія динамічних систем або теорія хаосу. За допомогою цієї теорії вдається з поміж випадкових явищ виділити стійкі тенденції, які визначають порядок та деяку структуру. Основне припущення полягає у тому, що поведінка системи є результатом безлічі нелінійних взаємодій, внаслідок чого навіть невеликі зміни початкових даних можуть призвести до зовсім іншої подальшої поведінки системи. Завдяки досягненням цієї теорії, у деяких ситуаціях вдається виявити «додаткові» прибутки, які не можна було отримати, діючи в припущеннях гіпотези ефективного ринку.

Даний напрямок досліджень одержав визнання у практиків, тому що він узгоджується з їхніми інтуїтивними уявленнями про те, що в сукупній картині змін показників фінансового ринку можуть бути присутні певні закономірності, які можна розпізнати й на їхній основі будувати свою інвестиційну та торговельну діяльність. Такі закономірності можна виявити шляхом аналізу часових рядів або аналізу перетинів. В будь-якому випадку застосування нейронних моделей приносить відчутний прибуток, і це добре узгоджується з тезою Герберта Саймона про «обмежену раціональність» [4], згідно з якою на ефективності ринку позначаються обмеженість можливостей людини в роботі з інформацією. Більше того, нейронні мережі ідеально пристосовані для виявлення нелінійних залежностей за умови відсутності апіорних знань про основну модель. Їх можна використовувати скрізь, де зазвичай застосовувалися лінійні методи оцінювання за допомогою стандартних статистичних методів.

Існують й інші, більш практичні причини зростання цікавості до нелінійних методів

аналізу фінансових ринків. За останні роки структура операцій на ринках змінилася в бік її інтернаціоналізації.

Коли ми розглядаємо сектор ринку, відповідний до довгострокових угод, то слід визнати, що визначальний вплив на ціни можуть мати такі екзогенні фактори, як обмінні курси й процентні ставки, показники економічного росту, тенденції цін і показники прибутків. Поведінка ринку задовільно описується так званою гіпотезою ефективного ринку, згідно з якою вся доступна інформація про поточні й майбутні події дисконтується в поточні ціни ринку, так що зміни цін викликані лише свіжою інформацією. Навпаки, у короткостроковій перспективі з'являються нові можливості для прогнозів, пов'язані з обліком регулювання платежів, зворотних зв'язків і численних технічних і структурних факторів. Старі парадигми фінансової науки, такі як моделі випадкового блукання або гіпотези ефективності ринку дають нам уявлення про те, що фінансові ринки схильні плавно й розумно пристосовуватися до нової інформації. У цьому випадку переконливими є описи поведінки ринку на основі лінійних залежностей і законів обігу трендів. Однак драматичні обвали ринку при відсутності істотних змін інформації, різкі зміни умов доступу й строків при переході компанією якогось невидимого порогу в кредитній сфері – все це прояв нелінійності. Дійсність показує, що поведінка фінансових ринків навряд чи може бути описана лінійними трендами. Тут, щоправда, необхідно деяке застереження. Перебільшені претензії на ефективність можуть підірвати довіру до цих наукових розробок. Навіть фахівці не сходяться в думках щодо перспектив цих ідей [5, 6].

Мета статті. Розробка системи на основі нейромережових алгоритмів, яка б могла генерувати прогноз щодо купівлі чи продажу досліджуваного фінансового інструменту в майбутньому.

Циклічна нейронна мережа

В роботі пропонується новий підхід до прогнозування подальших подій на ринку. Він спирається на теорію нейронних мереж, графічний технічний аналіз та дискримінантний аналіз.

Одним з методів прогнозування у технічному аналізі є вивчення свічкових паттернів. Такими є «Вечірня зірка», «Молот», «Голова і плечі» тощо

[7]. Всі вони використовуються ще з того часу, як було введено в розгляд графік японських свічок. На перший погляд, здається, що вище зазначена інформація мало змістовна, проте, насправді, вона відображає саме психологію поведінки ринкових структур. Крім класичних графічних моделей можна запропонувати нові моделі. Відслідковуючи реакцію ринку на їх появу, можна з деякою вірогідністю прогнозувати подальші падіння або підйоми котирувань цін.

В розробленій моделі для дослідження вибрана параметрично задана комбінація кольорів свічок останніх часових періодів. Якщо останнім часом ринок реагує ростом на деяку з них, то її ваговий коефіцієнт збільшується. Коли даний коефіцієнт стає більшим за вибраний поріг, наприклад, для купівлі фінансового інструменту, то система віддає наказ про вихід на ринок.

Всі події на ринку можна розділити на три періоди: зростаючий, спадаючий тренд та флет (або бічний тренд), які весь час змінюють один одного [1]. На сьогодні, модель пристосовується до домінуючого тренду і реагує на комбінації, притаманні саме цьому періоду. Але рух ринку змінюється і необхідний певний час, для перебудови структури прогнозування. Постає проблема втрати коштів. Саме для того, щоб запобігти втратам, модифікується ваговий коефіцієнт – вводиться циклічність. Використовуючи різницеве перетворення, диференціюємо функцію ринку, за рахунок чого новий циклічний ваговий коефіцієнт є

відображенням швидкості ринку. Це суттєво зменшує час перебудови системи. Через що зміну мови вже не йде про звичну нейронну мережу, а так звану *циклічну нейронну мережу*.

Зрозуміло, що кожен ринок має свої особливості, тому параметри моделі для кожного з них будуть відрізнятися. Для підбору параметрів вибирається період (найчастіше це останні роки), і система навчається на половині даних. Коли шукані параметри знайдені, відбувається перевірка на останній частині вибірки [5]. Інколи деякі ринки показують значну волатильність. Особливо це стосується котирувань валют та акцій деяких компаній [8]. Тоді підбір параметрів стає неможливим. В такому випадку доречно виконати згладжування даних і вже працювати саме з ними. Графічне представлення системи для аналізу комбінацій з трьома свічками на не згладжених даних представлено на рис. 1.

Аналіз результатів

Для доведення працездатності системи потрібно було показати, що вона може ефективно працювати на будь-якому ринку, використовуючи різноманітні часові проміжки. З отриманих результатів вибрано 2-3 інструменти з кожного типу ринку. На рисунках 2 – 17 показані їх графіки (зліва) та відповідні криві депозиту (справа):

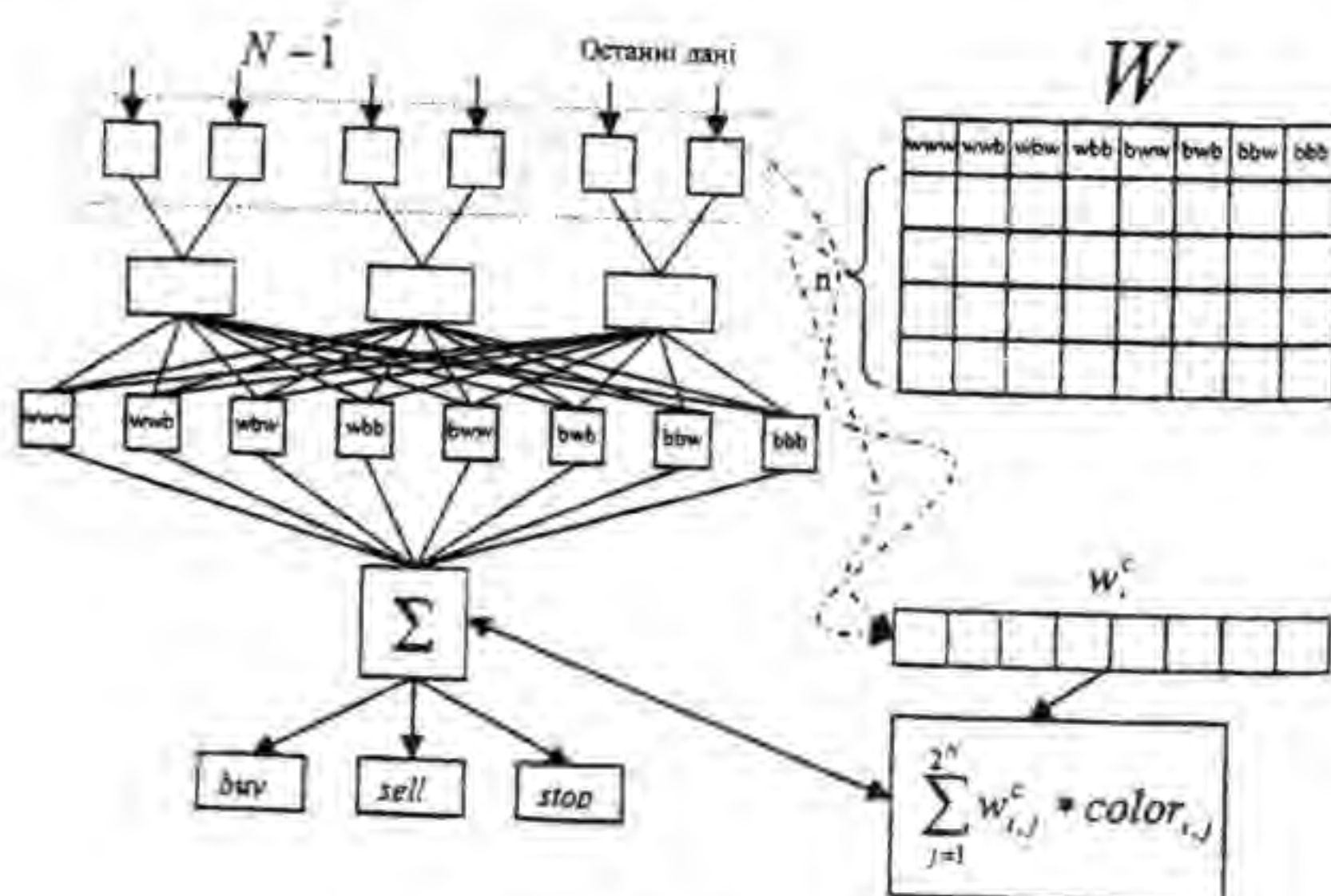


Рис. 1. Графічне представлення системи

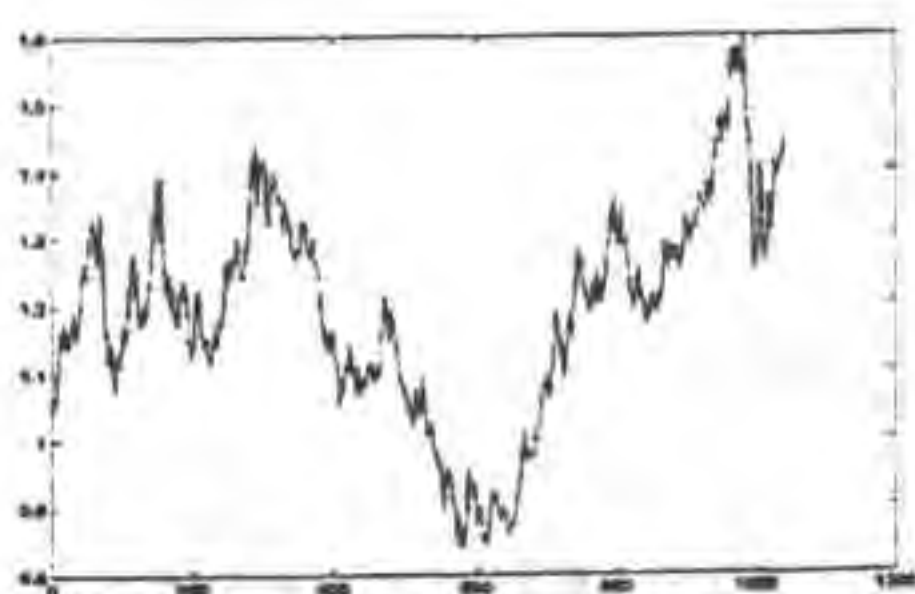


Рис. 2. Тижневий графік EUR/USD (1994-2009 рр.)

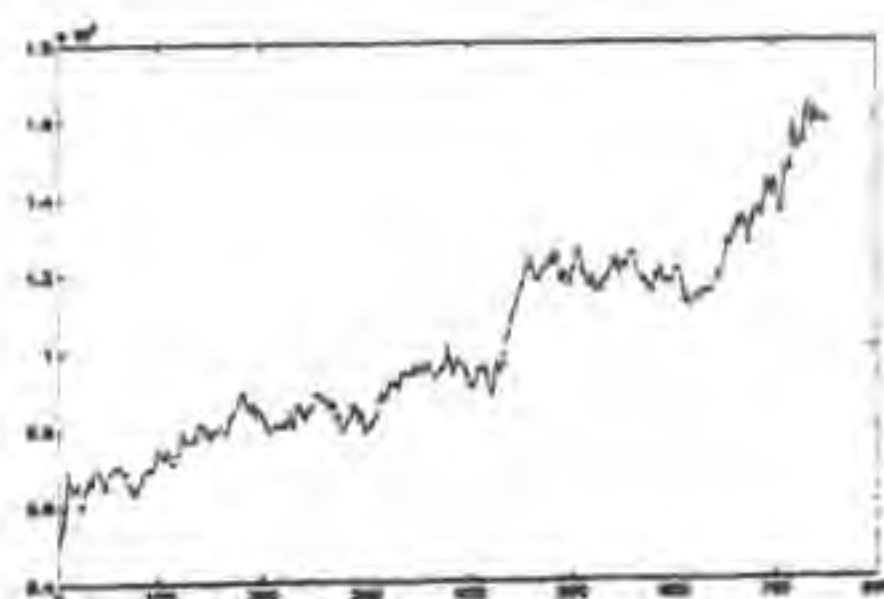


Рис.3. Прибуток по EUR/USD

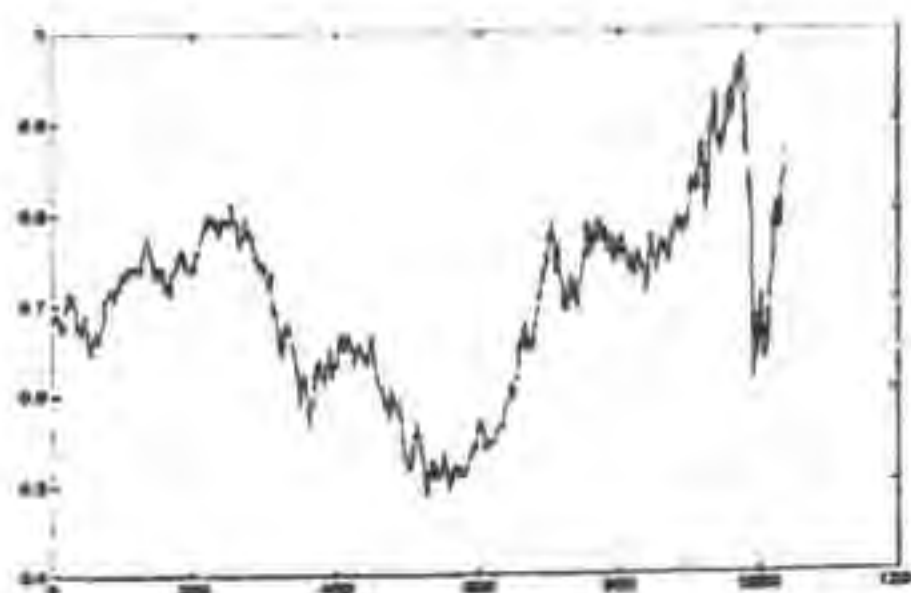


Рис. 4. Тижневий графік AUD/USD (1997-2009 рр.)

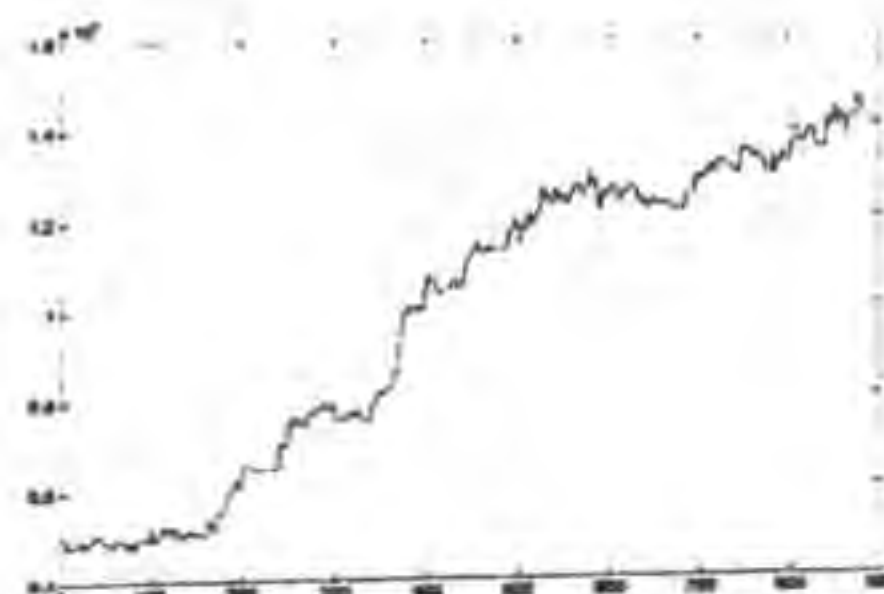


Рис. 5. Прибуток по AUD/USD

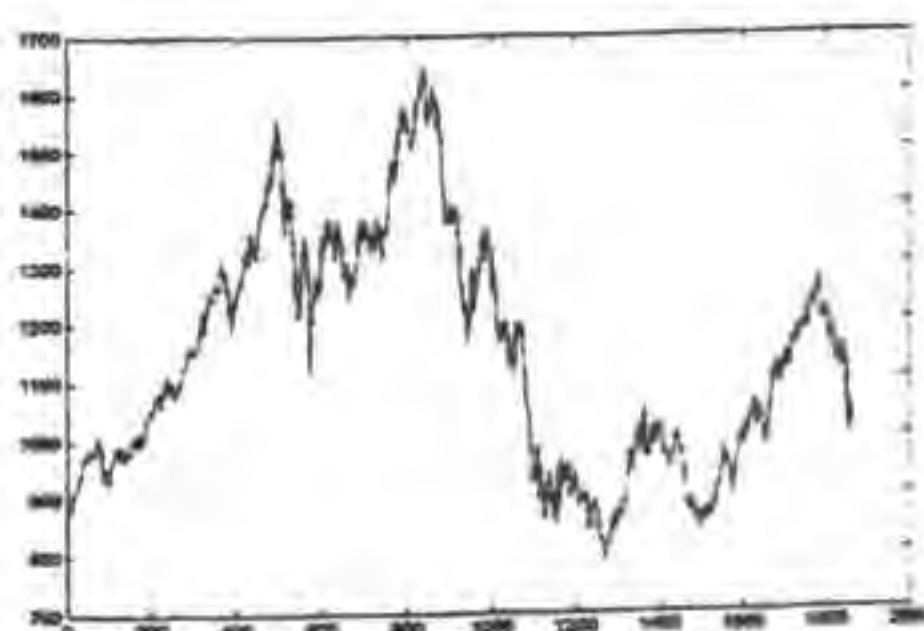


Рис. 6. 4-х годинний графік ф'ючерсу на Соеві боби (2007-2009 рр.)

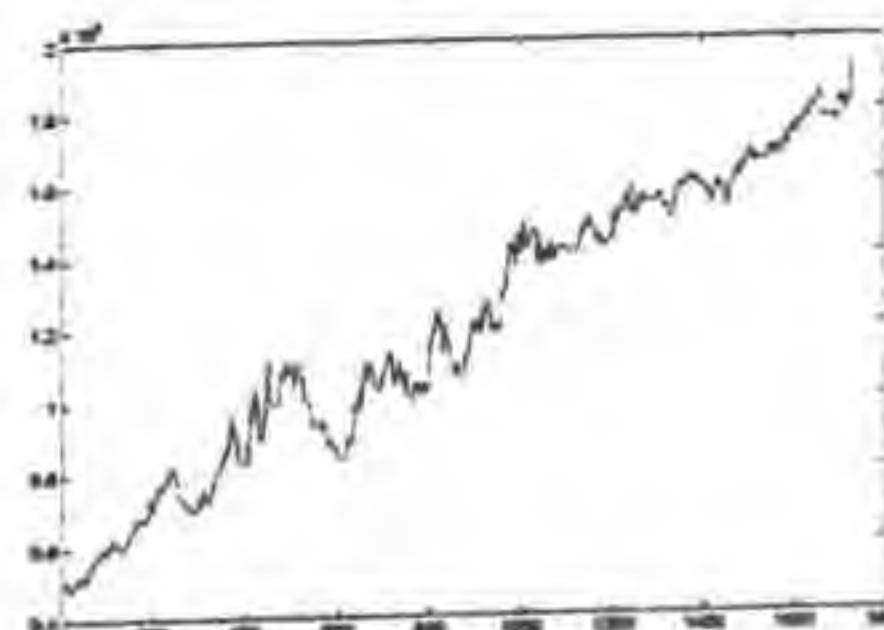


Рис. 7. Прибуток по Соевим бобам

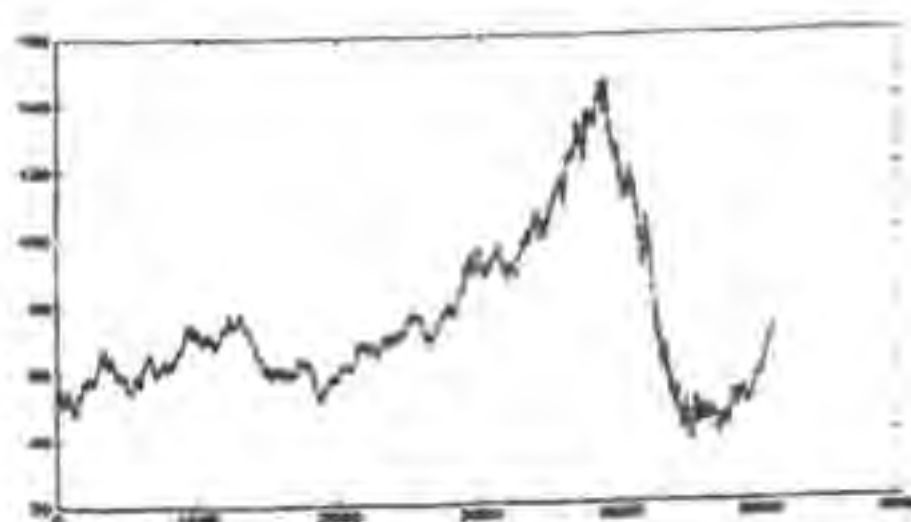


Рис. 7. 4-х годинний графік ф'ючерсу по Нафті (2005-2009 рр.)

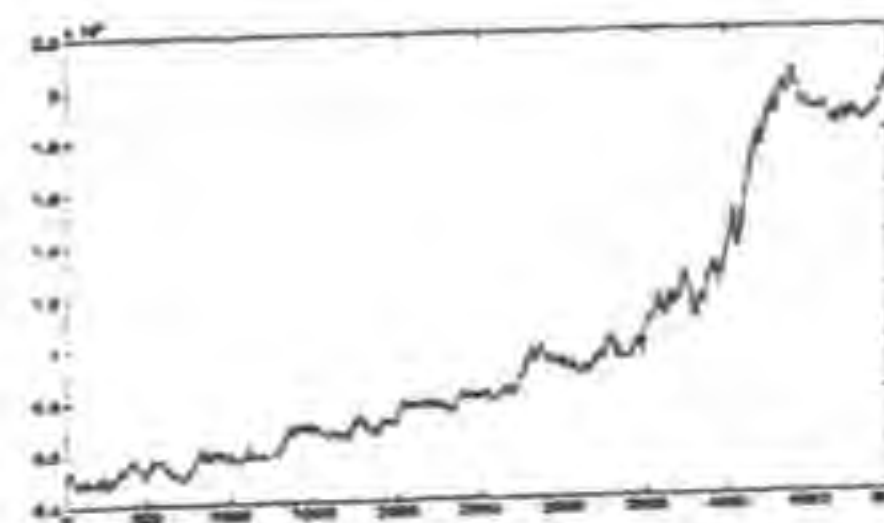


Рис. 8. Прибуток по Нафті



Рис. 10. 15-ти хвилинний графік ф'ючерсу на індекс RTS (2008-2009 рр.)

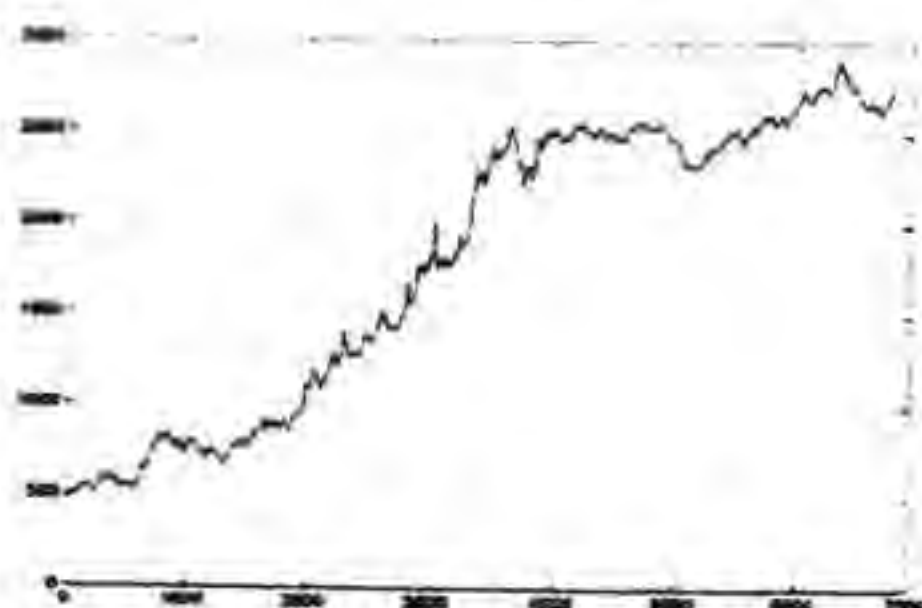


Рис. 11. Прибуток по індексу RTS

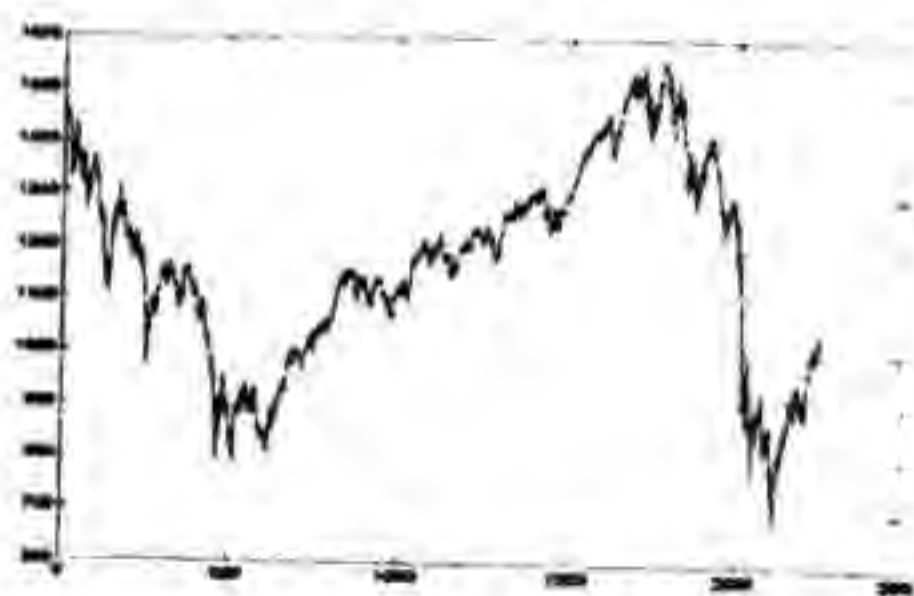


Рис. 12. Денний графік ф'ючерсу на індекс S&P500 (2001-2009 рр.)

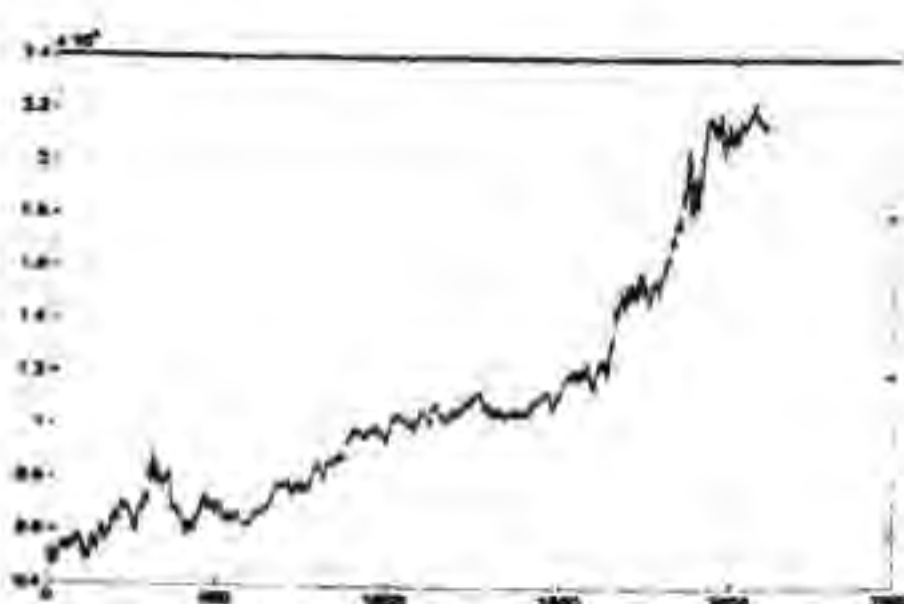


Рис. 13. Прибуток по індексу S&P500

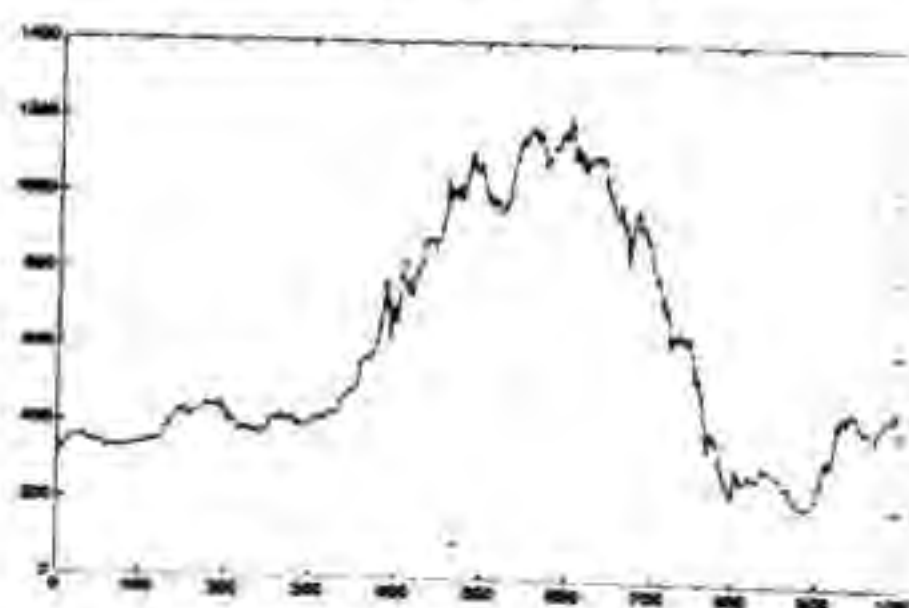


Рис. 14. Денний графік на індекс ПФТС (2005-2009 рр.)

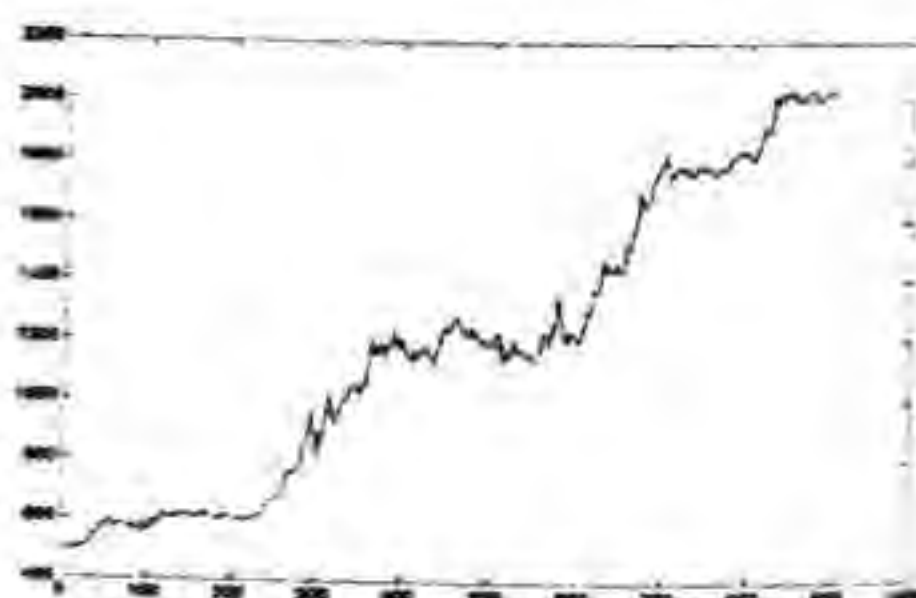


Рис. 15. Прибуток по індексу ПФТС

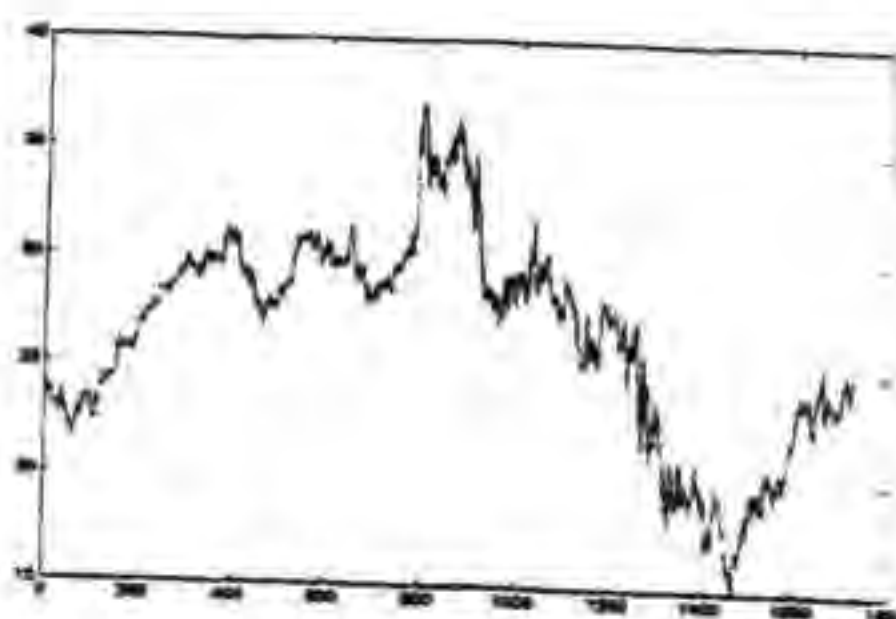


Рис. 16. Денний графік CFD на акції Microsoft Corp. (2006-2009 рр.)



Рис. 17. Прибуток по акції Microsoft Corp.

Отримані результати наведені у табл.1. З аналізу результатів наведених в таблиці випливає, що найкраща прибутковість

досягається на товарних та фондових ринках. Пов'язано це з тим, що вони менш волатильні. Але як бачимо, й валютні

інструменті також дають стабільний лінійно зростаючий прибуток. Це свідчить про те, що

розроблена система може з успіхом працювати на будь-якому ринку.

Таблиця 1. Результати роботи системи

№	Інструмент	Період	TF	Початковий депозит	Загальний прибуток	Максимальні втрати	Кількість угод	Прибуткові угоди	Знаходження на ринку, %	Середня кількість угод/рік	Середня річна прибутковість*
1	EURUSD	1994-2009	W1	50000	109800	15980	330	166	93%	24	14.72%
2	AUDUSD	1997-2009	W1	50000	91420	9190	265	170	42%	18	19.90%
3	Соеві боби	2007-2009	H4	50000	142350	27950	40	19	88%	16	61.12%
4	Нафта	2005-2009	H4	50000	150490	23720	78	32	81%	26	63.44%
5	PTC	2008-2009	M15	50000	225400	33600	35	19	93%	23	134.17%
6	SP500	2001-2009	D1	50000	162990	31989	795	481	98%	94	17.98%
7	ПФТС	2005-2009	D1	50000	155410	15215	33	14	88%	9	76.61%
8	MICROSOFT	2006-2009	H4	50000	12630	2640	322	175	25%	38	42.21%

* - з використанням такого розміру коштів для виконання угоди, що максимальні витрати рівні 15000.
** - прибутки не капіталізуються.

Висновки

Результатом роботи стала розробка автоматизованої системи, яка базується на основі теорії нейронних мереж, технічного та дискримінантного аналізу. Вона є достатньо прибутковою, не зважаючи на те, що досліджувані дані, а саме послідовні комбінації японських свічок, на перший погляд, не мають ніякого зв'язку з прогнозуванням цін на ринку. Результати показують ефективність розробленої системи не лише на історичних даних, але й в реальній торгівлі для різних ринків. Досліджені моделі готові до використання в управлінні активами.

Список використаних джерел

1. А. Элдер. Основы биржевой торговли.
2. Бокс, Дженкинс. Анализ временных рядов и прогнозирование.
3. David R. Brillinger. Time Series. Data analysis and theory – 1975p.
4. Herbert A. Simon. Models of My Life – 1996p.
5. Dirk Emma Baestaens, Willem Max Van Den Bergh, Douglas Wood. Neural Network Solutions for Trading in Financial Markets – 1997p.
6. С. Терехов. Лекции по теории и приложениям нейронных сетей.
7. Steve Nison. Japanese Candlestick Charting Techniques. – 1997p.
8. Джон Дж. Мерфи. Технический анализ фьючерсных рынков. – М. 1998p.

Надійшла до редколегії 6.10.09

УДК 517.962.22; 519.246.2

Умеров О.С., аспірант

Оцінка наближених методів вибору оптимального спостерігача в задачах гарантованого оцінювання розв'язків еліптичних рівнянь.

Розглядаються задачі вибору оптимально спостерігача в задачах мінімаксового оцінювання розв'язків варіаційних рівнянь в спеціальних гільбертових просторах. Приводяться наближені методи: скінчених різниць, скінчених різниць з поправкою Фока, скінчених елементів, Рітца, Гальоркіна, проекції градієнта та вивчається їх оцінка якості.

Ключові слова: оптимальний спостерігач, мінімаксне оцінювання, гільбертові простори, наближені методи.

E-mail: osmansab@gmail.com

Статтю представив д.т.н., проф. Акіменко В.В.

Вступ

Розвиток сучасної науки і техніки потребує нові більш швидкі та точніші методи та алгоритми розв'язування проблем. Серед них значне місце займають задачі оптимізації для систем диференціальних рівнянь, які виникають при моделюванні фізичних, хімічних, біологічних, економічних, екологічних та інших процесів, де стан системи задається функцією декількох змінних, яка є розв'язком крайової задачі [5]. У випадку коли потрібно оцінити стан системи за неповними спостереженнями такі методи та алгоритми стають більш актуальними.

При математичній постановці таких задач виникають такі питання, як: існування оптимального керування при певних початкових умовах та обмежень на саму задачу; збіжність методу знаходження невідомих параметрів, які мінімізують середньоквадратичну похибку мінімаксового оцінювання функціоналів від розв'язків.

Рішення питання збіжності послідовності наближених рішень не зустрічає особливих труднощів [2], проблема оцінки похибки більш тонка [6]. Таким чином, основне питання складас в тому, щоб розробити ефективні методи та алгоритми мінімізації середньоквадратичної похибки.

O. S. Umerov, PhD student

Estimation of approximate methods of choosing of optimal observer in the tasks of guaranteed evaluation of elliptic equations solutions.

The problems of choosing of optimal observer in the tasks of minimax evaluation of variation equations solutions in Hilbert space are considered. Approximate methods are given. finite differences, finite differences with Fock's correlation, finite elements, Ritz, Galerkin, gradient projection and quality, assessment is studied.

The estimator is implemented as a software package for computer algebra system Mathematica 7.

Key Words: optimal observer, minimax evaluation, Hilbert space, approximate methods.

Постановка задачі

Нехай спостерігається вектор у гільбертового простору H вигляду

$$y = C(\lambda)\varphi + \xi, \quad (1)$$

де $C(\lambda) \in L(L_2(G), H)$ - лінійний неперервний оператор з невідомим параметром λ , причому $\|\lambda\| \leq q_0$, ξ - детермінована похибка вимірювання $M(Q_2\xi, \xi) \leq 1$, функція $\varphi(x) \in W^1(G)$ є розв'язком рівняння

$$a(\varphi, \psi) = (f, \psi), \quad \forall \psi \in W^1(G), \quad (2)$$

$f \in L_2(G)$ - невідомий вектор з гільбертового простору H ($(Q_1 f, f) \leq 1$, $Q_1, Q_2 \in L(H, H)$), де $L(H, H)$ - простір невід'ємних, симетричних та обмежених операторів, для яких існують обернені оператори, $a(\varphi, \psi)$ - білінійна форма, яка має вираз [3, с. 8]

$$a(\varphi, \psi) = \sum_{i,j=1}^n \int_G a_{ij}(x) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_j} dx + \int_G a_0(x) \varphi(x) \psi(x) dx, \quad (3)$$

G - обмежена область у просторі R^n із кусково-гладкою границею Γ , $a_{ij}(x), a_0(x) \in L^\infty(G)$ ($i, j = \overline{1, n}$) - вимірні майже всюди обмежені функції, причому $a_0(x)$ - майже всюди

невід'ємне, $a_{ij}(x) = a_{ji}(x)$ та коефіцієнти $a_{ij}(x)$ задовольняють умові еліптичності, тобто існує $\alpha > 0$ таке, що

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \eta_i \eta_j \geq \alpha \left(\sum_{i=1}^n \eta_i^2 \right), \quad \forall \eta = (\eta_1, \dots, \eta_n). \quad (4)$$

Основна частина.

Припустимо, що дано множини F_1, F_2 , яким належать вектор f і похибка вимірювання ξ відповідно. Причому F_1 обмежена у просторі H і симетрична відносно нулю, тобто, якщо $f \in F_1$, то $-f \in F_1, \forall f \in F_1$.

Будемо шукати оцінку лінійних функціоналів

$$l(\varphi) = \int_G l(x) \varphi(x) dx,$$

де $l(\varphi) \in L_2(G)$, у вигляді

$$\hat{l}(\varphi) = (u, y) + d,$$

де $u \in H, d$ – деяке число. При даній оцінці $\hat{l}(\varphi)$ величина

$$J(u, d) = \sup_{F_1, F_2} M[l(\varphi) - \hat{l}(\varphi)]^2, \quad (5)$$

є максимальною середньоквадратичною похибкою. Нехай $\hat{u}$ та $\hat{d}$ знаходяться з умови

$$J(u, d) \rightarrow \inf_{u, d}.$$

Тоді $\hat{u}$ називають оптимальною оцінкою задачі керування (1), (2). Згідно з теоремою [4, с. 40] існує єдиний вектор $\hat{u}$.

Уведемо функцію $z(x)$, як розв'язок рівняння

$$a(\psi_1, z) = l(\psi_1) - (u, C(\lambda)\psi_1) = L(\psi_1), \quad \forall \psi_1 \in W^1(G). \quad (6)$$

Функціонал $L(\psi_1)$ – лінійно неперервний тому, що $|L(\psi_1)| \leq c_1 \|\psi_1\|$, де c_1 – константа.

Нехай $\psi_1 = \varphi$, тоді

$$l(\varphi) = l(\varphi) - \hat{l}(\varphi) = l(\varphi) - (u, y) - d = l(\varphi) - (u, c\varphi) - (u, \xi) - d = a(\varphi, z) - (u, \xi) - d.$$

Нехай в рівнянні (2) $\psi = z$, тоді

$$l(\varphi) = (f, z) - (u, \xi) - d.$$

$$M[l(\varphi) - \hat{l}(\varphi)]^2 = [(f, z) - d]^2 + M(u, \xi)^2.$$

Значить,

$$\sup_{F_1, F_2} M[l(\varphi) - \hat{l}(\varphi)]^2 = \sup_{F_1} [(f, z) - d]^2 +$$

$$+ \sup_{F_2} [M(u, \xi)^2].$$

Зауважимо, що, оскільки множина F_1 симетрична відносно нуля, то

$$\sup_{F_1} [(f, z) - d]^2 = \sup_{F_1} [(f, z) + |d|]^2.$$

Звідки випливає, що $\hat{d} = 0$. Надалі нам знадобиться лема.

Лема. Нехай H – деякий гільбертів простір і $R \in L(H, H)$. Тоді має місце нерівність

$$(x, y) \leq (R^{-1}x, x)(Ry, y). \quad (7)$$

Доведення даної леми наведено у [3, с. 58].

Згідно з леми має місце такі нерівності

$$(u, \xi)^2 \leq (Q_2^{-1}u, u)(Q_2\xi, \xi),$$

$$(f, z)^2 \leq (Q_1^{-1}z, z)(Q_1f, f).$$

Звідки випливає, що

$$\sup_{F_2} M(u, \xi)^2 \leq (Q_2^{-1}u, u),$$

$$\sup_{F_1} (f, z)^2 \leq (Q_1^{-1}z, z).$$

Таким чином

$$J(u, 0) = (Q_1^{-1}z, z) + (Q_2^{-1}u, u).$$

Оскільки функціонал $J(u, 0)$ строго опуклий і напівноперервний знизу, причому $J(u, 0) \rightarrow \infty$ при $\|u\| \rightarrow \infty$, то існує єдиний вектор $\hat{u}$, на якому досягається мінімум функціонала $J(u, 0)$ [3, с. 40].

Позначимо $J(u) = J(u, 0)$.

Якщо $\hat{u}$ рішення задачі (1), (2), то диференціал Гато функціонала $J(u)$ в околі екстремальної точки $\hat{u}$, дорівнює нулю [3, с. 25], тобто

$$DJ(\hat{u}, h) \equiv 0, \quad \forall h = (h_1, h_2) \in H. \quad (8)$$

Згідно з теоремою про повний диференціал [2, с. 24], одержуємо

$$DJ(\hat{u}, h) = J_z(\hat{u})h_1 + J_u(\hat{u})h_2,$$

$$\forall h = (h_1, h_2) \in H,$$

де

$$\begin{aligned} J_z(\hat{u})h_1 &= \left. \frac{\partial J}{\partial \tau} (z + \tau h_1) \right|_{\tau=0} = \\ &= \left. \frac{\partial J}{\partial \tau} \left(Q_1^{-1}(z + \tau h_1), z + \tau h_1 \right) \right|_{\tau=0} = \\ &= \left. \frac{\partial J}{\partial \tau} \left(Q_1^{-1}(z, z) + 2\tau(Q_1^{-1}z, h_1) + \tau^2(Q_1^{-1}h_1, h_1) \right) \right|_{\tau=0} = \end{aligned}$$

$$= 2(Q_1^{-1}\hat{z}, h_1),$$

тут $\hat{z}$ – рішення рівняння (6) при $u = \hat{u}$.

Таким же чином, одержимо

$$J_u(\hat{u})h_2 = 2(Q_2^{-1}\hat{u}, h_2),$$

$$DJ(\hat{u}, h) = 2(Q_1^{-1}\hat{z}, h_1) + 2(Q_2^{-1}\hat{u}, h_2).$$

Уведемо функцію $p(x)$, як розв'язок рівняння

$$a(\psi_2, p) = (Q_1^{-1}\hat{z}, \psi_2), \quad \forall \psi_2 \in W^1(G). \quad (9)$$

Тоді з рівняння (6) при $z = h_1, u = h_2$ одержимо

$$a(\psi_1, h_1) = -(h_2, C(\lambda)\psi_1), \quad \forall \psi_1 \in W^1(G). \quad (10)$$

Нехай $\psi_1 = p(x)$, то рівняння (10) буде мати вигляд

$$a(p, h_1) = -(h_2, C(\lambda)p).$$

Таким чином одержимо

$$DJ(\hat{u}, h) = -2(h_2, C(\lambda)p) + 2(Q_2^{-1}\hat{u}, h_2) \equiv 0,$$

$$Q_2^{-1}\hat{u} = C(\lambda)p,$$

$$\hat{u} = Q_2 C(\lambda)p. \quad (11)$$

Далі будемо оцінювати параметр λ та її максимальну середньо квадратичну похибку у вигляді

$$\delta^2 = l(p). \quad (12)$$

Для того, щоб оцінювати параметр λ , треба $\min_{\lambda} l(p)$, де $p(x)$ знаходиться з системи рівнянь

$$\begin{cases} a(\psi_1, z) = l(\psi_1) - (\hat{u}, C(\lambda)\psi_1), \\ a(\psi_2, p) = (Q_1^{-1}\hat{z}, \psi_2), \quad \forall \psi_1, \psi_2 \in W^1(G) \\ \hat{u} = Q_2 C(\lambda)p. \end{cases} \quad (13)$$

Алгоритм розв'язування задачі:

1. Виберемо ε - оцінку похибки методу.
2. Задається нульове наближення $C^0(\lambda)$ (любє значення, яке відповідає умові задачі).
3. Визначається $p_0(x)$ із системи (13) одним з наближених методів (наприклад, методом скінчених елементів, Рітца, Гальоркіна та інших).
4. Оцінюється параметр $C^1(\lambda)$ для, якого треба $\min_{\lambda} l(p)$ відповідним методом (наприклад, методом проекції градієнта).
5. Алгоритм працює поки не буде виконуватись умова $\|C^{k+1}(\lambda) - C^k(\lambda)\| \leq \varepsilon$, де k номер ітерації.

Приклад.

Нехай спостерігається значення величин y_k ($k = \overline{1, N}$), $N = 10$ з $G = \{x : x \in [0, 1]\}$, які мають вигляд

$$y_k = \int_0^1 \lambda(x) \varphi(x) dx + \xi_k, \quad (14)$$

де $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ - детермінована похибка вимірювання $M(Q_2 \xi, \xi) \leq 1$, $Q_2 = 1$, $\|\lambda(x)\| \leq 1$, функція $\varphi(x)$ є розв'язком крайової задачі

$$\varphi''(x) = f(x), \quad x \in G, \quad \varphi|_F = 0, \quad (15)$$

де f - невідомий вектор, який задовольняє умові $(Q_1 f, f) \leq 1$, $Q_1 = 1$. Нехай, також $l(x) = 1 - x$. Потрібно знайти функцію $\hat{\lambda}(x)$, яка мінімізує середньоквадратичну похибку мінімаксного оцінювання лінійного функціонала від розв'язку (15).

Таким чином, підставляючи ці дані в систему (13) та спрощуючи, одержимо наступну крайову задачу

$$Q_1 p^{(IV)}(x) = l(x) - \lambda(x)^2 Q_2 p(x), \quad (16)$$

$$p(0) = p(1) = 0, \quad p''(0) = p''(1) = 0.$$

Далі потрібно мінімізувати

$$l(p) = \int_0^1 l(x) p(x) dx \text{ по } \lambda(x).$$

Для розв'язання задачі (16), при заданій точності $\varepsilon = 10^{-4}$, використовувалися такі наближенні методи: скінчених різниць, скінчених різниць з поправкою Фока, скінчених елементів, Рітца та Гальоркіна. Методи з використанням різницевого схем розглядаються у випадку $n = 6$ узлів.

Для знаходження екстремуму був застосований метод проекції градієнта при $\lambda_0 = 1 + x$. Нижче вказана оцінка якості використання метод проекції градієнта з кожним методом зазначеним у таблиці (табл. 1) для знаходження оптимальної функції $\hat{\lambda}(x)$.

Кількість ітерацій вказує на число проходження алгоритму, для знаходження оптимальної функції $\hat{\lambda}(x)$, кожен раз при наступному λ_i . Усі розрахунки проводилися в системі *Mathematica 7* на комп'ютері з двох-ядерним процесором Athlon 5200 та 2 Gb оперативною пам'яттю.

Таблиця 1 Оцінка методів

Назва наближеного методу	Кількість ітерацій	Час (сек.)
1.Скінчених різниць.	7	38.359
2.Скінчених різниць 3 поправкою Фока.	7	1.687
3.Скінчених елементів.	11	2.515
4.Рітца.	11	0.203
5.Гальоркіна.	11	0.125

На малюнку (рис. 1) зображено найгірший з наведених методів, метод скінчених різниць - проекція градієнта та (рис. 2) найкращий, метод Гальоркіна - проекція градієнта, для знаходження функції $\hat{\lambda}(x)$. Товстою рискою позначено оптимальна $\lambda(x)$. Критерієм якості методу є час знаходження оптимального $\hat{\lambda}(x)$.

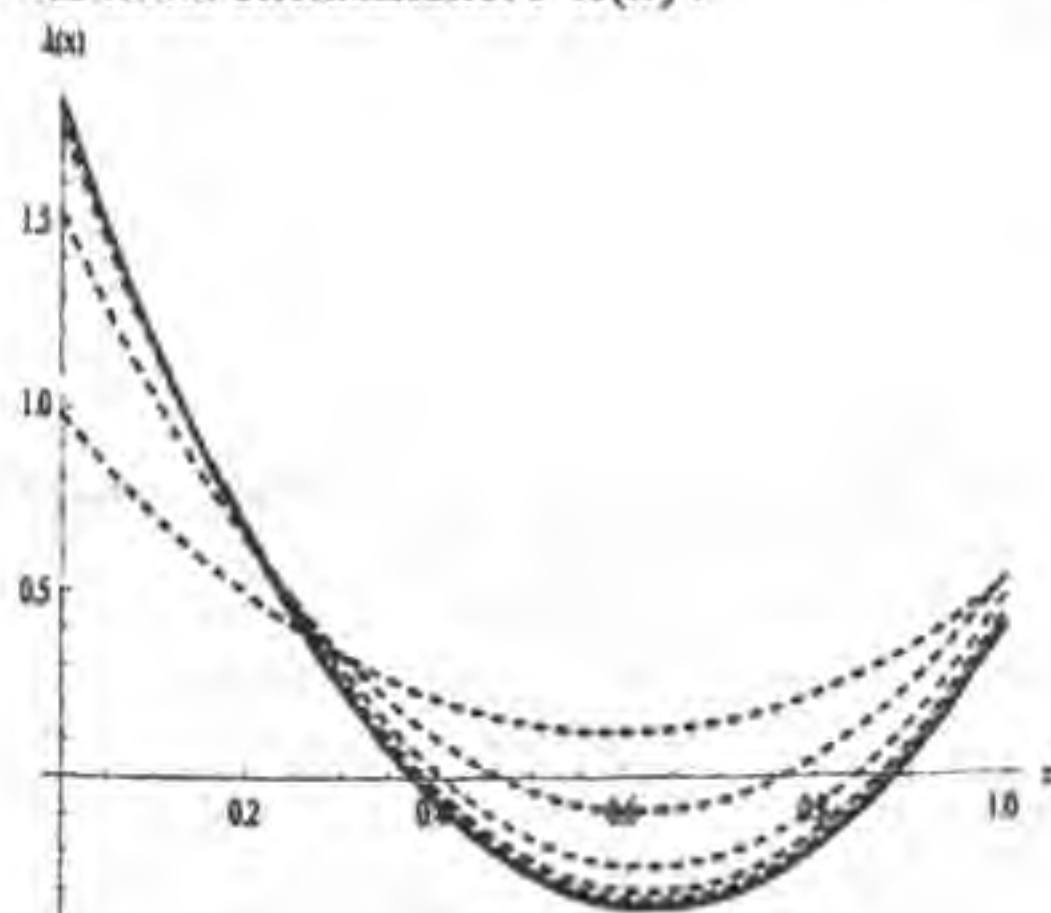


Рис. 1 Скінчених різниць

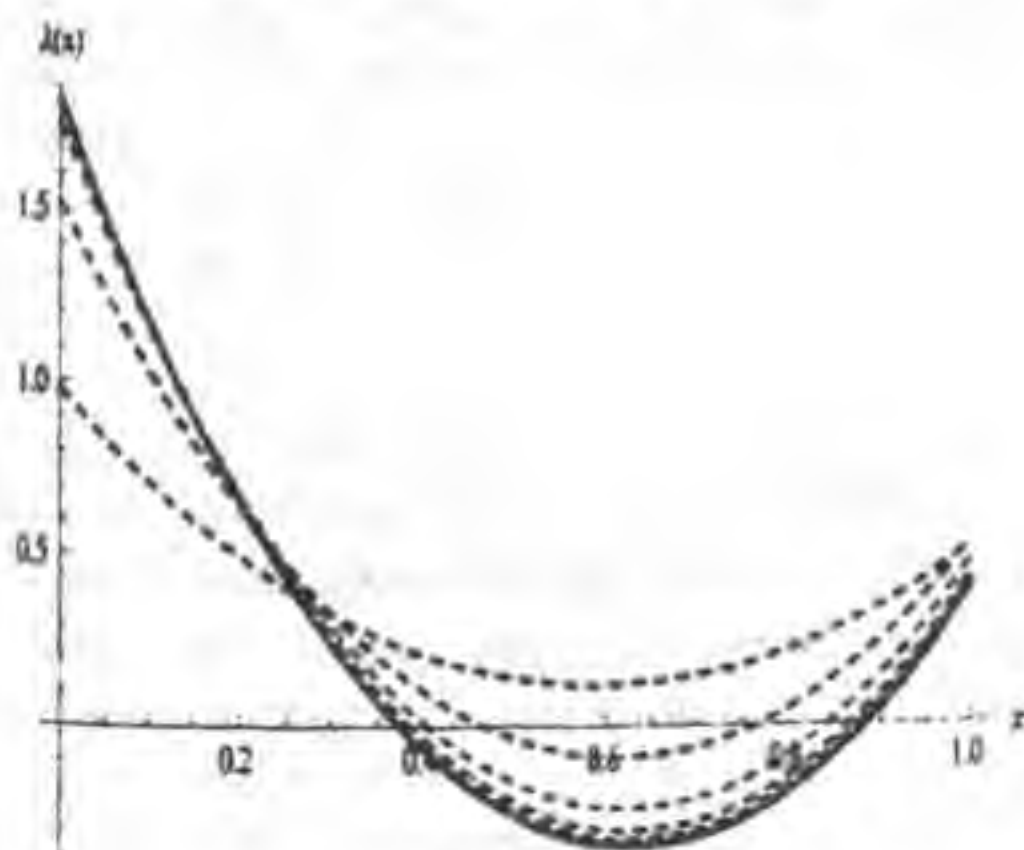


Рис. 2 Гальоркіна

Висновки.

Роблено програмний пакет для проведення процедури оцінювання швидкості наближених методів в середовищі Mathematica 7.

Показано оцінки збіжності чисельних методів.

Запропонований алгоритм знаходження параметра λ , який мінімізує середньоквадратичну похибку мінімаксного оцінювання лінійних функціоналів від розв'язків (2) є більш швидким при використанні методу Гальоркіна для рішення диференційного рівняння та методу проекції градієнта для знаходження оптимального λ .

Список використаних джерел

1. Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1988. – 552 с.
2. Ладыженская О.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа (2-е изд.). М.: Наука, 1973. 576 с.
3. Наконечний О. Г. Оптимальне керування та оцінювання в рівняннях із частинними похідними: Навчальний посібник. – К.: Видавничо – поліграфічний центр "Київський університет", 2004. – 103 с.
4. Обэн. Ж. П. Приближенное решение эллиптических краевых задач. М.: Издательство – "Мир", 1977. – 384 с.
5. Самойленко А. М., Ронто Н. И. Численно-аналитические методы исследования решений краевых задач. Киев: Наук, думка, 1985. – 224 с.
6. Демиденко С., Жук С., Наконечний О. До проблеми мінімаксного оцінювання розв'язків одновимірних крайових задач // Тавр.вісн.інформ. і мат. – 2007. – №1. С. 7-24.

Надійшла до редколегії 24.09.09

УДК 519.21

Усар І.Я., інж.
Протопоп Ю.О., студ.

Система з повторними викликами керована гістерезисною стратегією

В роботі розглядається система обслуговування з повторними викликами типу $M/M/1/\infty$, в якій інтенсивність вхідного потоку залежить від кількості джерел повторних викликів. Розглядається гістерезисна стратегія керування такою системою. Знайдено умови існування та явні формули для ергодичного розподілу процесу обслуговування. Вивчається задача оптимального вибору порогів перемикання інтенсивності вхідного потоку.

Ключові слова: стохастична система, повторні виклики, гістерезисна стратегія, стаціонарний режим, оптимізація.

*E-mail: usar@unicyb.kiev.ua

Статтю представив д. т. н. проф. Акіменко В.В.

Теорія систем з повторними викликами є одним із важливих розділів теорії масового обслуговування. Такі системи детально розглянуті в монографії [1]. Вони використовуються в проектуванні комп'ютерних мереж (локальних і глобальних), в системах мобільного зв'язку та телефонії, при моделюванні процесу посадки повітряних суден та ін. [1-4]. За останні десятиліття теорія систем масового обслуговування з повторними викликами набула значного розвитку.

В системах з повторними викликами вимога, яка надійшла в систему і застала всі обслуговуючі прилади зайнятими, не стає у чергу, як у системах з очікуванням, і не залишає систему назавжди, як у системах з втратами. Ця вимога через деякий випадковий час знову повторює спробу потрапити на обслуговування. Вважається, що вимога повторює спроби до тих пір, поки не надійде на обслуговування.

Системи з повторними викликами відрізняються алгоритмом управління процесом обслуговування та типом розподілів, що відповідають тривалості основних операцій при надходженні і обробці викликів. Розширення області застосувань приводить до ускладнення

Usar I.Ya.,
Protopop Yu.O.

Hysteresis strategy for retrial queueing system

The paper deals with $M/M/1/\infty$ -type retrial queueing system in which the intensivity of input flow depends on the number of sources of repeated calls. Hysteresis strategy for such system is considered. The existence conditions and explicit formulas for steady state distribution of service process are obtained. The optimal switching problem for intensivity of input flow is considered as well.

Key Words: queue, repeated calls, hysteresis strategy, stationary regime, optimization.

моделей і до пошуку нових методів дослідження процесу обробки викликів.

Математичні моделі цих систем дозволяють досліджувати інтегральні характеристики їх роботи, розв'язувати оптимізаційні задачі. Для ускладнених моделей актуальною є проблема пошуку методів розрахунку характеристик систем в умовах стаціонарного режиму функціонування.

Модель, яка розглядається в даній роботі, може бути описана наступним чином. На вхід обслуговуючого пристрою надходить пуассонівський потік вимог. Інтенсивність вхідного потоку не є сталою і залежить від числа джерел повторних вимог. Характер цієї залежності буде описано нижче. Якщо в момент надходження вимоги обслуговуючий пристрій вільний, то вимога обслуговується негайно і час обслуговування має показниковий розподіл з параметром μ . Якщо прилад зайнятий, то вимога не втрачається і через деякий проміжок часу, який має показниковий розподіл з параметром ν , повторює спробу потрапити на обслуговування. Така вимога стає джерелом повторних вимог. Вважається, що кожна вимога, яка стала джерелом повторних вимог, діє незалежно від

можемо вважати, що по відношенню до обслуговуючого пристрою всі вимоги діляться на дві групи: первинні, тобто ті, які надходять до системи вперше, та вторинні, які в момент першого приходу отримали відмову і стали джерелом повторних вимог.

Процес керування роботою нашої системи визначається на основі гістерезисної стратегії, яку можна описати наступним чином. Нехай $h_1 \leq h_2$ будуть два натуральні числа, які ми будемо називати порогами. Якщо кількість повторних викликів $j \leq h_1 - 1$, то система буде працювати в першому режимі і інтенсивність вхідного потоку дорівнює $\lambda_1(j)$. Якщо $j \geq h_2$, то в другому режимі з інтенсивністю вхідного потоку $\lambda_2(j)$. А якщо $h_1 \leq j < h_2$, то система зберігає той режим, в якому вона працювала в попередній момент часу. Клас порогових стратегій є підмножиною класу гістерезисних стратегій, який можна отримати при $h_1 = h_2$. Такі системи розглядалися в роботі [3].

Змінний характер інтенсивності вхідного потоку в моделях такого типу дає можливість ставити і розв'язувати для них оптимізаційні задачі.

Процес обслуговування будемо моделювати тривимірним процесом Маркова $Q(t) = (Q_1(t), Q_2(t), Q_3(t))$ з неперервним часом у фазовому просторі $S = \{0, 1\} \times \{0, 1, 2, \dots\} \times \{1, 2\}$, де $Q_1(t)$ – число зайнятих приладів у момент часу t , $Q_2(t)$ – число джерел повторних вимог, $Q_3(t)$ – режим роботи системи в момент часу t . Якщо $Q_3(t) = 1$, то система працює в першому режимі з інтенсивністю вхідного потоку $\lambda_1(j)$, якщо $Q_3(t) = 2$, то система працює у другому режимі з інтенсивністю вхідного потоку $\lambda_2(j)$. Інфінітезимальні характеристики $q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')}$ процесу $Q(t)$ визначаються наступним чином:

$$1) \text{ якщо } i = 0, j = 0, 1, \dots, h_2 - 1, r = 1, \text{ то}$$

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_1(j), & \text{при } (i', j', r') = (1, j, 1), \\ j\nu, & \text{при } (i', j', r') = (1, j-1, 1), \\ -(\lambda_1(j) + j\nu), & \text{при } (i', j', r') = (0, j, 1), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

$$2) \text{ якщо } i = 1, j = 0, 1, \dots, h_2 - 2, r = 1, \text{ то}$$

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_1(j), & \text{при } (i', j', r') = (1, j+1, 1), \\ \mu, & \text{при } (i', j', r') = (0, j, 1), \\ -(\lambda_1(j) + \mu), & \text{при } (i', j', r') = (1, j, 1), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

$$3) \text{ якщо } i = 1, j = h_2 - 1, r = 1, \text{ то}$$

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_1(h_2 - 1), & \text{при } (i', j', r') = (1, h_2, 2), \\ \mu, & \text{при } (i', j', r') = (0, h_2 - 1, 1), \\ -(\lambda_1(h_2 - 1) + \mu), & \text{при } (i', j', r') = (1, h_2 - 1, 1), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

$$4) \text{ якщо } i = 0, j = h_1 + 1, \dots, r = 2, \text{ то}$$

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_2(j), & \text{при } (i', j', r') = (1, j, 2), \\ j\nu, & \text{при } (i', j', r') = (1, j-1, 2), \\ -(\lambda_2(j) + j\nu), & \text{при } (i', j', r') = (0, j, 2), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

$$5) \text{ якщо } i = 1, j = h_1, \dots, r = 2, \text{ то}$$

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_2(j), & \text{при } (i', j', r') = (1, j+1, 2), \\ \mu, & \text{при } (i', j', r') = (0, j, 2), \\ -(\lambda_2(j) + \mu), & \text{при } (i', j', r') = (1, j, 2), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

$$6) \text{ якщо } i = 0, j = h_1, r = 2, \text{ то}$$

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_2(h_1), & \text{при } (i', j', r') = (1, h_1, 2), \\ h_1\nu, & \text{при } (i', j', r') = (1, h_1 - 1, 1), \\ -(\lambda_2(h_1) + h_1\nu), & \text{при } (i', j', r') = (0, h_1, 2), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

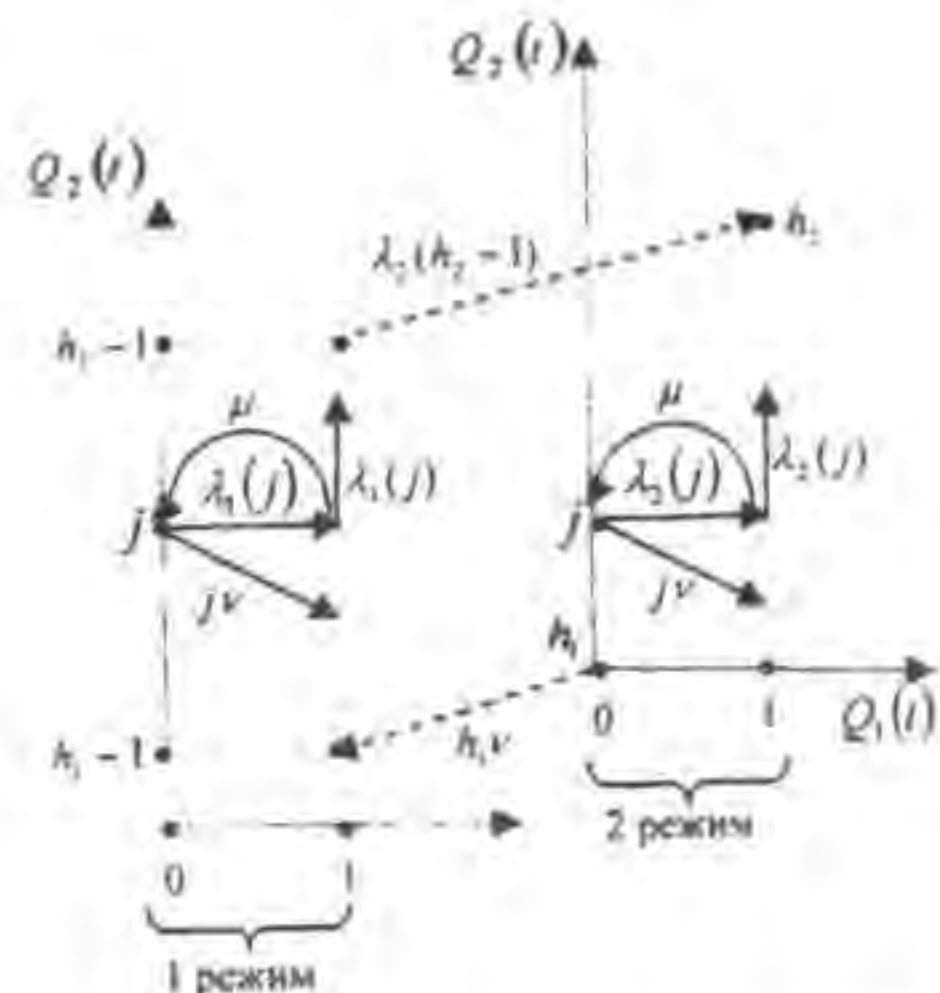


Рисунок 1. Діаграма переходів ланцюга Маркова $Q(t)$

Графічно стохастичну поведінку процесу $Q(t)$ можна подати за допомогою діаграми переходів, яка представлена на рисунку 1.

На цьому малюнку пунктирні стрілки означають ті переходи, які ведуть до зміни режимів.

З'ясуємо умови існування стаціонарного режиму для процесу $Q(t)$.

Лема. Нехай $\lambda_2 = \limsup_{j \rightarrow \infty} \lambda_2(j) < \infty$. Тоді при

$\frac{\lambda_2}{\mu} < 1$ існує ергодичний розподіл для процесу $Q(t)$.

Доведення.

Доведення цієї леми базується на застосуванні теореми Твіді ([1], стор. 97), якщо в якості тест-функції Ляпунова взяти функції системи:

$$\varphi(i, j, r) = ai + j + r, \quad (i, j, r) \in S.$$

де параметр "a" буде визначено пізніше.

Якщо ми покажемо, що параметр "a" можна вибрати так, щоб середній перенос для цих функцій, який визначається за формулою

$$y_{ijr} = \sum_{(i', j', r') \in S} q_{(i, j, r)}^{(i', j', r')} (\varphi(i', j', r') - \varphi(i, j, r)),$$

буде рівномірно менше нуля відносно (i, j, r) , за винятком, можливо, скінченної кількості точок (i, j, r) , то з цього буде впливати наша лема.

Якщо врахувати співвідношення для інтенсивностей переходів, які записані вище, то нам достатньо обмежитись випадками 4) та 5), оскільки в решті випадків число точок (i, j, r) є скінченним.

Розглянемо випадок 4). Маємо

$$A(h_1, h_2) = \begin{pmatrix} \beta_1(h_1) + h_1\nu & -(h_1 + 1)\nu & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\beta_1(h_1) & \beta_1(h_1 + 1) + (h_1 + 1)\nu & -(h_1 + 2)\nu & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\beta_1(h_1 + 1) & \beta_1(h_1 + 2) + (h_1 + 2)\nu & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\beta_1(h_1 + 2) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -(h_2 - 1)\nu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\beta_1(h_2 - 2) & \beta_1(h_2 - 1) + (h_2 - 1)\nu \end{pmatrix}$$

$$y_{ijr} = \sum_{(i', j', r') \in S} q_{(i, j, r)}^{(i', j', r')} (ai' + j' + r' - j - 2) =$$

$$= \lambda_2(j)(a + j + 2 - j - 2) + j\nu(a + j - 1 + 2 - j - 2) =$$

$$= \lambda_2(j)a + j\nu(a - 1), \quad i = 0, j = h_1 + 1, \dots, r = 2.$$

$$\text{Отже, } y_{ijr} \leq \lambda_2 a + j\nu(a - 1) < 0 \text{ для } a < \frac{j\nu}{j\nu + \lambda_2}$$

Аналогічно у випадку 5) маємо

$$y_{ijr} = \sum_{(i', j', r') \in S} q_{(i, j, r)}^{(i', j', r')} (ai' + j' + r' - a - j - 2) =$$

$$= \lambda_2(j)(a + j + 1 + 2 - a - j - 2) + \mu(j + 2 - a - j - 2) =$$

$$= \lambda_2(j) - a\mu, \quad i = 1, j = h_1, \dots, r = 2.$$

$$\text{Отже, } y_{ijr} \leq \lambda_2 - a\mu < 0, \text{ якщо } a > \frac{\lambda_2}{\mu}.$$

Оскільки за умовою леми $\frac{\lambda_2}{\mu} < 1$, то для будь-

якого $a \in \left(\frac{\lambda_2}{\mu}, 1\right)$ можна знайти $\varepsilon > 0$ таке, що

$y_{ijr} < -\varepsilon$ для всіх точок (i, j, r) за винятком, можливо, скінченної їх кількості. Лему доведено.

Позначимо

$$\pi_{ijr}^{(r)} = \lim_{t \rightarrow \infty} P(Q_1(t) = i, Q_2(t) = j, Q_3(t) = r) -$$

ергодичний розподіл нашої системи.

Введемо також наступні позначення:

$$\beta_1(j) = \frac{\lambda_1(j)(j\nu + \lambda_1(j))}{\mu};$$

$$\beta_1(j) = \prod_{k=0}^j \frac{\lambda_1(k)(k\nu + \lambda_1(k))}{\mu}.$$

$$\bar{1}_n(j) = \left(\underbrace{0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0}_n \right); \quad \bar{1}_n = \left(\begin{matrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{matrix} \right) \Bigg|_n.$$

$$d(j, h_1, h_2) = \bar{1}_{h_2-h_1}(j-h_1+1)A^{-1}(h_1, h_2)\bar{1}_{h_2-h_1}:$$

$$D(j, h_1, h_2) = \frac{B_2(j-1)}{B_2(h_1-1)\nu^j j!} + \frac{1}{\mu^j j! (h_1-1)!} \times$$

$$\times \sum_{l=h_1}^{j-1} \frac{\Pi(\lambda_1(l)-\lambda_2(l))(l\nu+\lambda_1(l)+\lambda_2(l))}{\nu^{l-h_1+1} j!} d(l, h_1, h_2) -$$

$$- \frac{d(j, h_1, h_2)}{\nu^{h_1-1} (h_1-1)!}, \quad h_1+1 \leq j \leq h_2-1.$$

Теорема. В умовах леми справедливі наступні формули для ергодичного розподілу:

$$\pi_{0,j}^{(1)} = \frac{B_1(j-1)}{\nu^j j!} \pi_{00}^{(1)}, \quad \pi_{1,j}^{(1)} = \frac{B_1(j)}{\nu^j j! \lambda_1(j)} \pi_{00}^{(1)}, \quad (1)$$

$$0 \leq j \leq h_1-1,$$

$$\pi_{0,j}^{(1)} = \frac{B_1(h_1-1)}{\nu^{h_1-1} (h_1-1)!} d(j, h_1, h_2) \pi_{00}^{(1)}, \quad (2)$$

$$\pi_{1,j}^{(1)} = \frac{B_1(h_1-1)(j\nu+\lambda_1(j))}{\nu^{h_1-1} (h_1-1)! \mu} d(j, h_1, h_2) \pi_{00}^{(1)}, \quad (3)$$

$$h_1 \leq j \leq h_2-1,$$

$$\pi_{0,j}^{(2)} = B_1(h_1-1) D(j, h_1, h_2) \pi_{00}^{(1)}, \quad (4)$$

$$\pi_{1,j}^{(2)} = \frac{B_1(h_1-1)(j\nu+\lambda_2(j))}{\mu} D(j, h_1, h_2) \pi_{00}^{(1)}, \quad (5)$$

$$h_1 \leq j \leq h_2-1,$$

$$\pi_{0,j}^{(2)} = \frac{B_1(h_1-1)B_2(j-1)(h_2-1)!}{\nu^{j-h_2+1} j! B_2(h_2-2)} D(h_2-1, h_1, h_2) \pi_{00}^{(1)}, \quad (6)$$

$$\pi_{1,j}^{(2)} = \frac{B_1(h_1-1)B_2(j)(h_2-1)!}{\nu^{j-h_2+1} j! \lambda_2(j) B_2(h_2-2)} D(h_2-1, h_1, h_2) \pi_{00}^{(1)}, \quad (7)$$

$$j = h_2, \dots, \infty,$$

де

$$\pi_{00}^{(1)} = \left\{ 1 + \sum_{j=0}^{h_1-2} \frac{B(j)[1+(j+1)\nu]}{\nu^{j+1} (j+1)!} + \frac{B_1(h_1-1)}{\nu^{h_1-1} (h_1-1)!} + \right.$$

$$+ \frac{B_1(h_1-1)}{\nu^{h_1-1} (h_1-1)!} \sum_{j=h_1}^{h_2-1} (\mu + j\nu + \lambda_1(j)) d(j, h_1, h_2) +$$

$$+ \frac{B_1(h_1-1)}{\mu} \sum_{j=h_1}^{h_2-1} (\mu + j\nu + \lambda_2(j)) D(j, h_1, h_2) +$$

$$+ \frac{B_1(h_1-1)(h_2-1)! D(h_2-1, h_1, h_2)}{\lambda_2(j) B_2(h_2-2)} \times$$

$$\times \sum_{j=h_2}^{\infty} \frac{B_2(j-1)\lambda_2(j) + B_2(j)}{\nu^{j-h_2+1} j!} \Bigg\}^{-1}. \quad (8)$$

Доведення:

Спочатку знайдемо формули для ергодичного розподілу в припущенні, що довжина черги повторних викликів є обмежена числом $N < \infty$ (при умові, що всі N місць зайнято, виклик губиться і не отримує обслуговування в системі). Потім в умовах леми перейдемо до границі $N \rightarrow \infty$.

Якщо $N < \infty$, то ергодичний розподіл для процесу $Q(t)$ завжди існує.

Перехідні ймовірності нашої системи співпадають з наведеними вище, крім 4), 5), які змінюються на

4*) якщо $i = 0, j = h_1+1, \dots, N, r = 2$, то

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_2(j), & \text{при } (i',j',r') = (1,j,2), \\ j\nu, & \text{при } (i',j',r') = (1,j-1,2), \\ -(\lambda_2(j) + j\nu), & \text{при } (i',j',r') = (0,j,2), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

5*) якщо $i = 1, j = h_1, \dots, N-1, r = 2$, то

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \lambda_2(j), & \text{при } (i',j',r') = (1,j+1,2), \\ \mu, & \text{при } (i',j',r') = (0,j,2), \\ -(\lambda_2(j) + \mu), & \text{при } (i',j',r') = (1,j,2), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

5**) якщо $i = 1, j = N, r = 2$, то

$$q_{(i,j,r)}^{(i',j',r')} = \begin{cases} \mu, & \text{при } (i',j',r') = (0,N,2), \\ -\mu, & \text{при } (i',j',r') = (1,N,2), \\ 0, & \text{в інших випадках} \end{cases}$$

Запишемо рівняння для стаціонарних ймовірностей системи, використовуючи теорему про рівність потоків ймовірностей через замкнений контур ([3] стор.49). При цьому окремо розглянемо три області: Область, де діє лише перший режим, тобто $0 \leq j \leq h_1-1$; область де діє лише другий режим, тобто $h_2 \leq j \leq N$; і

область, де можуть діяти обидва режими, тобто $h_1 \leq j \leq h_2 - 1$. Маємо наступні рівняння:

$$\pi_{0,j}^{(1)}(j\nu + \lambda_1(j)) = \pi_{1,j}^{(1)}\mu, \quad 0 \leq j \leq h_1 - 1, \quad (9)$$

$$\pi_{0,j+1}^{(1)}(j+1)\nu = \pi_{1,j}^{(1)}\lambda_1(j), \quad 0 \leq j \leq h_1 - 2, \quad (10)$$

$$\pi_{0,j}^{(2)}(j\nu + \lambda_2(j)) = \pi_{1,j}^{(2)}\mu, \quad h_2 - 1 \leq j \leq N, \quad (11)$$

$$\pi_{0,j+1}^{(2)}(j+1)\nu = \pi_{1,j}^{(2)}\lambda_2(j), \quad h_2 - 1 \leq j \leq N - 1, \quad (12)$$

Для області, де діють обидва режими, маємо наступні рівняння:

$$A(h_1, h_2)\pi^{(1)}(h_1, h_2) = \pi_{0,h_1-1}^{(1)}\beta(h_1 - 1)\bar{1}_{h_2-h_1}, \quad (13)$$

де

$$\pi^{(1)}(h_1, h_2) = \begin{pmatrix} \pi_{0,h_1}^{(1)} \\ \pi_{0,h_1+1}^{(1)} \\ \dots \\ \pi_{0,h_2-1}^{(1)} \end{pmatrix}.$$

$$\pi_{0,j}^{(1)}(j\nu + \lambda_1(j)) = \pi_{1,j}^{(1)}\mu, \quad h_1 - 1 \leq j \leq h_2 - 1, \quad (14)$$

З (13), (14) ми можемо знайти $\pi_{0,h_1}^{(1)}$, $\pi_{1,j}^{(1)}$, $h_1 \leq j \leq h_2 - 1$ через ймовірність $\pi_{0,h_1-1}^{(1)}$, яка в свою чергу, з формул (9), (10) записується через $\pi_{0,0}^{(1)}$. Для того, щоб знайти $\pi_{0,j}^{(2)}$, $\pi_{1,j}^{(2)}$, використаємо наступні рівняння:

$$(\pi_{0,j+1}^{(1)} + \pi_{0,j+1}^{(2)})(j+1)\nu = \pi_{1,j}^{(1)}\lambda_1(j) + \pi_{1,j}^{(2)}\lambda_2(j), \quad (15)$$

$$(\pi_{0,h_1}^{(1)} + \pi_{0,h_1}^{(2)})h_1\nu = \pi_{1,h_1-1}^{(1)}\lambda_1(h_1 - 1), \quad (16)$$

$$h_1 \leq j \leq h_2 - 2.$$

Тепер з (9)-(16) маємо формули (1)-(7).

Сталу $\pi_{0,0}^{(1)}$ знаходимо з умови нормування:

$$\begin{aligned} \pi_{0,0}^{(1)} = & \left\{ 1 + \sum_{j=0}^{h_1-2} \frac{B(j)[1 + (j+1)\mu]}{\nu^{j+1}(j+1)!} + \frac{B_1(h_1-1)}{\nu^{h_1-1}(h_1-1)!} + \right. \\ & + \frac{B_1(h_1-1)}{\nu^{h_1-1}(h_1-1)!} \sum_{j=h_1}^{h_2-1} (\mu + j\nu + \lambda_1(j))d(j, h_1, h_2) + \\ & + \frac{B_1(h_1-1)}{\mu} \sum_{j=h_1}^{h_2-1} (\mu + j\nu + \lambda_2(j))D(j, h_1, h_2) + \end{aligned}$$

$$\frac{B_1(h_1-1)(h_2-1)!D(h_2-1, h_1, h_2)}{\lambda_2(j)B_2(h_2-2)} \times$$

$$\times \left. \sum_{j=h_2}^{\infty} \frac{B_2(j-1)\lambda_2(j) + B_2(j)}{\nu^{j-h_2+1}j!} \right\}^{-1}.$$

Це доводить нашу теорему для $N < \infty$. Якщо тепер $N \rightarrow \infty$, то отримаємо потрібний нам результат, оскільки легко показати, що в наших умовах

$$\sum_{j=h_2}^{\infty} \frac{B_2(j-1)\lambda_2(j) + B_2(j)}{\nu^{j-h_2+1}j!} < \infty. \quad (17)$$

Дійсно, обмежимося випадком ряду

$$\sum_{j=h_2}^{\infty} \frac{B_2(j-1)\lambda_2(j)}{\nu^{j-h_2+1}j!} < \infty. \quad (18)$$

Використовуючи критерій збіжності ряду $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+1}}{a_n} < 1$, де a_n - загальний член ряду, маємо

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{B_2(j)\lambda_2(j+1)\nu^{j-h_2+1}j!}{B_2(j-1)\lambda_2(j)\nu^{j-h_2+2}(j+1)!} = \\ = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_2(j)(j\nu + \lambda_2(j))\lambda_2(j+1)}{\mu\lambda_2(j)\nu(j+1)} = \\ = \frac{1}{\mu} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(j\nu + \lambda_2(j))\lambda_2(j+1)}{\nu(j+1)} \leq \sup \frac{\lambda_2(j+1)}{\mu} < 1 \end{aligned}$$

і отже ряд (18) збігається. Аналогічно можна показати, що

$$\sum_{j=h_2}^{\infty} \frac{B_2(j)}{\nu^{j-h_2+1}j!} < \infty,$$

а тому (17) доведено.

Теорему доведено.

Розглянемо застосування доведеної теореми для розв'язку наступної оптимізаційної задачі.

Нехай

$S_1(t, h_1, h_2)$ - число викликів, обслуговування яких завершено в системі за час t ;

$S_2(t, h_1, h_2)$ - число викликів, які отримали відмову в обслуговуванні і стали повторними викликами;

$S_3(t, h_1, h_2)$ - число перемикань інтенсивності вхідного потоку.

Якщо існують границі $\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1} S_i(t, h_1, h_2)$, то будемо позначати їх через $S_i(h_1, h_2)$, $i = 1, 2, 3$.

Розглянемо оптимізаційну задачу:

$$W(h_1, h_2) = C_1 S_1(h_1, h_2) - C_2 S_2(h_1, h_2) - C_3 S_3(h_1, h_2) \rightarrow \max, \quad (19)$$

де C_1 - прибуток, пов'язаний з обслуговуванням одного виклику;

C_2 - штраф за відмову в обслуговуванні;

C_3 - штраф за перемикання інтенсивності вхідного потоку.

Розв'язком задачі (19) є такі пороги h_1 і h_2 , які максимізують середній прибуток від роботи системи. Подібні оптимізаційні задачі для систем з повторними викликами розглядалися в роботах [6], [7].

В умовах існування стаціонарного режиму (умови леми) граничні функціонали $S_i(h_1, h_2)$, $i = 1, 2, 3$, теж існують і можуть бути виписані через стаціонарні імовірності π_{ijr} , $(i, j, r) \in S$.

$$S_1(H) = \mu \sum_{i=0}^{h_1-1} \pi_{1i}^{(1)} + \mu \sum_{i=h_1}^{\infty} \pi_{1i}^{(2)},$$

$$S_2(H) = \sum_{j=0}^{h_2-1} \lambda_1(j) \pi_{1j}^{(1)} + \sum_{j=h_2}^{\infty} \lambda_2(j) \pi_{1j}^{(2)},$$

$$S_3(H) = \lambda_1(h_2 - 1) \pi_{1/h_2-1}^{(1)} + h_1 \nu \pi_{0h_1}^{(2)}.$$

Разом з результатом теореми вони дають алгоритм розв'язку задачі (19).

Отже, в даній роботі вводиться клас процесів міграції, за допомогою якого описується процес обслуговування у системах з повторними

викликами. Спосіб надходження і обслуговування вимог обирається за рахунок керуючих параметрів міграції. Керування полягає у зміні інтенсивності вхідного потоку на основі гістерезисної стратегії. Отримані результати дають зручні формули, які можуть бути ефективно використані для розв'язку оптимізаційних задач.

Список використаних джерел

1. *Falin G.I., Templeton J.G.C.* Retrial queues. - London Chapman & Hall, 1997. - 331 p.
2. *Бочаров П.П., Печинкин А.В.* Теория массового обслуживания. - М.: РУДН, 1995. - 529 с.
3. *Уолленд Дж.* Введение в теорию массового обслуживания. - М.: Мир, 1993. - 336 с.
4. *Anisimov V.V., Artalejo J.R.* Analysis of Markov multiserver retrial queues with negative arrivals // *Queueing Systems*. - 2001. - Vol.39. - P. 157-182.
5. *Є.О. Лебедев, І.Я. Усач* Про системи з повторними викликами та керованим вхідним потоком // *Доповіді національної академії наук України*. - 2009. - №5. - С. 52-59.
6. *В.И. Клименок* Оптимизация динамического управления режимом работы информационно-вычислительных систем с повторными вызовами // *Автоматика и вычислительная техника*. - 1990. - № 1. - С. 25-30.
7. *А.Н. Душин, В.И. Клименок* Оптимизация динамического управления входной нагрузкой в узле информационно-вычислительной сети // *Автоматика и вычислительная техника*. - 1991. - № 2. - С. 25-31.

Надійшло до редколегії 29.09.09

УДК 519.21

Чечельницький О.А., к. ф.-м. н., доц.

Про дифузійну апроксимацію мережевої моделі з неординарним входним потоком вимог

Досліджено режим великого навантаження мережевої моделі з неординарним входним потоком вимог. Отримана дифузійна апроксимація процесу обслуговування.

Ключові слова: мережева модель обслуговування, неординарний входний потік, слабка збіжність, дифузійна апроксимація.

Статтю представив д.т.н., професор Акіменко В.В.

Розглянемо мережеву модель, яка складається з двох вузлів. Перший вузол моделі функціонує як система обслуговування з повторними викликами типу $\langle M_Q / M_Q / 1 / w.r. \rangle$, а другий є системою обслуговування типу $\langle M_Q / M_Q / 1 \rangle$. Вимоги до нашої моделі на інтервалі $[t, t+h]$ надходять парами одна на перший вузол і одна на другий з ймовірністю $\lambda(a_1, a_2)h + o(h)$, де змінні a_1 та a_2 описують число вимог у першому та другому вузлі відповідно. Вимога з зовнішнього потоку, яка надійшла до вузла $\langle M_Q / M_Q / 1 / w.r. \rangle$ і застала обслуговуючий прилад зайнятим, стає в чергу і утворює незалежний пуассонівський потік повторних запитів з параметром $\nu(a_1) > 0$. Якщо ж прилад є вільним, він обслуговує вимогу, незалежно від того, звідки б вона не надійшла, інтервал часу, який має показниковий розподіл з параметром $\mu_1 > 0$. Другий вузол складається з одного приладу, який обслуговує вимоги з

Chechelnitsky O.A.

On the diffusion approximation of the network model with the nonordinary input flow of customers.

The heavy traffic regime of the network model with the nonordinary input flow of customers was investigated. The diffusion approximation for the service process was obtained.

Key Words: network model, nonordinary input flow, weak convergence, diffusion approximation

зовнішнього потоку випадковий інтервал часу з показниковим розподілом з параметром $\mu_2(a_1, a_2) > 0$. Позначимо через $X_1(t)$ число вимог у першому вузлі, а через $X_2(t)$ - число вимог у другому вузлі.

Припустимо, що характеристики моделі залежать від параметра n (параметр серії):

$$\lambda^{(n)}(a_1, a_2) = \lambda(n^{-1}a_1, n^{-1}a_2),$$

$$\mu_2^{(n)}(a_1, a_2) = \mu_2(n^{-1}a_1, n^{-1}a_2)$$

$$\nu^{(n)}(a_1) = n^{-1}\nu(n^{-1}a_1),$$

а процеси $X_1(t)$ та $X_2(t)$ розглянемо у змінному масштабі часу nt : $X_1^{(n)}(t) = X_1(nt)$, $X_2^{(n)}(t) = X_2(nt)$, $X^{(n)}(t) = (X_1^{(n)}(t), X_2^{(n)}(t))$.

Справедлива наступна теорема.

Теорема 1. Нехай наша модель задовольняє наступним умовам:

1) функції $\lambda(a_1, a_2)$, $\mu_2(a_1, a_2)$ та $\nu(a_1)$ є локально липшецеві по змінним a_1 та a_2 ; крім

того $\lambda(a_1, a_2) - \mu_2(a_1, a_2) > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$;

2) $n^{-1} X^{(n)}(0) \xrightarrow{P} S_0$, де

$$X^{(n)}(0) = (X_1^{(n)}(0), X_2^{(n)}(0)), S_0 = (s_0^1, s_0^2).$$

$$\text{Тоді } \sup_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{1}{n} X_n(nt) - s(t) \right| \xrightarrow{P} 0, n \rightarrow \infty.$$

Функція $s(t) = (s_1(t), s_2(t))$ задовольняє системі диференціальних рівнянь наступного вигляду:

$$\begin{cases} ds_1(t) = \lambda(s_1(t), s_2(t))dt - m(s_1(t), s_2(t))^{-1} dt \\ ds_2(t) = \lambda(s_1(t), s_2(t))dt - \mu_2(s_1(t), s_2(t))dt \end{cases}$$

$$\text{де } m(a) = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)}$$

Доведення.

Розглянемо двовимірний процес обслуговування $X_n(t) = (X_n^1(t), X_n^2(t))$ в послідовні моменти часу $t_{n1} < t_{n2} < \dots$, що є моментами завершення обслуговування вимоги, яка знаходиться у першому вузлі, $t_{n0} = 0$. Таким чином, $t_{n1} < t_{n2} < \dots$ - послідовні моменти завершення обслуговування у системі з повторними викликами, а $X_n(t_{nk} + 0) = (X_{nk}^1(t_{nk} + 0), X_{nk}^2(t_{nk} + 0))$ - величина черги на двох вузлах в момент завершення обслуговування у першому вузлі. Взагалі кажучи, для того, щоб описати функціонування першого вузла марковським процесом, потрібно розглянути двокомпонентний процес $\pi_n(t) = (X_n^1(t), I_n(t))$, де $I_n(t)$ - число вимог, які знаходяться на обслуговуванні в системі обслуговування $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$. Вочевидь, що фазовим простором процесу $\pi_n(t)$ є множина пар $\{(i, j) : i = 0, \infty, j = 0, 1\}$. В той же час, наш двокомпонентний марковський процес в моменти завершення обслуговування $\pi_n(t_{nk} + 0)$ повністю визначається значенням першої компоненти $X_{nk}^1 = X_{nk}^1(t_{nk} + 0)$, а друга компонента в цей момент дорівнює нулеві.

Вивчимо розподіл випадкового інтервалу між послідовними закінченнями обслуговування вимог у першому вузлі нашої моделі. Для цього позначимо через $\tau_{nk}(na_1) = t_{nk+1} - t_{nk}$ - інтервал між завершеннями послідовних обслуговувань

вимог у системі $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$. Розподіл величини $\tau_{nk}(na_1)$, вочевидь, буде залежати від числа вимог, які знаходяться на обслуговуванні na_1 в момент часу t_{nk} . Далі реалізація випадкової величини $\tau_{nk}(na_1)$ відбувається наступним чином. Наша система $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$ очікує випадковий інтервал часу, який має показниковий розподіл з параметром $\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)$, надходження нової вимоги на обслуговуючий прилад першого вузла. Значення параметру визначається тим, що ця випадкова величина в свою чергу є мінімумом двох випадкових величин, а саме інтервалу між надходженнями вимог з зовнішнього потоку та інтервалу між надходженнями вимог з потоку повторних викликів. Потім, як складова величини $\tau_{nk}(na_1)$, незалежним чином реалізується експоненційна з параметром $\mu_1 > 0$ випадкова величина, яка описує тривалість часу обслуговування вимоги в системі $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$.

Таким чином, випадкова величина $\tau_{nk}(na_1)$ представляється у вигляді суми двох незалежних експоненційно розподілених випадкових величин $\tau_{nk}(na_1) = \theta(a_1, a_2) + \vartheta$, де випадкова величина $\theta(a_1, a_2)$ має показниковий розподіл з параметром $\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)$, а випадкова величина ϑ має показниковий розподіл з параметром $\mu_1 > 0$. Отже, процес $\pi_n(t)$ знаходиться в стані $(na, 0)$ протягом випадкового інтервалу часу, який має показниковий розподіл з параметром $\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)$, а потім з імовірністю $\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)}$ починається обслуговування вимоги з зовнішнього потоку, або з імовірністю $\frac{a_1 v(a_1)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)}$ - повторної вимоги.

Для подальшого доведення є важливим знайти представлення приростів нашого двовимірного випадкового процесу обслуговування $X_n(t) = (X_n^1(t), X_n^2(t))$ на інтервалі $\tau_{nk}(na_1)$. Вочевидь, що прирости процесу $X_n(t) = (X_n^1(t), X_n^2(t))$ на цих інтервалах є однорідними і не залежать від номеру k . Враховуючи що обставину, позначимо через ξ_{n1}

двовимірний вектор $\xi_{nk} = \begin{pmatrix} \xi_{n1}^1 \\ \xi_{n1}^2 \end{pmatrix}$, перша компонента якого описує приріст на інтервалі $\tau_{nk}(na_1)$ процесу обслуговування на першому, а друга компонента – приріст відповідно на другому вузлі. Розглянемо складові кожної з введених величин приростів для першого та другого вузлів нашої моделі.

Почнемо з розгляду ситуації, яка виникає в першому вузлі, тобто системі з повторними викликами $M_X / M_X / M / 1(w.f.)$. Для конструктивного представлення величини ξ_{n1}^1 введемо наступне позначення: через $\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t)$ будемо позначати пуассонівський процес з параметром $\lambda(a_1, a_2)$. Якщо показникова величина ϑ , яка описує тривалість обслуговування, реалізувалася на значенні t , $X_{nk}^1 = na_1$, а $X_{nk}^2 = na_2$, тоді розподіл ξ_{n1}^1 може бути представлена наступним чином:

$$P(\xi_{n1}^1 = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t) - 1) = \frac{a_1 v(a_1)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)},$$

$$P(\xi_{n1}^1 = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t)) = \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)}$$

Використовуючи формулу повної ймовірності для умовних математичних сподівань, знайдемо математичне сподівання приросту першої компоненти процесу обслуговування:

$$b_n^1(a_1, a_2) = M \xi_{n1}^1 = M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - 1 \right) \frac{a_1 v(a_1)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)} +$$

$$+ M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) \right) \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)} =$$

$$= \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)} \times \\ \times \left(a_1 v(a_1) \int_0^\infty M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t) - 1 \right) d(1 - e^{-\mu t}) + \right. \\ \left. + \lambda(a_1, a_2) \int_0^\infty M \prod_{\lambda(a_1, a_2)} d(1 - e^{-\mu t}) \right) = \\ = \frac{a_1 v(a_1)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)} \left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu} - 1 \right) +$$

$$+ \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)} \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu} = \\ = \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu} - \frac{a_1 v(a_1)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)},$$

Розглянемо тепер приріст другої компоненти нашого процесу обслуговування, який описує функціонування вузла з системою типу $M_X / M_X / 1 / +\infty$. За умови, що $X_n^1(t_{nk}) = na_1$, а $X_n^2(t_{nk}) = na_2$ приріст другої компоненти може бути описаний наступною випадковою величиною:

$$P(\xi_{n1}^2 = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - \prod_{\mu_2(a_1, a_2)}(\theta(a_1, a_2) + \vartheta)) = \\ = \frac{a_1 v(a_1)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)},$$

$$P(\xi_{n1}^2 = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) + 1 - \prod_{\mu_2(a_1, a_2)}(\theta(a_1, a_2) + \vartheta)) = \\ = \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)}$$

З визначення системи масового обслуговування типу $M_X / M_X / 1 / +\infty$ випливає, що введені величини параметрів слід визначати лише в області $(a_1, a_2) \in R_+$. Тому процес з такими приростами на інтервалі $t_{nk+1} - t_{nk}$ співпадає з траєкторією процесу $X_n(t)$ лише на тих проміжках, на яких траєкторії процесу з приростами ξ_{nk}^2 цілком належать простору R_+ .

Як і у випадку з першою компонентою процесу обслуговування, використовуючи формулу повної ймовірності для умовних математичних сподівань, знайдемо математичне сподівання приросту другої компоненти:

$$b_n^2(a_1, a_2) = M \xi_{n1}^2 = \\ = \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 v(a_1)} \times \\ \times \left(M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - \prod_{\mu_2(a_1, a_2)}(\theta(a_1, a_2) + \vartheta) \right) a_1 v(a_1) + \right. \\ \left. + \lambda(a_1, a_2) \left(M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) + 1 \right) - \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
 & -M\left(\prod_{\mu_2(a_1, a_2)}(\theta(a_1, a_2) + \vartheta)\right) = \\
 & = \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} \times \\
 & \times \left(a_1 \nu(a_1) \left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_1} - \mu_2(a_1, a_2) \times \right. \right. \\
 & \times \left. \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} + \frac{1}{\mu_1} \right) \right) + \\
 & + \lambda(a_1, a_2) \left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_1} + 1 - \mu_2(a_1, a_2) \times \right. \\
 & \left. \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} + \frac{1}{\mu_1} \right) \right) \Bigg) = \\
 & = \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_1} - \mu_2(a_1, a_2) \times \\
 & \times \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} + \frac{1}{\mu_1} \right) + \\
 & + \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} = \\
 & = \lambda(a_1, a_2) \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} + \frac{1}{\mu_1} \right) - \\
 & - \mu_2(a_1, a_2) \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} + \frac{1}{\mu_1} \right) = \\
 & = (\lambda(a_1, a_2) - \mu_2(a_1, a_2)) \times \\
 & \times \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)} + \frac{1}{\mu_1} \right).
 \end{aligned}$$

Для доведення принципу усереднення для нашого процесу обслуговування скористаємось теоремою, доведеною В.В. Анісімовим в [1]. Користуючись результатами про збіжність в рівномірній топології суперпозиції випадкових процесів, В.В. Анісімовим для напівмарковських процесів спеціального виду був доведений наступний результат.

Нехай при кожному $n \geq 1$ задані незалежні у сукупності сімейства випадкових векторів $\{\xi_{nk}(a), \tau_{nk}(a)\}, a \in R^m, k \geq 0$ зі значеннями в

просторі $R^m \times [0, \infty)$, вимірні по аргументу a стосовно борелівської σ -алгебри в $R^m \times [0, \infty)$, та незалежна від введеного сімейства випадкова величина S_{n0} , яка описує початкове значення. Розглянемо послідовності випадкових величин, які задаються рекурентним чином:

$$\begin{aligned}
 t_{n0} &= 0 \\
 S_{nk+1} &= S_{nk} + \xi_{nk}(S_{nk}) \\
 t_{nk+1} &= t_{nk} + \tau_{nk}(S_{nk}), k \geq 0
 \end{aligned}$$

На цих послідовностях побудуємо напівмарковський процес $S_n(t)$: $S_n(t) = S_{nk}$, $t_{nk} \leq t < t_{nk+1}, t \geq 0$. Як видно з побудови, процес $S_n(t)$ є неоднорідним напівмарковським процесом. Для вивчення нашої моделі достатньо розглянути однорідний випадок, коли розподіли випадкових величин $\xi_{nk}(a)$, та $\tau_{nk}(a)$ не залежать від індексу k . Позначимо через $m_n(a) = M\tau_{n1}(na)$, $b_n(a) = M\xi_{n1}(na)$.

Теорема (Принцип усереднення). Нехай для напівмарковського процесу $S_n(t)$ виконані наступні умови:

- 1) $M\tau_{n1}(a)^2 + M|\xi_{n1}(a)|^2 < C$;
- 2) Для будь-якої константи $L > 0$, якщо $|a_1| \vee |a_2| < L$:
 $|m_n(a_1) - m_n(a_2)| + |b_n(a_1) - b_n(a_2)| < C_L |a_1 - a_2| + c_n$,
 $c_n \rightarrow 0$ рівномірно по $|a_1| \vee |a_2| < L$;
- 3) Існують функції $m(a) > 0, b(a)$ такі, що для будь-якого $a \in R^m$:
 $m_n(a) \rightarrow m(a), \quad b_n(a) \rightarrow b(a), \quad$ де
 $|b(a)| \leq C(1 + |a|)$
- 4) $\frac{1}{n} S_{n0} \xrightarrow{P} s_0$.

$$\text{Тоді } \sup_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{1}{n} S_n(nt) - s(t) \right| \xrightarrow{P} 0,$$

де функція $s(t)$ задовольняє диференційному рівнянню

$$ds(t) = b(s(t))m(s(t))^{-1} dt, \quad s(0) = s_0$$

Повертаючись до аналізу нашої моделі, можемо зауважити, що процес

$$X_n(t) = (X(t_{nk} + 0), X(t_{nk} + 0)) \quad \text{для}$$

$$t_{nk} \leq t < t_{nk+1}, \quad \text{де } t_{nk+1} = t_{nk} + \tau_{nk}(na_1, na_2) \quad \text{є}$$

напівмарковським, для якого можна застосувати результат вищенаведеної теореми. А саме, умова 1) на другі моменти є вочевидь виконаною, оскільки існують другі моменти у показникового та пуассонівського розподілів, умова 2) буде виконуватись, якщо передбачити, що функції $\lambda(a_1, a_2)$, $\nu(a_1)$ та $\mu_2(a_1, a_2)$ - локально липшивеці по кожній змінній. Крім того, в наслідок попередніх розрахунків, математичні сподівання часу перебування напівмарковського процесу $X_n(t)$ та його приростів задовольняють умові 3). Умова 4) на початкове значення також є виконаною. Таким чином, для будь-якого $T > 0$ будемо мати

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{1}{n} X_n(nt) - s(t) \right|^p \rightarrow 0,$$

де функція $s(t)$ задовольняє системі диференціальних рівнянь наступного вигляду:

$$\begin{cases} ds_1(t) = \lambda(s_1(t), s_2(t))dt - m(s_1(t), s_2(t))^{-1} dt \\ ds_2(t) = \lambda(s_1(t), s_2(t))dt - \mu_2(s_1(t), s_2(t))dt \end{cases}$$

$$\text{де } m(a) = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1 \nu(a_1)}.$$

Аналогічний аналіз дозволяє отримати результат про дифузійну апроксимацію змішаної мережі паралельної структури.

Для доведення теореми про збіжність у рівномірній топології випадкового процесу $X_n(t)$ також використаємо відповідну теорему, доведену В.В. Анісімовим [1].

Нехай $X_n(t)$ є напівмарковським процесом рекурентного типу, який розглядався в теоремі про принцип усереднення. Введемо послідовність випадкових процесів

$$\zeta_n(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} (X_n(nt) - ns(t)), t \geq 0, \quad \text{де}$$

$s(t)$ задовольняє диференційному рівнянню з теореми про принцип усереднення. Будемо позначати

$$\begin{aligned} \rho_{nk}(a) &= \xi_{nk}(na) - \tilde{b}_n(a) - \\ &- \tilde{b}(a)(\tau_{nk}(na) - m_n(a)). \end{aligned}$$

$$D_n^2(a) = M\rho_{n1}(a)\rho_{n1}(a)^*.$$

$$q_n(a, z) = \sqrt{n} \left(\tilde{b}_n \left(a + \frac{z}{\sqrt{n}} \right) - \tilde{b}(a) \right), \quad a, z \in R^m,$$

де

$$\tilde{b}_n(a) = b_n(a)m_n(a)^{-1}, \quad \tilde{b}(a) = b(a)m(a)^{-1}.$$

Теорема (Дифузійна апроксимація). Нехай є виконаними умови теореми про принцип усереднення, величина c_n в умові 2) є такою, що $\sqrt{n}c_n \rightarrow 0$, та для будь-якого $L > 0$ і при $|a_1| \vee |a_2| < L$:

$$1) \quad |D_n(a_1) - D_n(a_2)| \leq C_L |a_1 - a_2| + \alpha_n, \quad \text{де}$$

$$\alpha_n \rightarrow 0 \text{ рівномірно по } |a_1| \vee |a_2| < L;$$

для будь-яких $a, z \in R^m$

$$q_n(a, z) \rightarrow Q(a)z + g(a), \quad D_n^2(a) \rightarrow D^2(a), \quad \text{де}$$

функції $Q(a)$ та $g(a)$ неперервні;

$$3) \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{|a| < L_n} (M\tau_{n1}^2(a) \chi(\tau_{n1}^2(a) > N) +$$

$$+ M\xi_{n1}^2(a) \chi(\xi_{n1}^2(a) > N)) \rightarrow 0$$

$$\text{та } \zeta_n(0) \xrightarrow{cs} \zeta_0.$$

Тоді послідовність випадкових процесів $\zeta_n(t)$ збігається в рівномірній топології на будь-якому інтервалі $[0, T]$ такому, що з ймовірністю 1

$$y(+\infty) > T, \quad \text{де } y(t) = \int_0^t m(\eta(u))du, \quad \text{а } \eta(t)$$

задовольняє диференційному рівнянню $d\eta(t) = b(\eta(t))dt$, $\eta_0 = s_0$, до дифузійного процесу $\zeta(t)$, який задовольняє стохастичному диференційному рівнянню

$$d\zeta(t) = (Q(s(t))\zeta(t) + g(s(t)))dt +$$

$$+ D(s(t))m(s(t))^{-1/2} dw(t),$$

$\zeta(0) = \zeta_0$, де $w(t)$ - стандартний вінерівський процес в просторі R^m .

Використаємо наведену теорему для доведення збіжності до дифузійного процесу напівмарковського процесу $X_n(t)$.

Теорема 2. Якщо додатково до умов теореми 1 функції $\lambda(a_1, a_2)$, $\nu(a_1)$ та $\mu_2(a_1, a_2)$ мають

неперервні похідні по кожному аргументу,

$$\frac{1}{\sqrt{n}}(X_n(0) - ns_0) \xrightarrow{d} \zeta_0 \quad \text{при } n \rightarrow +\infty, \quad \text{тоді}$$

послідовність випадкових процесів

$$\zeta_n(t) = \frac{1}{\sqrt{n}}(X_n(nt) - ns(t)), \quad t \geq 0 \quad \text{збігається}$$

на будь-якому проміжку $[0, T]$ в рівномірній топології до процесу $\zeta(t)$, який задовольняє стохастичному диференційному рівнянню:

$$d\zeta(t) = G(s(t))\xi(t)dt + B(s(t))dW(t),$$

де перша компонента вектору переносу $G(s(t)) = (G_1(s_1(t), s_2(t)), G_2(s_1(t), s_2(t)))$ має вигляд:

$$G_1(s_1(t), s_2(t)) = g_1(s_1(t), s_2(t)),$$

де функція $g_1(a_1, a_2) =$

$$= \frac{\partial}{\partial a_1} \left(\lambda(a_1, a_2) - \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + a_1\nu(a_1)} \right)^{-1} \right),$$

а друга компонента вектору переносу представляється у вигляді:

$$G_2(s_1(t), s_2(t)) = g_2(s_1(t), s_2(t)), \quad \text{де функція}$$

$$g_2(a_1, a_2) = \frac{\partial}{\partial a_2} (\lambda(a_1, a_2) - \mu(a_1, a_2)).$$

$$\text{Матриця дифузії } B^2(s(t)) = \begin{pmatrix} b_{11}(s(t)) & b_{12}(s(t)) \\ b_{21}(s(t)) & b_{22}(s(t)) \end{pmatrix}$$

є матрицею з компонентами

$$b_{11}(s(t)) = \lambda(s_1(t), s_2(t))m(s_1(t), s_2(t)) + \\ + \sigma^2(s_1(t), s_2(t))m(s_1(t), s_2(t))^{-2} - \\ - 2\lambda(s_1(t), s_2(t))m(s_1(t), s_2(t))^{-1} \times \\ \times (\lambda(s_1(t), s_2(t)) + s_1(t)\nu(s_1(t)))^{-2},$$

де функції $m(s_1(t), s_2(t))$ та $\sigma^2(s_1(t), s_2(t))$

мають наступний вигляд:

$$m(s_1(t), s_2(t)) = \frac{1}{\mu_1} + \\ + (\lambda(s_1(t), s_2(t)) + s_1(t)\nu(s_1(t)))^{-1},$$

$$\sigma^2(s_1(t), s_2(t)) = \frac{1}{\mu_1^2} + \\ + (\lambda(s_1(t), s_2(t)) + s_1(t)\nu(s_1(t)))^{-2}.$$

$$b_{12}(s_1(t), s_2(t)) = b_{21}(s_1(t), s_2(t)) = \lambda(s_1(t), s_2(t)),$$

$$b_{22}(s_1(t), s_2(t)) = \lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_2(s_1(t), s_2(t)).$$

Зробимо головні висновки з отриманих результатів. Розглянута модель, як видно з попереднього аналізу, може бути описана відповідним ланцюгом Маркова з неперервним часом. Можна тільки уявити рівень складності задач, які виникають при дослідженні цього процесу відомими методами теорії ланцюгів Маркова з неперервним часом, зважаючи на залежність параметрів моделі від її станів та неоднорідність по вузлах.

Отримані результати натомість дають можливість асимптотично при $n \rightarrow \infty$ вважати складний двовимірний процес обслуговування у вузлах нашої мережевої моделі еквівалентним більш простому процесу $ns(t) + \sqrt{n}\xi(t)$, тобто

$$\begin{pmatrix} S_n^1(t) \\ S_n^2(t) \end{pmatrix} \approx n \begin{pmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{pmatrix} + \sqrt{n} \begin{pmatrix} \xi_1(t) \\ \xi_2(t) \end{pmatrix}.$$

Список використаних джерел

1. Анисимов В.В., Лебедев Е.А. Стохастические сети обслуживания, Лыбидь, (1992)
2. Anisimov V.V. Averaging Methods for Overloading Retrial Queueing Systems, Mathematical and Computer Modelling 30 (1999) 65-78.

Надійшла до редакції 01.10.2009

УДК 517.929.4

Шатирко А.В., к. ф.-м. н., Хусайнов Д.Я., д. ф.-м. н., проф.

**Дослідження інтервальної стійкості
диференціальних систем регулювання із
запізненням за допомогою функціоналів
Ляпунова-Красовського**

З використанням прямого методу Ляпунова розглянуто задачу побудови достатніх умов абсолютної інтервальної стійкості розв'язків нелінійних систем регулювання з запізненням аргументу у вигляді конструктивних алгебраїчних нерівностей. Наведено оцінки експоненціальної збіжності розв'язків.

Ключові слова: метод Ляпунова, інтервальна абсолютна стійкість, запізнення аргумента.

A.V. Shatytko, PhD in Math., D.Ya. Khusainov, full prof., Dr.Sc.

**Interval stability investigations
of differential regulator systems
with time delay by
Lyapunov-Krasovskiy functional**

Construction problem of absolute interval stability sufficient conditions nonlinear regulator systems solutions with time delay argument were investigated in term of constructive algebraic inequalities by direct Lyapunov method. Exponential estimates of solution convergence were obtained.

Key Words: method of Lyapunov, interval absolute stability, time delay argument

E-mail: a_shatytko@mail.ru, khusainov@unicyb.kiev.ua

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Федір Георгієвич

Вступ

В роботі одержано умови інтервальної стійкості нелінійних систем регулювання з аргументом, що запізнюється. Апаратом дослідження вибрано метод функцій Ляпунова. За своєю структурою це «грубий» метод, оскільки його умови базуються на виконанні нерівностей (позитивної визначеності функції, або функціоналу, й негативної визначеності похідної вздовж розв'язків системи). Тому він допускає виконання умов для цілого сімейства параметрично заданих систем. А якщо параметри системи визначені на деяких інтервалах, він буде давати умови інтервальної стійкості.

**Абсолютна інтервальна стійкість
нелінійних диференціально-різницевих
систем регулювання із запізненням**

Розв'язок задач керування в лінійних системах призводить до знаходження функції (скалярної) $u(x)$, при якій замкнена система

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + bu(x(t))$$

повинна бути асимптотично стійкою. Часто ця функція залежить від одного скалярного аргументу, який являє собою лінійну комбінацію фазових координат, й функція знаходиться в першому та третьому квадратах площини. Дослідження асимптотичної стійкості систем з функцією керування

$$u(x(t)) = f(\sigma(t)), \quad \sigma(t) = c^T x(t),$$

тобто систем

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + bf(\sigma(t)), \quad \sigma(t) = c^T x(t), \quad t \geq 0,$$

з функцією $f(\sigma)$, яка лежить в заданому секторі, отримало назву дослідження «абсолютної стійкості» систем регулювання [1,2].

Основним методом дослідження тут є, так званий, «частотний метод», який отримав розвиток в роботах Якубовича В.А., Геліга А.Х., Леонеза Г.О. В основі метода лежить дослідження поведінки деякої кривої («тодографа») в комплексній площині [3-5].

Іншим, альтернативним методом, який отримав розвиток в роботах Барбашина Є.О.,

Мартинюка А.А., Кореневського Д.Г. [6-8] та інших є другий метод Ляпунова з функцією вигляду «квадратична форма плюс інтеграл від нелінійності» [1]. Розповсюдження цього методу на системи з запізненням та нейтрального типу отримало в роботах Хусаїнова Д.Я., Шатирка А.В. [9-11]. Метод використовується в двох напрямках. Дослідження систем з використанням методу скінченновимірних функцій з використанням додаткової умови Разуміхіна Б.С. проводилось в роботах [12-16]. Дослідження за допомогою методу функціоналів Ляпунова-Красовського освітлено в роботах [17-21].

Останнім часом актуальності набуло дослідження систем з неточно визначеними параметрами. Нехай є система керування, яка описується диференціальними рівняннями вигляду

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + bf(\sigma(t)), \quad \sigma(t) = c^T x(t) \quad (1)$$

Припустимо, що матриця A асимптотично стійка, а нелінійна функція одного аргументу $f(\sigma)$ лежить в заданому секторі першої й третьої чверті системи координат, а саме

$$[k\sigma - f(\sigma)]f(\sigma) \geq 0. \quad (2)$$

Означення 1. Система (1) називається абсолютно стійкою, якщо нульовий розв'язок $x(t) \equiv 0$ системи (1) є асимптотично стійким в цілому при довільній функції $f(\sigma)$, що задовольняє умові (2).

Припустимо, що матриця A точно не відома, а її елементи приймають значення з деяких конкретних наперед заданих інтервалів, й система має вигляд

$$\dot{x}(t) = (A + \Delta A)x(t) + bf(\sigma(t)), \quad \sigma(t) = c^T x(t), \quad (3)$$

де

$$\Delta A = \{\Delta a_{ij}\}, \quad |\Delta a_{ij}| \leq a_{ij}, \quad i, j = \overline{1, n}. \quad (4)$$

Означення 2. Система (1) називається абсолютно інтервально стійкою, якщо система (3) абсолютно стійка при довільних матрицях ΔA , що задовольняють умовам (4).

Більш адекватно моделюють реальні технічні об'єкти системи, що описуються диференціальними рівняннями з запізненням.

Фактор запізнення завжди виникає при передачі сигналів керування і система має вигляд

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = Ax(t) + Bx(t - \tau) + bf(\sigma(t)) \\ \sigma(t) = c^T x(t) \end{cases} \quad (5)$$

В запропонованій роботі будемо розглядати систему прямого регулювання, яка описується диференціальними рівняннями з інтервальними коефіцієнтами та з аргументом, що запізнюється вигляду

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = (A + \Delta A)x(t) + (B + \Delta B)x(t - \tau) + bf(\sigma(t)) \\ \sigma(t) = c^T x(t) \end{cases} \quad (6)$$

Елементи матриць ΔA та ΔB приймають значення з заданих фіксованих інтервалів

$$\begin{aligned} \Delta A &= \{\Delta a_{ij}\}, \quad |\Delta a_{ij}| \leq \alpha_{ij}, \quad i, j = \overline{1, n}, \\ \Delta B &= \{\Delta b_{ij}\}, \quad |\Delta b_{ij}| \leq \beta_{ij}, \quad i, j = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (7)$$

Нелінійна функція $f(\sigma)$ задовольняє «умову сектора» (2).

Для дослідження абсолютної інтервальної стійкості системи (5) будемо використовувати функціонал Ляпунова-Красовського вигляду «квадратична форма плюс інтеграл від нелінійності». Він дає непогані результати при дослідженні абсолютної стійкості систем з точно заданими параметрами [19-21]. Умови абсолютної інтервальної стійкості системи (5) будуть отримані за допомогою функціоналу Ляпунова-Красовського

$$\begin{aligned} V[x(t)] &= x^T(t)Hx(t) + \int_{t-\tau}^t e^{-\epsilon(t-s)} x^T(s)Gx(s)ds + \beta \int_0^{\sigma(t)} f(\sigma)d\sigma, \\ \sigma(t) &= c^T x(t). \end{aligned} \quad (8)$$

Будемо використовувати наступні векторні та матричні норми

$$|A| = \{\lambda_{\max}(A^T A)\}^{1/2},$$

$$|x(t)| = \left\{ \sum_{i=1}^n x_i^2(t) \right\}^{1/2},$$

$$\|x(t)\|_{\tau, \epsilon} = \left\{ \int_{t-\tau}^t e^{-\epsilon(t-s)} |x(s)|^2 ds \right\}^{1/2}$$

$$\|\Delta A\| = \max_{\Delta a_{ij}} \{\Delta a_{ij}\}, \quad \|\Delta B\| = \max_{\Delta b_{ij}} \{\Delta b_{ij}\}.$$

$\lambda_{\max}(\cdot)$, $\lambda_{\min}(\cdot)$ – екстремальні власні числа відповідних симетричних, позитивно визначених матриць.

Позначимо

$$S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta] = \begin{bmatrix} -A^T H - HA - G & -HB & -[Hb + \frac{1}{2}(\beta A^T + I\nu)\zeta] \\ -B^T H & e^{-\pi} G & -\frac{1}{2}\beta B^T \zeta \\ -[Hb + \frac{1}{2}(\beta A^T + I\nu)\zeta]^T & -\frac{1}{2}\beta \zeta^T B & \frac{\nu}{k} - \beta b^T \zeta \end{bmatrix} \quad (9)$$

Теорема 1. Нехай існують позитивно визначені матриці G , H і скаляри $\beta > 0$, $\nu > 0$, $\zeta > 0$, при яких матриця $S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]$ позитивно визначена. Тоді система (5) абсолютно стійка.

Доведення. Для функціоналу Ляпунова-Красовського виду (8) виконуються двосторонні оцінки

$$\lambda_{\min}(H)x(t)^2 + \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \leq V[x(t)] \leq \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2}\beta \zeta^T \zeta \right] x(t)^2 + \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \quad (10)$$

Обчислимо повну похідну функціоналу (8) в силу системи з запізненням. Маємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V[x(t)] &= [Ax(t) + Bx(t-\tau) + bf(\sigma(t))]^T Hx(t) + \\ &+ x(t)H[Ax(t) + Bx(t-\tau) + bf(\sigma(t))] + \\ &+ x^T(t)Gx(t) - e^{-\pi} x^T(t-s)Gx(t-s) - \\ &- \zeta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s)Gx(s)ds + \\ &+ \beta f(\sigma(t))\zeta^T [Ax(t) + Bx(t-\tau) + bf(\sigma(t))]. \end{aligned}$$

Введемо додатковий параметр $\nu > 0$, і, використовуючи, так звану S -процедуру, перетворимо отриманий вираз у векторно-матричній формі

$$\frac{d}{dt} V[x(t)] = - \left(x^T(t) \begin{bmatrix} x(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{bmatrix} \right) \times$$

$$\begin{bmatrix} -A^T H - HA - G & -HB & -[Hb + \frac{1}{2}(\beta A^T + I\nu)\zeta] \\ -B^T H & e^{-\pi} G & -\frac{1}{2}\beta B^T \zeta \\ -[Hb + \frac{1}{2}(\beta A^T + I\nu)\zeta]^T & -\frac{1}{2}\beta \zeta^T B & \frac{\nu}{k} - \beta b^T \zeta \end{bmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} x(t) \\ x(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} - \nu \left[\sigma(t) - \frac{1}{k} f(\sigma(t)) \right] f(\sigma(t)) -$$

$$- \zeta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds.$$

Нехай умови теореми 1 виконані і матриця $S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]$ позитивно визначена. Тоді

$$\frac{d}{dt} V[x(t)] \leq -\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) \times$$

$$\times \left(|x(t)|^2 + |x(t-\tau)|^2 + f^2(\sigma(t)) \right) -$$

$$- \zeta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds.$$

Враховуючи умови «сектора», остаточно отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V[x(t)] &\leq -\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) |x(t)|^2 - \\ &- \zeta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds. \end{aligned} \quad (11)$$

Звідси, на підставі ослабленої теореми М.М.Красовського [22, стор.145], система (5) є абсолютно стійкою.

Отримаємо умови абсолютної інтервальної стійкості системи (5), тобто абсолютної стійкості системи (6) при довільних матрицях ΔA , ΔB , які задовольняють умовам (7). Позначимо

$$+\frac{1}{2}\beta\{x^T(t-\tau)(\Delta B^T c)f(\sigma(t))+f(\sigma(t))(c^T \Delta B)x(t-\tau)\}$$

Введемо три довільні сталі ξ^2 , ξ_1^2 , ξ_3^2 , і, використовуючи нерівності (13) леми 1, запишемо

$$\begin{aligned} & (x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t))) \times \\ & \times S_2[H, \beta] \begin{pmatrix} x^T(t) \\ x^T(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} \leq \\ & \leq x^T(t) [\Delta A^T H + H \Delta A] x(t) + \\ & + \left\{ \xi^2 x^T(t) (H^T H) x(t) + \frac{1}{\xi^2} x^T(t-\tau) (\Delta B^T \Delta B) x(t-\tau) \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \beta \left\{ \frac{1}{\xi_2^2} x^T(t) (\Delta A^T \Delta A) x(t) + \xi_2^2 f^2(\sigma(t)) c^T c \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \beta \left\{ \frac{1}{\xi_3^2} x^T(t-\tau) (\Delta B^T \Delta B) x(t-\tau) + \xi_3^2 f^2(\sigma(t)) c^T c \right\} \leq \\ & \leq 2\lambda_{\max}(H) \|\Delta A\| x(t)^2 + \\ & + \left\{ \xi^2 \lambda_{\max}^2(H) x(t)^2 + \frac{1}{\xi^2} \|\Delta B\|^2 x(t-\tau)^2 \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \beta \left\{ \frac{1}{\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 x(t)^2 + \xi_2^2 |c|^2 f^2(\sigma(t)) \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \beta \left\{ \frac{1}{\xi_3^2} \|\Delta B\|^2 x(t-\tau)^2 + \xi_3^2 |c|^2 f^2(\sigma(t)) \right\}. \end{aligned}$$

Звідси отримаємо

$$\begin{aligned} & (x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t))) \times \\ & \times S_2[H, \beta] \begin{pmatrix} x^T(t) \\ x^T(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} \leq \\ & \leq \left[\frac{\beta}{2\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 + 2\lambda_{\max}(H) \|\Delta A\| + \xi^2 \lambda_{\max}^2(H) \right] x(t)^2 + \\ & + \left[\frac{1}{\xi^2} + \frac{\beta}{2\xi_3^2} \right] \|\Delta B\|^2 x(t-\tau)^2 + \\ & + \frac{1}{2} \beta |c|^2 [\xi_2^2 + \xi_3^2] f^2(\sigma(t)). \end{aligned}$$

Нехай умови теореми виконані і матриця $S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]$ позитивно визначена. Тоді

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V[x(t)] \leq & - \left\{ \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \right. \\ & \left. - \left[\frac{\beta}{2\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 + 2\lambda_{\max}(H) \|\Delta A\| + \xi^2 \lambda_{\max}^2(H) \right] \right\} x(t)^2 - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \left\{ \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \left[\frac{1}{\xi^2} + \frac{\beta}{2\xi_3^2} \right] \|\Delta B\|^2 \right\} x(t-\tau)^2 - \\ & - \left\{ \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \frac{1}{2} \beta |c|^2 [\xi_2^2 + \xi_3^2] \right\} f^2(\sigma(t)) \\ & - \zeta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds. \end{aligned}$$

Виберемо сталі ξ^2 , ξ_2^2 , ξ_3^2 та збурення ΔA та ΔB таким чином, щоб виконувались нерівності

$$\begin{aligned} \theta_1[\bullet] = & \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \\ & - \left[\frac{\beta}{2\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 + 2\lambda_{\max}(H) \|\Delta A\| + \xi^2 \lambda_{\max}^2(H) \right] > 0 \end{aligned} \quad (15)$$

$$\theta_2[\bullet] = \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \left[\frac{1}{\xi^2} + \frac{\beta}{2\xi_3^2} \right] \|\Delta B\|^2 > 0$$

$$\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \frac{1}{2} \beta |c|^2 [\xi_2^2 + \xi_3^2] = 0$$

Неважко побачити, що у співвідношеннях (15) за своїм змістом величини ξ^2 , ξ_2^2 , ξ_3^2 можуть бути довільними, а $\|\Delta A\|$, $\|\Delta B\|$ досить малими. Розглянемо перше співвідношення з системи (15). Поклавши

$$\xi^2 = \xi_1^2 \frac{\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])}{\lambda_{\max}^2(H)}, \quad 0 < \xi_1^2 < 1, \quad (16)$$

перепишемо систему (15) у вигляді

$$\begin{aligned} & (1 - \xi_1^2) \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \\ & - \left[\frac{\beta}{2\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 + 2\lambda_{\max}(H) \|\Delta A\| \right] > 0 \\ & \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \\ & - \left[\frac{\lambda_{\max}^2(H)}{\xi_1^2 \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])} + \frac{\beta}{2\xi_3^2} \right] \|\Delta B\|^2 > 0 \end{aligned} \quad (17)$$

$$S_2[H, \beta] = \begin{bmatrix} \Delta A^T H + H \Delta A & H \Delta B & \frac{1}{2} \beta \Delta A^T c \\ \Delta B^T H & \Theta & \frac{1}{2} \beta \Delta B^T c \\ \frac{1}{2} \beta c^T \Delta A & \frac{1}{2} \beta c^T \Delta B & 0 \end{bmatrix} \quad (12)$$

де Θ – нульова матриця.

Лема 1. Для довільних матриць L_1, L_2, L_3 , векторів $x(t), x(t-\tau), l$ та скалярів $f(\sigma(t)), \xi$ мають місце наступні нерівності

$$\begin{aligned} & x^T(t) L_1^T L_2 x(t-\tau) + x^T(t-\tau) L_2^T L_1 x(t) \leq \\ & \leq \xi^2 x^T(t) L_1^T L_1 x(t) + \frac{1}{\xi^2} x^T(t-\tau) L_2^T L_2 x(t-\tau), \\ & x^T(t) L_1^T l f(\sigma(t)) + f(\sigma(t)) l^T L_1 x(t) \leq \\ & \leq \xi^2 x^T(t) L_1^T L_1 x(t) + \frac{1}{\xi^2} f^2(\sigma(t)) l^T l, \\ & x^T(t-\tau) L_2^T l f(\sigma(t)) + f(\sigma(t)) l^T L_2 x(t-\tau) \leq \\ & \leq \xi^2 x^T(t-\tau) L_2^T L_2 x(t-\tau) + \frac{1}{\xi^2} f^2(\sigma(t)) l^T l \end{aligned} \quad (13)$$

Доведення. Для довільних $L_1, L_2, x(t), x(t-\tau), \xi$, розкривши очевидну нерівність, маємо наступне

$$\begin{aligned} & \left[\xi L_1 x(t) - \frac{1}{\xi} L_2 x(t-\tau) \right]^T \left[\xi L_1 x(t) - \frac{1}{\xi} L_2 x(t-\tau) \right] = \\ & = \xi^2 x^T(t) L_1^T L_1 x(t) + \frac{1}{\xi^2} x^T(t-\tau) L_2^T L_2 x(t-\tau) - \\ & - x^T(t) L_1^T L_2 x(t-\tau) - x^T(t-\tau) L_2^T L_1 x(t) \geq 0. \end{aligned}$$

Звідси отримуємо

$$\begin{aligned} & x^T(t) L_1^T L_2 x(t-\tau) + x^T(t-\tau) L_2^T L_1 x(t) \leq \\ & \leq \xi^2 x^T(t) L_1^T L_1 x(t) + \frac{1}{\xi^2} x^T(t-\tau) L_2^T L_2 x(t-\tau) \end{aligned}$$

тобто першу нерівність з (13). Наступні нерівності отримуємо аналогічно.

Теорема 2. Нехай існують позитивно визначені матриці G, H і скаляри $\beta > 0, \nu > 0, \xi > 0, \xi_1^2 < 1$,

$$\xi_2^2 < \frac{2}{\beta |c|^2} \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \xi]), \quad \text{при яких}$$

матриця $S_1[G, H, \beta, \nu, \xi]$ позитивно визначена і виконуються умови

$$\begin{aligned} & \|\Delta A\| < \frac{2|\xi_2|}{\beta} \times \\ & \times \left\{ \sqrt{\lambda_{\max}^2(H) \xi_2^2 + \frac{1}{2}(1 - \xi_1^2) \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \xi])} - \right. \\ & \left. - |\xi_2| \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \xi]) \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} & \|\Delta B\|^2 < \\ & < 2\xi_1^2 \lambda_{\min}^2(S_1[G, H, \beta, \nu]) \times \\ & \times \left[2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \gamma]) - \beta |c|^2 \xi_2^2 \right] / \\ & / \left[2\lambda_{\max}^2(H) \times \right. \\ & \left. \times \left[2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu]) - \beta |c|^2 \xi_1^2 \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu]) \right] \right] \end{aligned}$$

Тоді система (5) абсолютно інтервально стійка.
Доведення. Для функціоналу Ляпунова-Красовського виду (8) виконуються двосторонні оцінки (10) типу нерівностей квадратичних форм. Обчислимо повну похідну функціоналу (8) в силу інтервальної системи з запізненням. Повторюючи викладки попередньої теореми, маємо

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} V[x(t)] = - \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right) \times \\ & \times S_1[G, H, \beta, \nu, \xi] \begin{pmatrix} x^T(t) \\ x^T(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} + \\ & + \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right) \times \\ & \times S_2[H, \beta] \begin{pmatrix} x^T(t) \\ x^T(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} - \\ & - \nu \left[\sigma(t) - \frac{1}{k} f(\sigma(t)) \right] f(\sigma(t)) - \\ & - \xi \int_{t-\tau}^t e^{-\gamma(t-s)} x^T(s) G x(s) ds. \end{aligned}$$

Для другої квадратичної форми отримаємо наступні співвідношення

$$\begin{aligned} & \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right) \times \\ & \times S_2[H, \beta] \begin{pmatrix} x^T(t) \\ x^T(t-\tau) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} = \\ & x^T(t) \left[\Delta A^T H + H \Delta A \right] x(t) + \\ & + \left\{ x^T(t) (H \Delta B) x(t-\tau) + x^T(t-\tau) (\Delta B^T H) x(t) \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \beta \left\{ x^T(t) (\Delta A^T c) f(\sigma(t)) + f(\sigma(t)) (c^T \Delta A) x(t) \right\} + \end{aligned}$$

$$\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \frac{1}{2}\beta|c|^2[\xi_2^2 + \xi_3^2] = 0$$

Тоді при

$$\|\Delta A\|^2 + 4 \frac{\lambda_{\max}(H)\xi_2^2}{\beta} \|\Delta A\| -$$

$$- 2 \frac{(1-\xi_1^2)\xi_2^2}{\beta} \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) < 0$$

буде виконуватись перша нерівність.
Розв'язуючи її, отримаємо

$$\|\Delta A\| < 2 \frac{|\xi_2|}{\beta} \times$$

$$\times \left[\sqrt{\lambda_{\max}^2(H)\xi_2^2 + \frac{1}{2}(1-\xi_1^2)\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])} - \right.$$

$$\left. - |\xi_2| \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) \right]$$

З третього співвідношення маємо

$$\xi_3^2 = \frac{2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])}{\beta|c|^2} - \xi_2^2$$

Підставимо отримане значення ξ_3^2 в другу нерівність (17). Отримаємо

$$\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) -$$

$$- \left[\frac{\lambda_{\max}^2(H)}{\xi_1^2 \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])} + \right.$$

$$\left. + \frac{\beta^2|c|^2}{2[2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - \beta|c|^2\xi_2^2]} \right] \times$$

$$\times \|\Delta B\|^2 > 0$$

Нехай

$$\xi_2^2 < 2 \frac{\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])}{\beta|c|^2}$$

Тоді при

$$\|\Delta B\|^2 < \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) /$$

$$\left[\frac{\lambda_{\max}^2(H)}{\xi_1^2 \lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta])} + \right.$$

$$\left. + \frac{\beta^2|c|^2}{4\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \zeta]) - 2\beta|c|^2\xi_2^2} \right]$$

тобто при виконанні умов (14) виконуються нерівності (15). Звідси

$$\frac{d}{dt}V[x(t)] \leq -\theta_1[\bullet]x(t)^2 - \theta_2[\bullet]x(t-\tau)^2 -$$

$$- \zeta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds.$$

І на підставі ослабленої теореми М.М.Красовського [22, стор.145], система (5) є абсолютно інтервально стійкою.

Оцінки збіжності розв'язків інтервальної системи з запізненням

В попередніх теоремах було отримано умови абсолютної стійкості. Для отримання оцінок збіжності розв'язків інтервальної системи з запізненням будемо використовувати функціонал Ляпунова-Красовського з експоненціальним множником

$$V[x(t), t] = e^{\mu t} \{ x^T(t) H x(t) +$$

$$+ \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds + \int_0^{\sigma(t)} f(\sigma) d\sigma \} \quad (18)$$

Позначимо

$$\varphi_{11}(H) = \frac{1}{\lambda_{\min}(H)} \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right],$$

$$\varphi_{12}(G, H) = \frac{\lambda_{\max}(G)}{\lambda_{\min}(H)}, \quad (19)$$

$$\varphi_{21}(G, H) = \frac{1}{\lambda_{\min}(G)} \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right],$$

$$\varphi_{22}(G) = \frac{\lambda_{\max}(G)}{\lambda_{\min}(G)}.$$

$$S_3[G, H, \beta, \nu, \zeta, \gamma] = \quad (20)$$

$$\begin{bmatrix} -A^T H - H A - G - \gamma \left(H + \frac{1}{2} \beta k c c^T \right) & -H B & - \left[H b + \frac{1}{2} (\beta k^T c + \gamma \nu) k \right] \\ -B^T H & e^{-\eta} G & -\frac{1}{2} \beta B^T c \\ - \left[H b + \frac{1}{2} (\beta k^T c + \gamma \nu) k \right]^T & -\frac{1}{2} \beta c^T B & \frac{\nu}{k} - \beta b^T c \end{bmatrix}$$

Має місце наступне твердження.

Теорема 3. Нехай існують позитивно визначені матриці G, H і скаляри $\beta > 0$, $\nu > 0$, $\varsigma > \gamma > 0$, при яких матриця $S_3[G, H, \beta, \nu, \varsigma, \gamma]$ позитивно визначена і виконуються умови

$$\begin{aligned} \|\Delta A\| &< \frac{2|\xi_2|}{\beta} \times \\ &\times \left[\sqrt{\lambda_{\max}^2(H)\xi_2^2 + \frac{1}{2}(1-\xi_1^2)\lambda_{\min}(S_3[G, H, \beta, \nu, \varsigma, \gamma])} - \right. \\ &\left. - |\xi_2|\lambda_{\min}(S_3[G, H, \beta, \nu, \varsigma, \gamma]) \right] \\ \|\Delta B\|^2 &< \\ &< 2\xi_1^2\lambda_{\min}^2(S_1[G, H, \beta, \nu]) \\ &\left[2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu, \gamma]) - \beta|c|^2\xi_2^2 \right] \\ &+ \{ 2\lambda_{\max}^2(H) [2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu]) - \\ &- \beta|c|^2\xi_1^2\lambda_{\min}(S_1[G, H, \beta, \nu])] \} \end{aligned} \quad (21)$$

Тоді для розв'язків $x(t)$ інтервальної системи з запізненням (6) мають місце наступні оцінки збіжності

$$\begin{aligned} |x(t)| &\leq \left[\sqrt{\varphi_{11}(H)}|x(0)| + \sqrt{\varphi_{12}(G, H)}\|x(0)\|_{\tau, \varsigma} \right] \times \\ &\times \exp\left\{-\frac{1}{2}\chi t\right\}, \\ t &\geq 0, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \|x(t)\|_{\tau, \varsigma} &\leq \left[\sqrt{\varphi_{21}(G, H)}|x(0)| + \sqrt{\varphi_{22}(G)}\|x(0)\|_{\tau, \varsigma} \right] \times \\ &\times \exp\left\{-\frac{1}{2}\chi t\right\}, \\ t &\geq 0, \end{aligned} \quad (23)$$

Де

$$\chi = \begin{cases} \frac{\theta_3[\bullet]}{\lambda_{\min}(H) + \frac{1}{2}\beta|c|^T c}, & \text{якщо } \theta_3[\bullet] < \gamma \left[\lambda_{\min}(H) + \frac{1}{2}\beta|c|^T c \right], \\ \varsigma - \gamma, & \text{якщо } \theta_3[\bullet] \geq \gamma \left[\lambda_{\min}(H) + \frac{1}{2}\beta|c|^T c \right] \end{cases} \quad (24)$$

$$\theta_3[\bullet] = \lambda_{\min}(S_3[G, H, \beta, \nu, \varsigma, \gamma]) -$$

$$- \left[\frac{\beta}{2\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 + 2\lambda_{\max}(H)\|\Delta A\| + \xi_1^2\lambda_{\max}^2(H) \right]$$

Доведення. Для доведення будемо використовувати функціонал Ляпунова-Красовського виду (18). Він задовольняє двостороннім оцінкам

$$\begin{aligned} e^{\chi t} \left\{ \lambda_{\min}(H)|x(t)|^2 + \int_{t-\tau}^t e^{-\varsigma(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right\} &\leq \\ &\leq V[x(t), t] \leq \end{aligned} \quad (25)$$

$$\leq e^{\chi t} \left\{ \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2}\beta|c|^T c \right] |x(t)|^2 + \int_{t-\tau}^t e^{-\varsigma(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right\}$$

Обчислимо повну похідну функціонала (18) вздовж розв'язків інтервальної системи (6). Використовуючи отримані в попередній теоремі перетворення, запишемо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V[x(t), t] &= \chi e^{\chi t} \times \\ &\times \left\{ x^T(t) H x(t) + \int_{t-\tau}^t e^{-\varsigma(t-\xi)} x^T(\xi) G x(\xi) d\xi + \beta \int_0^{\sigma(t)} f(\sigma) d\sigma \right\} - \\ &- e^{\chi t} \left(x^T(t) x^T(t-\tau) f(\sigma(t)) \right) \times \\ &\times S_1[G, H, \beta, \nu, \varsigma] \left(x^T(t) x^T(t-\tau) f(\sigma(t)) \right)^T + \\ &+ e^{\chi t} \left(x^T(t) x^T(t-\tau) f(\sigma(t)) \right) \times \\ &\times S_2[H, \beta] \left(x^T(t) x^T(t-\tau) f(\sigma(t)) \right)^T - \\ &- \chi e^{\chi t} \left[\sigma(t) - \frac{1}{k} f(\sigma(t)) \right] f(\sigma(t)) - \\ &- \chi e^{\chi t} \left[\int_{t-\tau}^t e^{-\varsigma(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right] \end{aligned}$$

Оскільки за умовою (2)

$$\int_0^{\sigma(t)} f(\sigma) d\sigma \leq \frac{1}{2} k \sigma^2(t) = \frac{1}{2} k x^T(t) c c^T x(t),$$

то, використовуючи позначення матриці $S_3[G, H, \beta, \nu, \varsigma, \gamma]$ з (20), отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}V[x(t), t] \leq & -e^\eta \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right) \times \\ & \times S_3[G, H, \beta, \nu, \zeta, \gamma] \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right)^T + \\ & + e^\eta \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right) \times \\ & \times S_2[H, \beta] \left(x^T(t), x^T(t-\tau), f(\sigma(t)) \right)^T - \\ & - (\zeta - \gamma) e^\eta \left[\int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right]. \end{aligned}$$

Нехай, як впливає з умов теореми, існують позитивно визначені матриці G , H та скаляри β , ν , ζ , γ , при яких матриця $S_3[G, H, \beta, \nu, \zeta, \gamma]$ також позитивно визначена та виконуються умови (21). Тоді, використовуючи перетворення, що наведені в теоремі 2, можна записати

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}V[x(t), t] \leq & -e^\eta \theta_3[\bullet] x(t)^2 - e^\eta \theta_4[\bullet] x(t-\tau)^2 - \\ & - (\zeta - \gamma) e^\eta \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds, \end{aligned} \quad (26)$$

де

$$\theta_3[\bullet] = \lambda_{\min}(S_3[G, H, \beta, \nu, \zeta, \gamma]) -$$

$$- \left[\frac{\beta}{2\xi_2^2} \|\Delta A\|^2 + 2\lambda_{\max}(H) \|\Delta A\| + \xi_1^2 \lambda_{\max}^2(H) \right] > 0$$

$$\theta_4[\bullet] = \lambda_{\min}(S_3[G, H, \beta, \nu, \zeta, \gamma]) - \left[\frac{1}{\xi_1^2} + \frac{\beta}{2\xi_2^2} \right] \|\Delta B\|^2 > 0$$

Повернемося до нерівності (25). Запишемо праву частину нерівності (25) у вигляді

$$\begin{aligned} -e^\eta \left\{ \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] x(t)^2 + \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right\} \\ \leq -V[x(t), t]. \end{aligned} \quad (27)$$

Розглянемо два випадки.

1. Запишемо нерівність (27) у вигляді

$$\begin{aligned} -e^\eta x(t)^2 \leq & \frac{1}{\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c} \times \\ & \times \left\{ -V[x(t), t] + e^\eta \left[\int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right] \right\} \end{aligned}$$

Підставимо отриманий вираз в (26) і отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}V[x(t), t] \leq & - \frac{\theta_1[\bullet]}{\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c} V[x(t), t] - \\ & - e^\eta \theta_2[\bullet] x(t-\tau)^2 - \\ & - e^\eta \left\{ (\zeta - \gamma) - \frac{\theta_1[\bullet]}{\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c} \right\} \times \\ & \times \left\{ \int_{t-\tau}^t e^{-\zeta(t-s)} x^T(s) G x(s) ds \right\} \end{aligned}$$

І, якщо параметри системи такі, що

$$(\zeta - \gamma) \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] - \theta_3[\bullet] > 0,$$

то

$$\frac{d}{dt}V[x(t), t] \leq - \left\{ \frac{\theta_3[\bullet]}{\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c} \right\} V[x(t), t].$$

Розв'язуючи отриману нерівність, маємо

$$\begin{aligned} V[x(t), t] \leq & V[x(0), 0] \exp \left\{ - \frac{\theta_3[\bullet]}{\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c} t \right\}, \\ & t \geq 0. \end{aligned}$$

2. Запишемо нерівність (27) у вигляді

$$-e^{\gamma t} \left[\int_{t-\tau}^t e^{-\gamma(s-t)} x^T(s) G x(s) ds \right] \leq \\ \leq \left\{ -V[x(t), t] + e^{\gamma t} \left[\lambda_{\max}(H) - \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \|x(t)\|^2 \right\}$$

і знов підставимо в вихідну нерівність (26).
Отримаємо

$$\frac{d}{dt} V[x(t), t] \leq \\ -e^{\gamma t} \left\{ \theta_3[\bullet] - (\zeta - \gamma) \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \|x(t)\|^2 - \right. \\ \left. - e^{\gamma t} \theta_2[\bullet] x(t-\tau)^2 - (\zeta - \gamma) V[x(t), t] \right\}.$$

І, якщо буде виконуватись

$$\theta_3[\bullet] \geq (\zeta - \gamma) \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right],$$

тоді

$$\frac{d}{dt} V[x(t), t] \leq -(\zeta - \gamma) V[x(t), t].$$

Розв'язавши цю нерівність, отримаємо

$$V[x(t), t] \leq V[x(0), 0] \exp\{-(\zeta - \gamma)t\}.$$

Послідавши отримані нерівності, маємо

$$V[x(t), t] \leq V[x(0), 0] \exp\{-\chi t\},$$

$$\chi = \begin{cases} \frac{\theta_3[\bullet]}{\lambda_{\max}(H) - \frac{1}{2} \beta k c^T c}, & \text{якщо } \theta_3[\bullet] < (\zeta - \gamma) \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \\ \zeta - \gamma, & \text{якщо } \theta_3[\bullet] \geq (\zeta - \gamma) \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \end{cases}$$

Знов використовуємо залежність (25).
Перепишемо її у вигляді

$$e^{\gamma t} \left\{ \lambda_{\min}(H) \|x(t)\|^2 + \lambda_{\min}(G) \|x(t)\|_{\zeta, \tau}^2 \right\} \leq$$

$$\leq V[x(t), t] \leq V[x(0), 0] \leq$$

$$\leq e^{-\chi t} \left\{ \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \|x(0)\|^2 + \lambda_{\max}(G) \|x(0)\|_{\zeta, \tau}^2 \right\}.$$

Звідси отримуємо дві оцінки. По-перше, маємо

$$\|x(t)\|^2 \leq \left[\frac{1}{\lambda_{\min}(H)} \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \|x(0)\|^2 + \frac{\lambda_{\max}(G)}{\lambda_{\min}(H)} \|x(0)\|_{\zeta, \tau}^2 \right] e^{-\chi t}.$$

І, використовуючи позначення $\varphi_{11}(H)$, $\varphi_{12}(G, H)$, отримуємо

$$\|x(t)\| \leq \left[\sqrt{\varphi_{11}(H)} \|x(0)\| + \sqrt{\varphi_{12}(G, H)} \|x(0)\|_{\zeta, \tau} \right] \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{2} \chi t\right\}, \quad t \geq 0,$$

Далі можна записати

$$\|x(t)\|_{\zeta, \tau}^2 \leq e^{-\chi t} \times$$

$$\left[\frac{1}{\lambda_{\min}(G)} \left[\lambda_{\max}(H) + \frac{1}{2} \beta k c^T c \right] \|x(0)\|^2 + \frac{\lambda_{\max}(G)}{\lambda_{\min}(G)} \|x(0)\|_{\zeta, \tau}^2 \right].$$

І, знов використовуючи позначення $\varphi_{21}(G, H)$, $\varphi_{22}(G)$, отримаємо нерівність

$$\|x(t)\|_{\zeta, \tau} \leq \left[\sqrt{\varphi_{21}(G, H)} \|x(0)\| + \sqrt{\varphi_{22}(G)} \|x(0)\|_{\zeta, \tau} \right] \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{2} \chi t\right\}, \quad t \geq 0.$$

Послідаючи ці залежності, отримуємо твердження теореми 3.

Зауваження. Якщо виконуються умови теореми 2, то, в силу неперервності, значення $\gamma > 0$, при яких $\lambda_{\min}[G, H, B, v, \gamma] > 0$, завжди знайдуться.

Список використаних джерел

1. Лурье А.И. Некоторые нелинейные задачи теории автоматического регулирования. - М.-Л. Гостехиздат, 1951. - 251 с.
2. Айзерман М.А., Гантмахер Ф.Р. Абсолютная устойчивость регулируемых систем. - М., Изд-во АН СССР, 1963. - 261 с.

3. Пятницкий Е.С. Новые исследования по абсолютной устойчивости систем автоматического регулирования // Автоматика и телемеханика, №6, 1968, – С.5-36.

4. Баркин А.И. Оценки качества нелинейных систем регулирования. – М., Наука, 1982. – 256 с.

5. Гелиг А.Х., Леонов Г.А., Якубович В.А. Устойчивость нелинейных систем с неединственным состоянием равновесия. – М., Наука, 1978. – 400 с.

6. Барбашин Е.А. Метод функций Ляпунова. – М., Наука, 1970. – 240 с.

7. Мартынюк А.А. Устойчивость движения сложных систем. – Киев, Наукова думка, 1975. – 352 с.

8. Корневський Д.І. Устойчивость динамических систем при случайных возмущениях параметров. Алгебраические критерии. – Киев, Наукова думка, Институт математики УССР, 1989. – 208 с.

9. Хусаинов Д.Я., Шатырко А.В. Метод функций Ляпунова в исследовании устойчивости дифференциально-функциональных систем. – Киев, Изд.-во Киевского университета, 1997. – 236 с.

10. Khusainov D.Ya., Shatyрко A.V. Tsitritsky E.O. Absolute Stability of Nonlinear Automatic Control of Retarded System // Проблемы нелинейного анализа в инженерных системах, в.1, 1995. – С.35-47.

11. Khusainov D.Ya., Shatyрко A.V. Absolute Stability of Multy-Delay Regulation System // Journal of Automation and Information Systems, V.27, N.3-4, 1995. – pp.33-42.

12. Хусаинов Д.Я., Кожаметов А.Т., Шатырко А.В. Интервальна стійкість систем прямого регулювання з малим запізненням // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки, в.3, 2001. – С.320-328.

13. Кожаметов А.Т., Шатырко А.В., Хусаинов Д.Я. Интервальна стійкість систем непрямого регулювання з запізненням // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки, в.4, 2001. – С.268-274.

14. Кожаметов А.Т., Шатырко А.В., Хусаинов Д.Я. Интервальна стійкість систем регулювання з запізненням // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки, в.5, 2001. – С.73-88.

15. Хусаинов Д.Я., Цитрицкий Е.О. Интервальная устойчивость нелинейных систем регулирования с малым запаздыванием

// Проблемы управления и информатики, №3, 1999. – С.5-12.

16. Цитрицкий Е.О., Хусаинов Д.Я. Робастна стійкість систем регулювання з запізненням // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки, в.3, 1999. – С.274-280.

17. El-Kebir Boukas, Zi-Kuan Liu. Deterministic and Stochastic Time Delay Systems. – Birkhauser, Boston-Basel-Berlin. – 2002. 423 p.

18. X.Liao, P.Yu. Absolute Stability of Nonlinear Control Systems. – Springer Science+Business Media B.V., 2008. – 390 p.

19. Хусаинов Д.Я., Шатырко А.В., Кожаметов А.Т. Интервальная абсолютная устойчивость систем регулирования с постоянным запаздыванием. – VIII Четаевская Международная конференция «Аналитическая механика, устойчивость и управление движением», Казань, 2002. – С.125.

20. Кожаметов А.Т., Шатырко А.В. Условия интервальной устойчивости систем прямого регулирования с малым запаздыванием. – Шестая Крымская Международная математическая школа «Метод функций Ляпунова и его приложения». Тезисы докладов, Симферополь, 2002. – С.73.

21. Кожаметов А.Т., Шатырко А.В., Хусаинов Д.Я. Абсолютная интервальная устойчивость систем прямого регулирования с запаздыванием. – X – Міжнародна наукова конференція імені академіка М.Кравчука, 13-15 травня 2004, Київ, Матеріали конференції, Київ, 2004. – С.133.

22. Эльсгольц Л.Э., Норкин С.Б. Введение в теорию дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. – М., Наука, 1970. – 240 с.

Надійшла до редколегії 26.10.09

УДК 531.37: 537.634: 519.6

Швець Д.В., аспірант

**Дослідження стійкості розв'язків
одновимірної параметричної моделі
магнітної надпровідної левітації за
першим наближенням**

Шляхом аналізу першого наближення отримано умову стійкості незбуреного розв'язку одновимірної динамічної моделі магнітної взаємодії двох надпровідних кілець. Побудовано область стійкості в просторі параметрів заморожених магнітних потоків.

Ключові слова: динамічна система, математичне моделювання, надпровідна левітація.

*E-mail: dmitrysv@univ.kiev.ua

Роботу представив проф. Гарашенко Ф.Г.

Вступ

Задача дослідження властивостей магнітної надпровідної левітації з часом стає все більш актуальною завдяки широким можливостям застосування даного явища при створенні сучасних технологій. Одна з проблем, яка постає на шляху до практичної реалізації динамічних надпровідних моделей полягає в тому, що, як правило, вони залежать від багатьох параметрів. При вивченні властивостей руху надпровідних тіл у просторі цей факт значно ускладнює якісне дослідження їх розв'язків. Зокрема, формулювання критеріїв стійкості динамічних моделей, які залежать від параметрів, є складною, але важливою задачею.

Динамічна одновимірна модель

Найпростішим випадком магнітної динамічної взаємодії двох надпровідних кілець є одновимірна модель руху вільного кільця відносно нерухомого. В даній моделі вільне кільце співвісне з нерухомим, лежить у площині, що паралельна площині нерухомого кільця та має одну вертикальну ступінь свободи ζ в декартовій системі координат $O\xi\eta\zeta$. Площини, яким належать кільця, паралельні площині $\xi O\eta$ (Рис. 1).

D.V. Shvets, postgraduate student

**Solutions stability of one-dimensional
parametric superconducting magnetic
levitation model analysis by the first
approximation**

By the first approximation analyzing stability conditions of unperturbed solution of one-dimensional dynamic model with magnetic interaction between two superconducting rings obtained. The stability region in the frozen magnetic flux parameters space was constructed.

Key Words: dynamical system, mathematical modeling, superconducting levitation.

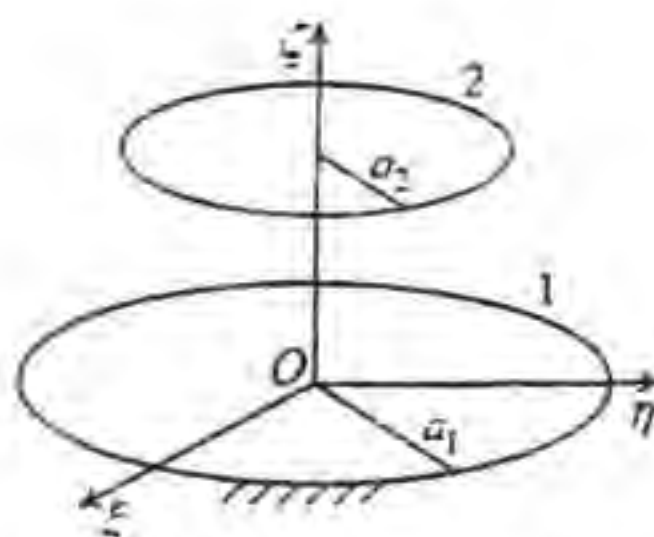


Рис 1. Взаємне розміщення надпровідних кілець.

Для побудови диференціальних рівнянь, які визначають закон руху вільного кільця використовуються рівняння Лагранжа для консервативної системи. Потенціальна енергія U описаної системи має вигляд [1]:

$$U(\zeta) = \frac{1}{2} \frac{L_2 \Psi_1^2 - 2L_{12}(\zeta) \Psi_1 \Psi_2 + L_1 \Psi_2^2}{L_1 L_2 - L_{12}^2(\zeta)}, \quad (1)$$

Величини L_1, L_2, Ψ_1, Ψ_2 – власні індуктивності та магнітні потокозчеплення відповідно першого та другого кілець, які є константами і визначають магнітну конфігурацію системи. Власна індуктивність $L_{12}(\zeta)$ залежить лише від однієї змінної, що є аплікатою в декартовій системі координат, та задається наступним чином

$$L_{12}(\zeta) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} a_1 a_2 \cos(\lambda_1 - \lambda_2) \times \\ \times (a_1^2 + a_2^2 - 2a_1 a_2 \cos(\lambda_1 - \lambda_2) + \zeta^2)^{-\frac{1}{2}} d\lambda_1 d\lambda_2. \quad (2)$$

де a_1, a_2 – радіуси відповідних кілець (Рис. 1).

Подвійний інтеграл в (2) є інтегралом еліптичного типу. За допомогою відповідних перетворень його можна виразити через повні еліптичні інтеграли першого та другого роду [1]:

$$L_{12}(\zeta) = \mu_0 \sqrt{a_1 a_2} \left[\left(\frac{2}{k} - k \right) K(k) - \frac{2}{k} E(k) \right], \quad (3)$$

з модулем k , рівним

$$k = \frac{2\sqrt{a_1 a_2}}{\sqrt{(a_1 + a_2)^2 + \zeta^2}}.$$

Дослідження умов стійкості розв'язків

Динамічне рівняння, яке визначає закон руху вільного кільця масою m відносно нерухомого має вигляд:

$$m\ddot{\zeta} = -\frac{\partial U(\zeta)}{\partial \zeta}. \quad (4)$$

Від звичайного диференціального рівняння другого порядку заміною змінних $x = \zeta$, $y = \dot{\zeta}$ перейдемо до системи двох рівнянь першого порядку

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y \\ \frac{dy}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial U(x)}{\partial x} \end{cases} \quad (5)$$

та використаємо для дослідження стійкості незбуреного розв'язку даної системи метод першого наближення. Для цього знайдемо положення рівноваги системи (5) розв'язавши систему нелінійних рівнянь

$$\begin{cases} y = 0 \\ \frac{\partial U(x)}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (6)$$

При розв'язуванні другого рівняння в (6) виникають певні складнощі, оскільки воно має складну нелінійну структуру. Для знаходження розв'язків даного рівняння можна застосувати декілька підходів, вибір яких залежатиме від представлення функції взаємної індуктивності, що входить до виразу потенціальної енергії $U(x)$. Зокрема, якщо L_{12} представлена у вигляді (3) через повні еліптичні інтеграли, то аналітично знайти розв'язки системи рівнянь (6) не є можливим. Для пошуку розв'язків в такому випадку необхідно застосувати відповідні чисельні методи.

Інший підхід до розв'язання системи рівнянь (6) ґрунтується на заміні функції взаємної індуктивності (2) її наближеним аналогом. Так, вираз (2) з урахуванням заміни змінних можна представити у вигляді простого визначеного інтегралу [2]

$$\begin{aligned} L_{12}(x) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} a_1 a_2 \cos(\lambda_1 - \lambda_2) \times \\ &\times (a_1^2 + a_2^2 - 2a_1 a_2 \cos(\lambda_1 - \lambda_2) + x^2)^{-1/2} d\lambda_1 d\lambda_2 = \\ &= \mu_0 \int_0^\pi a_1 a_2 \cos(\gamma) (a_1^2 + a_2^2 - 2a_1 a_2 \cos(\gamma) + x^2)^{-1/2} d\gamma \end{aligned}$$

та провести розклад підінтегральної функції по змінній інтегрування γ у ряд Тейлора. Однак, при певних наборах параметрів a_1, a_2 та x , які впливають на властивості підінтегральної функції, для досягнення заданої точності розкладу буде необхідно обчислити досить велику кількість членів ряду, що в подальшому значно ускладнить аналітичні перетворення. З метою спрощення розкладу за умови забезпечення його точності скористаємось чисельно-аналітичним підходом, описаним в [3], ідея якого полягає у розбитті області інтегрування на проміжки, та проведенні розкладу функції в ряд Тейлора в точках, що є центрами отриманих проміжків. Основна перевага даного підходу полягає в тому, що функція L_{12} може бути представлена в явному вигляді, що дозволяє розв'язати систему рівнянь (6) аналітичними методами. Точність отриманих розв'язків залежатиме від точності розкладу підінтегральної функції згідно вказаного підходу.

Як в першому так і в другому випадках, з отриманої множини розв'язків системи (6) для дослідження на стійкість виберемо той розв'язок, який задовольняє умовам задачі про магнітну потенціальну яму [1]. Тобто, розв'язок, координата x якого задовольняє одному з двох рівнянь

$$\Psi_1 L_2 = \Psi_2 L_{12}(x) \quad (7)$$

або

$$\Psi_2 L_1 = \Psi_1 L_{12}(x) \quad (8)$$

в залежності від значень параметрів Ψ_1 та Ψ_2 . Зокрема, внаслідок властивостей взаємної та власних індуктивностей при $\Psi_1 < \Psi_2$ виконуватиметься рівність (7), при $\Psi_1 > \Psi_2$ – рівність (8). Слід відмітити, що за умовами задачі про магнітну потенціальну яму на параметри

заморожених магнітних потоків накладаються наступні обмеження: $\Psi_1 \neq 0$, $\Psi_2 \neq 0$, $\Psi_1 \neq \Psi_2$.

Отже, вибравши з множини розв'язків системи (6) розв'язок $(\bar{x}, 0)$, який задовольняє одній з умов (7) або (8), виконаємо лінеаризацію системи диференціальних рівнянь (5) в околі даної точки рівноваги. Враховуючи, що координата $\bar{x}$ яка залежить від параметрів моделі, є константою в часі t , запишемо

$$\begin{pmatrix} \frac{dx_1}{dt} \\ \frac{dy_1}{dt} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + R(x_1, y_1),$$

де $x_1 = x - \bar{x}$, $y_1 = y$,

$$R(x_1, y_1) = \left(-\frac{1}{m} \frac{\partial U(x_1 + \bar{x})}{\partial x_1} \right) - A \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}.$$

Матриця A має вигляд:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{\partial}{\partial x_1} \left(-\frac{1}{m} \frac{\partial U(x_1 + \bar{x})}{\partial x_1} \right) & 0 \end{pmatrix} \bigg|_{(0,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \alpha_{21} & 0 \end{pmatrix}.$$

Побудуємо характеристичне рівняння лінеаризованої системи:

$$|\lambda E - A| = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ \alpha_{21} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \alpha_{21} = 0. \quad (9)$$

Згідно з критерієм стійкості автономної системи за першим наближенням якщо $\alpha_{21} > 0$, то незбурений розв'язок $(\bar{x}, 0)$ системи диференціальних рівнянь (5) нестійкий. При $\alpha_{21} < 0$ корені характеристичного рівняння матимуть нульові дійсні частини, отже в даному випадку незбурений розв'язок системи (5) буде стійким [4].

З точки зору механіки, отриманій умові стійкості можна дати наступну інтерпретацію. Як бачимо, знак елементу α_{21} визначається знаком другої похідної потенціальної енергії по механічній координаті в точці її екстремуму, оскільки значення $\bar{x}$ являється розв'язком другого рівняння системи (6). Отже, для виконання умови стійкості, за якою $\alpha_{21} < 0$, друга похідна потенціальної енергії в точці $\bar{x}$

повинна мати додатне значення, що є достатньою умовою існування мінімуму функції потенціальної енергії в даній точці. Дійсно, згідно [5], фінітний одновимірний рух динамічної системи можливий лише в потенціальній ямі, тобто в області мінімуму потенціальної енергії, обмеженій значеннями x_1 та x_2 (Рис. 2), які задовольняють рівнянню

$$U(x) = E,$$

де E – повна енергія системи.

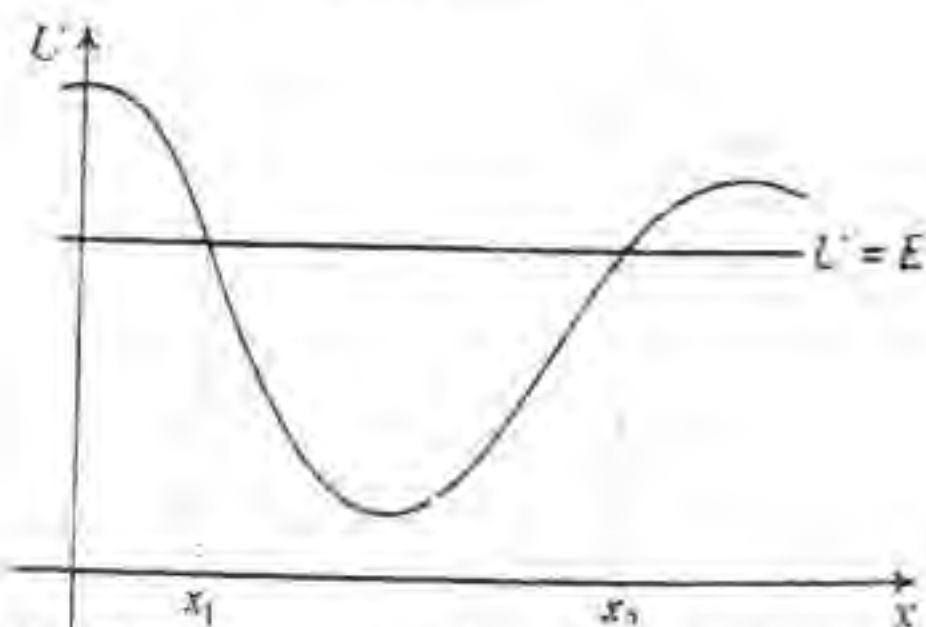


Рис. 2. Область одновимірного фінітного руху.

Обчислювальний експеримент

Слід відзначити, що елемент α_{21} матриці A є функцією від параметрів моделі, тобто, висновок про стійкість або нестійкість розв'язку $(\bar{x}, 0)$ системи (5) буде залежати від вибору значень цих параметрів. Оскільки маса вільного кільця не впливає на знак α_{21} , розглянемо простір параметрів, що складається з шести координат $a_1, a_2, L_1, L_2, \Psi_1, \Psi_2$. У даному просторі потрібно знайти множину таких векторів $p = (a_1, a_2, L_1, L_2, \Psi_1, \Psi_2)^T$ (T – знак транспонування), які задовольнятимуть отриманій умові стійкості за першим наближенням незбуреного розв'язку системи (5) [6]:

$$\Omega_p = \{p : \alpha_{21}(p) < 0\}.$$

Частинним випадком поставленої задачі є пошук підмножини векторів $\Omega_{\bar{p}} \subset \Omega_p$, елементи якої мають певну кількість фіксованих координат. Наприклад, поклавши константами параметри $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{L}_1, \bar{L}_2$, отримаємо множину $\Omega_{\bar{p}}$, яка складатиметься з наступних векторів:

$$\Omega_{\bar{p}} = \{\bar{p} = (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{L}_1, \bar{L}_2, \Psi_1, \Psi_2) : \alpha_{21}(\bar{p}) < 0\}.$$

Таким чином, в даному прикладі задача полягає в побудові області стійкості системи (5) згідно

Не змінюючи вектор параметрів $\bar{p}$ побудуємо другий частинний розв'язок задачі Коші задавши інші початкові значення фазових координат: $t_0 = 0,0$, $x_0 = 0,01$, $y_0 = 0,0$.



Рис. 7. Траєкторія фазової координати x .



Рис. 8. Траєкторія фазової координати y .

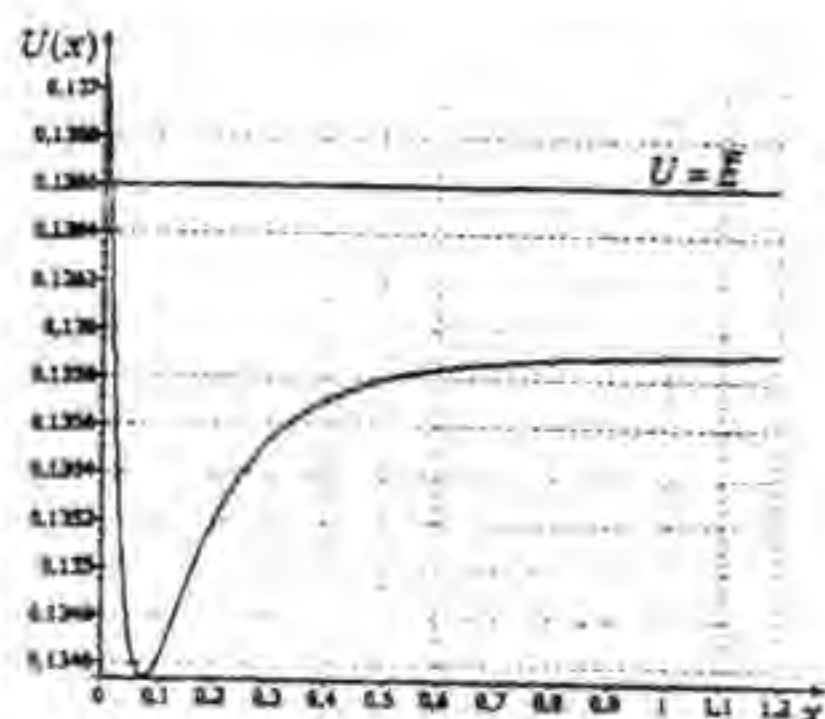


Рис. 9. Графік функції потенціальної енергії.

У даному випадку згідно отриманих траєкторій вільне кільце віддаляється від нерухомого на нескінченну відстань. Отже, отриманий частинний розв'язок системи (5) з вектором параметрів $\bar{p}$, який відповідає останнім заданим початковим умовам задачі Коші є нестійким.

Підсумовуючи вищесказане можна зробити висновок про те, що отримана умова $\alpha_{21} < 0$ згідно критерію стійкості автономної системи за першим наближенням визначає умови для існування одномірного фінітного руху системи. Однак, згідно даного методу, висновок про стійкість розв'язку нелінійної системи (5) стосується лише деякого достатньо малого околу точки рівноваги, в якій проводиться лінеаризація і не дає можливості отримати всю допустиму множину початкових фазових координат. Також

слід зауважити, що задача пошуку цієї множини ускладнюється наявністю параметрів в системі, які безпосередньо впливають на характеристики її розв'язків.

Висновки

У роботі розглянуто одновимірну динамічну модель магнітної надпровідної левітації, для якої за допомогою методу першого наближення визначена умова стійкості незбуреного розв'язку в залежності від вектору параметрів. Надано інтерпретацію отриманої умови з точки зору механіки. Формалізовано задачу пошуку області стійкості в просторі параметрів моделі у чисельному вигляді та знайдено розв'язок частинного випадку поставленої задачі, який полягає у побудові області стійкості за параметрами заморожених магнітних потоків відповідної динамічної системи. Для перевірки отриманих результатів з отриманої області був вибраний вектор параметрів, задовольняючий умові стійкості, та проведено порівняння властивостей відповідних йому розв'язків задачі Коші динамічної системи з різними початковими умовами.

Список використаних джерел

1. Козорез В.В. Динамические системы магнитно взаимодействующих свободных тел. – Киев: Наук. думка, 1981. – 131 с.
2. Смайт В. Электростатика и электродинамика. – М.: Изд-во иностр. лит., 1954. – 604 с.
3. Швець Д.В. Чисельно-аналітичний підхід до моделювання динамічної взаємодії двох надпровідних кілець // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2009. – №1. – С. 153-157.
4. Гаращенко Ф.Г., Матвієнко В.Т. Диференціальні рівняння: Навч. посіб. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2002. – 176 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика – 4-е изд. – М.: Наука, 1988. – 215 с.
6. Бублик Б.Н., Гаращенко Ф.Г., Кириченко Н.Ф. Структурно-параметрическая оптимизация и устойчивость динамики пучков. – К.: Наукова думка, 1985. – 304 с.

Надійшла до редколегії 12.10.09

РАДІОФІЗИКА

УДК 539: 544.182.5

О.Ю. Ананьїна, канд. ф.-м. наук, доц.,
П.А. Бутримов, аспірант, О.В. Северина,
інженер, А.В. Звонова, інженер

Квантово-хімічне дослідження геометричних та електронних властивостей нанокластерів графіту

У роботі було проведено моделювання нанокластерів графіту різної форми і розмірів. Досліджено залежність значення міжплощинної відстані в нанографітах від кількості атомів вуглецю в кластері, від форми кромки нанографітів і від наявності точкових дефектів.

Ключові слова: нанографіт, графен, кластер, вакансійний дефект, міжплощинна відстань.

*E-mail: ananina@zsu.zp.ua

Статтю представив д. ф.-м. н Скришевський В.А.

Вступ

Дослідження вуглецевих нанокластерів є фундаментальною проблемою сучасної науки про наноматеріали. Графіту і, особливо такій його двомірній формі як графен, останнім часом приділяється дуже багато уваги. В основному цей інтерес викликаний широким спектром унікальних фізико-хімічних властивостей даних матеріалів. Нанорозмірні вуглецеві системи, такі як нанографіт та нанографен, мають відкриті краї (відкриту π -електронну систему), що принципово відрізняє їх від фулеренів та нанотрубок, яким властива замкнута π -електронна система.

Згідно рентгеноструктурним даним [1], нанографіти можуть складатися з 3-4 шарів нанографенів. Середній розмір нанографену у площині - 20 Å (при квадратній формі шару до його складу ввійдуть приблизно 110 атомів), середня відстань між площинами $d=4,05\pm0,03$ Å, при тому, що відстань між площинами у графіті становить 3,4 Å. Значення міжплощинної відстані в нанографітах є важливим параметром, який впливає на значення енергії міжплощинної взаємодії в нанографітах. Відомо, що міжплощинна взаємодія значно змінює всі властивості електронного газу в графіті, призводить до змін в електронній будові поблизу рівня Фермі, впливає на рухливість носіїв заряду й т. п. Крім того, у нанографені краї можуть містити випадкову комбінацію сітло- та зигзагоподібних ділянок. Розрахунки [2]

O.Y. Ananina, PhD, ass. prof., P.A. Butrimov,
post. grad. student, O.V. Severina, engineer,
A.V. Zvonova engineer

Quantum-chemical study of graphite nanoclusters geometric and electronic properties

The modeling of graphite nanoclusters of different size and form of edges are provided in the work. The value of interlayer distance in nanographites as a function of number of atoms in the layer, the dependence of interlayer distance from the form of edges and presence of point defects in nanographites were estimated. Geometrical and electronic characteristics of graphite nanoclusters were calculated.

Key Words: nanographite, graphene, cluster, vacancy defects, interlayer distance.

показують, що електронна структура нанографену критично залежить від форми його країв. В нанографенах та нанографітах з зигзагоподібними краями реалізується особливий крайовий π -електронний стан. Він не є притаманним макроскопічному графіту і не викликаний крайовими σ -зв'язками, а обумовлений особливостями топології сітки π -електронів зигзагоподібних крайових рядів атомів. Густина заряду в крайовому стані в основному локалізована в зигзагоподібних позиціях. У розрахунках електронної будови нанографенів з сітлоподібними краями подібний крайовий стан не виникає. В той же час результати СТМ та розрахунки повної енергії нанокластерів показують, що найбільш ймовірним та енергетично вигідним є отримання та існування нанокластерів графіту (графену) з сітлоподібними краями.

Метою даної роботи є дослідження залежності міжплощинної відстані в нанокластерах графіту від кількості атомів в шарі, від форми країв та присутності точкових дефектів.

Методика проведення розрахунків

Найбільш детальне теоретичне описання геометричних і електронних властивостей нанокластерних систем отримують за допомогою квантово-хімічних методів. Специфіка кластерних систем (обмежена кількість атомів, широкий діапазон розмірів, присутність

обриваних зв'язків) призводить до необхідності проведення досліджень з використанням різних методів, так як ні один з квантово-хімічних методів не є оптимальним. Відмінною рисою кластерів є залежність їхніх властивостей від кількості атомів в системі. Кожен кластер є «індивідуальним», два кластери, які відрізняються іноді навіть незначною зміною положення атомів, слід вважати різними – їх властивості будуть різними. В експерименті ж досліджуються усереднені, макроскопічні властивості системи.

В даній роботі моделювання нанографітів проводилося з використанням групи методів: напівемпіричних MNDO, MINDO/3, AM1 та PM3, що входять до пакету MOPAC, а також методів ab initio Хартрі-Фока і метода Хюккеля, які входять до програми GAMESS. Початкові кластери будувалися, виходячи з геометричних даних розміщення атомів в кристалах графіту, тобто атоми вуглецю розміщувалися у вершинах гексагональних площинних ґраток на відстані 1,4 Å один від одного. Початкова відстань між площинами встановлювалась 3,4 Å. Обірвані зв'язки атомів вуглецю у площині насичувалися атомами водню. В подальшому оптимізація геометрії здійснювалась шляхом пошуку мінімуму повної енергії системи. Розраховувались геометричні параметри кластера, енергія кластера, порядки зв'язків атомів, заселеності атомних орбіталей, молекулярні, локалізовані орбіталі, енергетичний спектр системи та густина станів.

Результати та їх обговорення

Було проведено дослідження міжплощинної відстані в нанокластерах графіту в залежності від кількості атомів в кластері за допомогою використання напівемпіричних методів. Шари в нанокластерах мали змішані краї, насичені атомами водню. Для кластера $C_{60}H_{36}$ (рис. 1), що вміщує по 20 атомів у шарі, в результаті оптимізації геометрії було отримано три графенових листа, повернутих (розорієнтованих) один відносно одного та віддалених на відстань більшу за 4 Å (між двома найближчими атомами сусідніх графенових листів). Подібна поведінка спостерігалась і для кластерів $C_{72}H_{36}$ і $C_{90}H_{42}$, які містять по 24 та 30 атомів у шарі.



Рис. 1. Результат оптимізації геометрії нанокластера $C_{60}H_{36}$.

Таблиця 1. Геометричні та електронні характеристики нанокластерів графіту

кластер	вид кромки	довжина зв'язку C-C, Å	заряд на атомах C, e	порядок зв'язку C-C
$C_{48}H_{24}$	зиг-заг	1,39 ÷ 1,45	-0,046 ÷ -0,003	1,17 ÷ 1,68
$C_{60}H_{36}$	змішаний	1,40 ÷ 1,46	-0,067 ÷ -0,001	1,19 ÷ 1,66
$C_{96}H_{48}$	змішаний	1,34 ÷ 1,45	-0,15 ÷ +0,016	1,15 ÷ 1,76
$C_{126}H_{54}$	змішаний	1,34 ÷ 1,47	-0,22 ÷ +0,005	1,20 ÷ 1,54
$C_{200}H_{80}$	зиг-заг	1,34 ÷ 1,50	-0,40 ÷ +0,015	1,13 ÷ 1,70

Таблиця 2. Залежність відстані між площинами від кількості атомів в кластері

кластер	вид кромки	MNDO d, Å	PM3 d, Å	AM1 d, Å	MINDO/3 d, Å	метод Хартрі-Фока, d, Å
$C_{60}H_{36}$, 20x3	змішаний	4,3*	4,2*	4,3*	4,1*	4,1*
$C_{72}H_{36}$, 24x3	зиг-заг	4,0*	3,8*	3,9*	4,0	
$C_{96}H_{48}$, 32x3	змішаний	3,7	3,8	3,7	4,0	3,8
$C_{126}H_{54}$, 42x3	змішаний	3,8				3,9
$C_{200}H_{80}$, 50x4	зиг-заг					4,1

* - відстань вказано між найближчими атомами вуглецю в двох сусідніх шарах графену розвернутих один відносно одного в нанокластері графіту.

В результаті розрахунків оптимізації геометрії було отримано геометричні та електронні характеристики кластерів (таб. 1). В оптимізованих кластерах порушується симетрія гексагональних ґраток і атоми вуглецю змінюють своє положення, зміщуючись вздовж трьох координатних вісей.

Варто зазначити, що зі збільшенням кількості атомів у шарі зменшується значення міжплощинної відстані (таб. 2) і явно не проявляється поворот площин одна відносно одної.

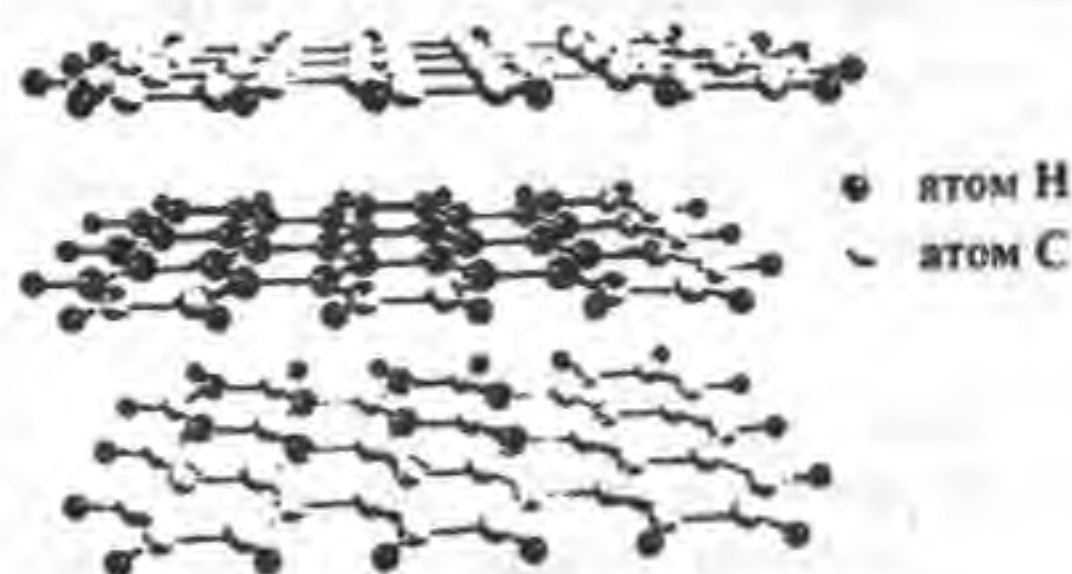


Рис. 2. Нанокластер графіту $C_{126}H_{54}$ після оптимізації геометрії.

Дослідження геометричних і електронних параметрів нанокластера $C_{126}H_{54}$ після оптимізації геометрії (рис. 2) показує, що:

1. Спостерігається розподіл заряду безпосередньо біля кромки шарів, такий, що на атомах вуглецю зосереджено заряд $-0,22e \div -0,17e$, а на атомах водню $+0,22e \div +0,25e$. В середині шару заряд на атомах вуглецю практично відсутній ($0,05e \div -0,05e$).

2. Спостерігається зміщення атомів вуглецю вздовж трьох координатних вісей відносно їх початкового положення, що призводить до порушення симетрії гексагональних ґраток, але в цілому значних змін у вигляді кластера не відбувається.

3. Спостерігаються значні відмінності в довжинах зв'язків C-C розташованих паралельно сідлоподібній кромці. Довжини зв'язків C-C, показані на рис. 3 суцільними лініями, становлять $1,42 \text{ \AA} \div 1,44 \text{ \AA}$; довжини зв'язків, показані на рис. 3 пунктиром, становлять $1,49 \text{ \AA} \div 1,46 \text{ \AA}$. Подібних відмінностей в довжинах

зв'язку C-C паралельних зигзагоподібній кромці не спостерігається ($1,40 \text{ \AA} \div 1,43 \text{ \AA}$).

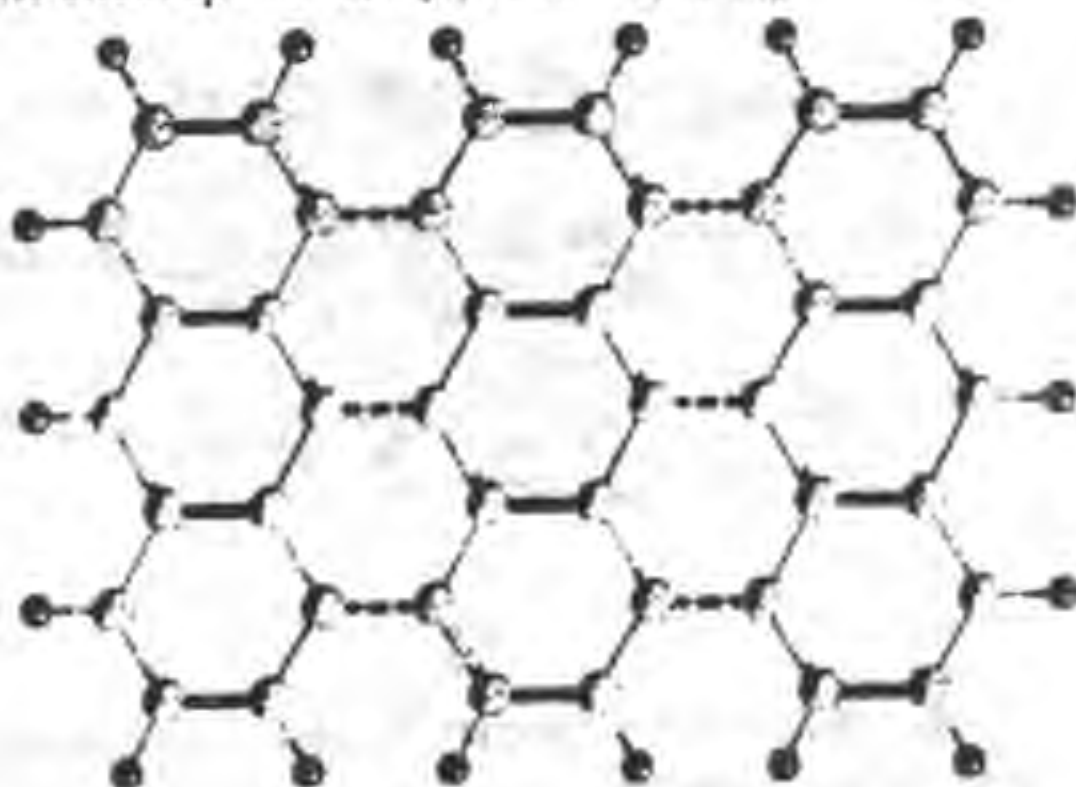


Рис. 3. Один із шарів нанокластера графіту $C_{126}H_{54}$.

Таким чином, розрахунки, які проводилися з використанням напівемпіричних методів показали, що відстань d_0 між графеновими листами зі змішаними краями, обірвані зв'язки на яких насичені атомами водню, і які містять до 40 атомів у шарі, лежить в межах $4,3 \div 3,7 \text{ \AA}$.

Розглянемо нанокластер графіту $C_{200}H_{80}$, який містить 4 шари з зигзагоподібними краями, насиченими атомами водню (рис. 4).

Аналіз міжплощинної відстані ускладнений тим, що в результаті оптимізації геометрії, атоми в площинах нанокластера розташовані хаотично. Однак, якщо провести порівняння величини $2d_0$ і $2d$ (де $d_0 = 3,4 \text{ \AA}$ і d – величина відстані між ідентичними атомами вуглецю в 1 і 3 площині до і після оптимізації відповідно), спостерігається тенденція до збільшення значення d . Для різних пар атомів значення d лежить в межах $3,86 \text{ \AA} \div 4,16 \text{ \AA}$. Дослідження геометричних та електронних параметрів нанокластера $C_{200}H_{80}$ після оптимізації геометрії показало, що:

1. Спостерігається розподіл заряду безпосередньо біля кромки шарів (таб. 1), такий, що на атомах вуглецю зосереджено заряд $-0,40e \div -0,15e$, а на атомах водню $+0,10e \div +0,20e$. У середині шару на атомах вуглецю зосереджено незначний заряд $+0,005e \div +0,015e$. В такому кластері перерозподіл заряду між атомами є більш значним, ніж у кластері зі змішаною кромкою.

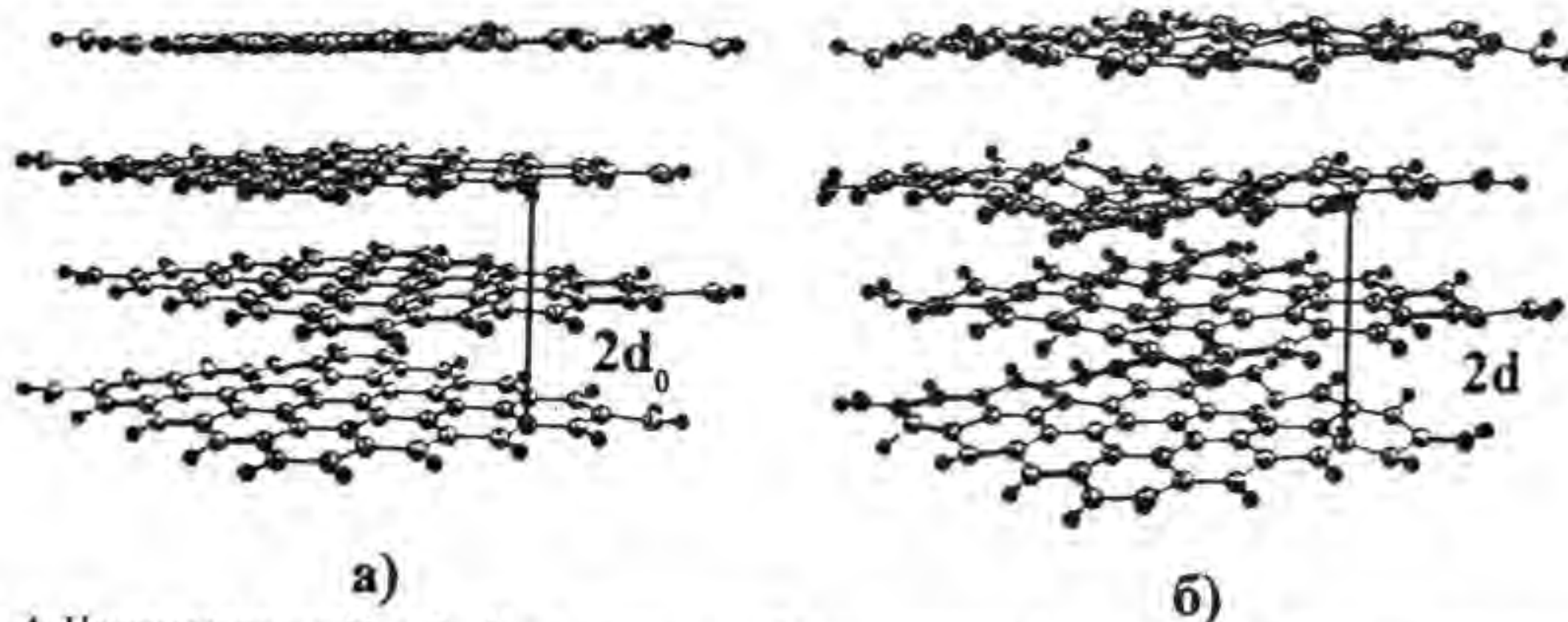


Рис. 4. Нанокластер графіту $C_{200}H_{80}$ з зигзагоподібними краями: а) до оптимізації геометрії; б) після оптимізації геометрії.

2. Атоми вуглецю зазнали значного зміщення відносно початкових положень. В роботі [3] вказується на нестабільність графенів з зигзагоподібною кромкою і на можливість реконструкції кромки, що призведе до зниження енергії кромки на 0,35 еВ/А. Очевидно, що прагнення зигзагоподібною кромкою до реконструкції і є причиною більш значного зміщення атомів в порівнянні з нанографеном зі змішаною кромкою.

У кластері $C_{126}H_{54}$ було проведено моделювання вакансійного дефекту, шляхом видалення одного з атомів у другому шарі. У результаті оптимізації геометрії кластера $C_{125}H_{54}$ з дефектом спостерігаються значні зміни в геометрії другого шару кластера, значення міжплощинної відстані зростає в порівнянні з бездефектним кластером і складає $3,91 \text{ \AA} = 4,16 \text{ \AA}$ (рис. 5).

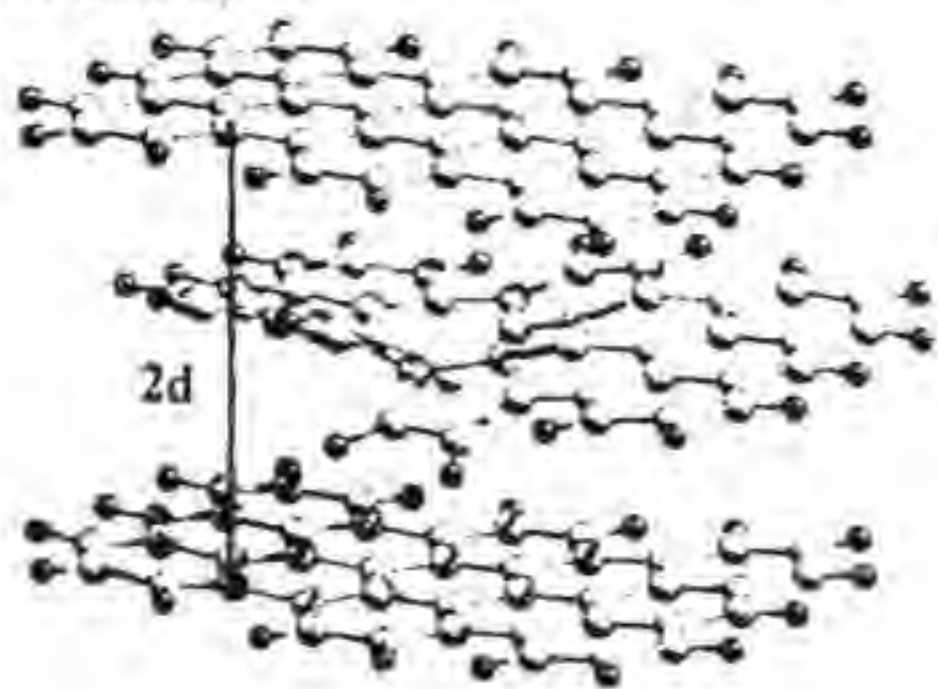


Рис. 5. Нанокластер $C_{125}H_{54}$ з вакансійним дефектом після оптимізації геометрії.

Для нанокластера $C_{199}H_{80}$ із вакансійним дефектом і зигзагоподібною границею теж спостерігаються значні зсуви атомів другого

шару (де присутня вакансія), значення міжплощинної відстані зростає і складає $3,96 \text{ \AA} - 4,21 \text{ \AA}$.

Висновки

Таким чином, з проведених досліджень можна зробити наступні висновки:

1. Кластери нанографіту, які не містять точкових дефектів і мають у шарі невелику кількість атомів (до 40), є сукупністю слабо взаємодіючих нанографенів. На нашу думку, існування таких графітових нанокластерів як єдиного цілого не спостерігається, і неможливо.

2. Форма країв нанокластера впливає на значення міжплощинної відстані. Значення міжплощинної відстані в нанокластерах з зигзагоподібною границею є більшим, ніж в нанокластерах зі змішаною.

3. Наявність вакансійних дефектів в нанокластерах графіту призводить до збільшення значень міжплощинної відстані в них, які співпадають з експериментально спостережуваними.

Список використаних джерел

1. Знатдинов А.М., Нанографены и нанографиты: синтез, строение и электронные свойства // Вісник ДВО РАН. - 2006. - №5. С. 57-64.
2. Kobayashi Y., Takai K., Fukui K., Enoki T., Harigaya K., Kaburagi Y., and Hishiyama Y. STM observation of the quantum interference effect in finite-sized graphite // Phys. Rev. B. -2004. - 69. 035418.
3. Koskinen P., Malola S. and Hakkinen H., Planar Reconstructions of Graphene Edges // Cond-mat.mtrl-sci. - 2008. - 1. 0802.2623.

Надійшла до редколегії 18.06.2009

УДК 621.382

Іванов І.І., Скришевський В. А. д. ф-м. н.,
професор.

Вплив адсорбційно-десорбційних явищ на спектральні характеристики Бреґівських дзеркал на основі поруватого кремнію

Була досліджена адсорбційно-десорбційна кінетика молекул етилового спирту в Бреґівському дзеркалі на основі поруватого кремнію. Ширина, інтенсивність та положення Бреґівського піку були використані як параметри, що визначають поведінку структури як сенсора і керованого рефлектора. Вплив заповнення пор на спектральні залежності коефіцієнта відбиття Бреґівського дзеркала було промодельовано використовуючи матричний метод. Було показано, що завдяки адсорбційно-десорбційним процесам молекул спирту в поруватому середовищі (шарах) спектральна залежність коефіцієнта відбиття залежить від часу. Цей ефект може бути використаний для детектування молекул різного типу і налаштування спектрального відгуку Бреґівського дзеркала.

Ключові слова: сенсори, кінетика, Бреґівське дзеркало, рефлектор.

*E-mail: ivancko@gmail.com

Статтю представив д. ф-м. н. Анісімов І. О.

Вступ

Очікується, що багатошарові структури на основі поруватого кремнію (ПК) - Бреґівські дзеркала (БД) - можуть дати імпульс до розвитку біо- і газових сенсорів, біомедицинної діагностики, систем адресної доставки ліків [2]. Порівняно з одним шаром ПК коефіцієнт відбиття багатошарової структури в вузькому спектральному діапазоні може досягнути 99.5% [3]. Відбиття зростає завдяки інтерференції променів після багатократного відбиття променів від шарів, що мають модульований показник заломлення [7]. Звичайно такі оптичні параметри багатошарової структури як: положення максимуму Бреґівського піку (БП) і інтенсивність використовуються для детектування присутності хімічної речовини. Залежності від часу оптичних параметрів, що

Ivanov I. I., Skryshevsky V.A. Doct. Sci., professor

Effect of adsorption-desorption phenomena on spectral characteristics of porous silicon Bragg mirror

Adsorption-desorption kinetic of ethanol molecules were studied in porous silicon Bragg mirror. Bragg peak width, intensity and position were used as parameters that determine the behavior of structure as sensor and controlled reflector. Effect of pores filling on spectral dependences of reflection coefficient of Bragg mirror was simulated with matrix method. It was shown that due to adsorption-desorption of molecules in porous medium (layers) the spectral response of Bragg mirror is time depended. This effect can be used to detect the different molecules and Bragg mirror spectral response tuning.

Key Words: sensors, kinetics, Bragg mirror, reflector.

визначаються зміною концентрації газу в порах БД також використовуються для детектування [4].

Також БД на основі ПК можуть бути використані як тислові рефлектори в сонячних елементах для збільшення довжини поглинання інфрачервоних фотонів [1]. Використання БД дозволило отримати збільшення оптичного шляху променів в 7 разів в області 900-1200 нм і збільшення струму короткого замикання на 12% [5] і на 14% [6] порівняно з СЕ без БД.

БД на основі ПК - це багатошарова структура, кожен шар якої характеризується певною величиною поруватості і має оптичну товщину $\lambda/4$. У випадку адсорбції речовини з навколишнього середовища в порах шарів БД показники заломлення шарів змінюються і відповідно спектральна характеристика БД

відхиляється від розрахованої. Відхилення спектральної характеристики БД веде до зміни параметрів СЕ з БД, яке використовується як тиловий рефлектор. Тому інформація про вплив процесів адсорбції і десорбції в порах поруватого БД є необхідною при створенні СЕ з БД на основі ПК. З іншого боку, завдяки частковому заповненню пор БД речовинами з підібраними показниками заломлення, можливо модифікувати БД і отримати необхідний спектральний відгук БД.

Моделювання і експеримент.

Було досліджено вплив адсорбції/десорбції етилового спирту на положення і інтенсивність максимуму БП на довжині хвилі $\lambda = \lambda_0 = \lambda_0^{\max}/3$; $\lambda_0=700$ нм, $\lambda_0=803$ нм $\lambda_0=870$ нм.

Таблиця 1

Параметри БД						
λ_0	n_H	n_L	l_H	l_L	P_H	P_L
nm			nm	nm		
700	2.4	1.4	219	375	0.55	0.91
803	2.4	1.4	250	430	0.55	0.91
870	2.4	1.4	281	482	0.55	0.91

Було вибрано етиловий спирт, так як він добре змочує ПК і відповідно легко входить в пори.

В даній роботі було проаналізовано кінетику адсорбційно-десорбційних процесів в структурах на основі поруватого кремнію за допомогою вимірювання коефіцієнта відбиття Бреггівського дзеркала. Також було промодельовано вплив заповнення пор БД етиловим спиртом на спектральні характеристики БД.

Для отримання спектральних залежностей від часу було використано як детектуючий елемент спектрометр з CCD-матрицею.

Ширина піка на довжині хвилі λ_0 менше чим ширина піка на довжині хвилі $\lambda_0^{\max}$, що дозволяє більш точно дослідити кінетику адсорбційно-десорбційних процесів в поруватих шарах БД. Параметри БД, що досліджувались наведені в Таблиці 1.

Показник заломлення кожного шару БД у випадку заповнення пори етиловим спиртом визначається згідно формули 1.

$$n = \sqrt{V_{air} \epsilon_{air} + V_{alc} \epsilon_{alc} + (1 - P) \epsilon_{Si}} \quad (1a)$$

$$P = V_{air} + V_{alc} = V_{pore} \quad (1b)$$

де V_{alc} – об'єм пори зайнятий спиртом, ϵ_{alc} – діелектрична стала спирту, V_{air} – об'єм пори зайнятий повітрям, ϵ_{air} – діелектрична стала повітря, V_{pore} – об'єм пори.

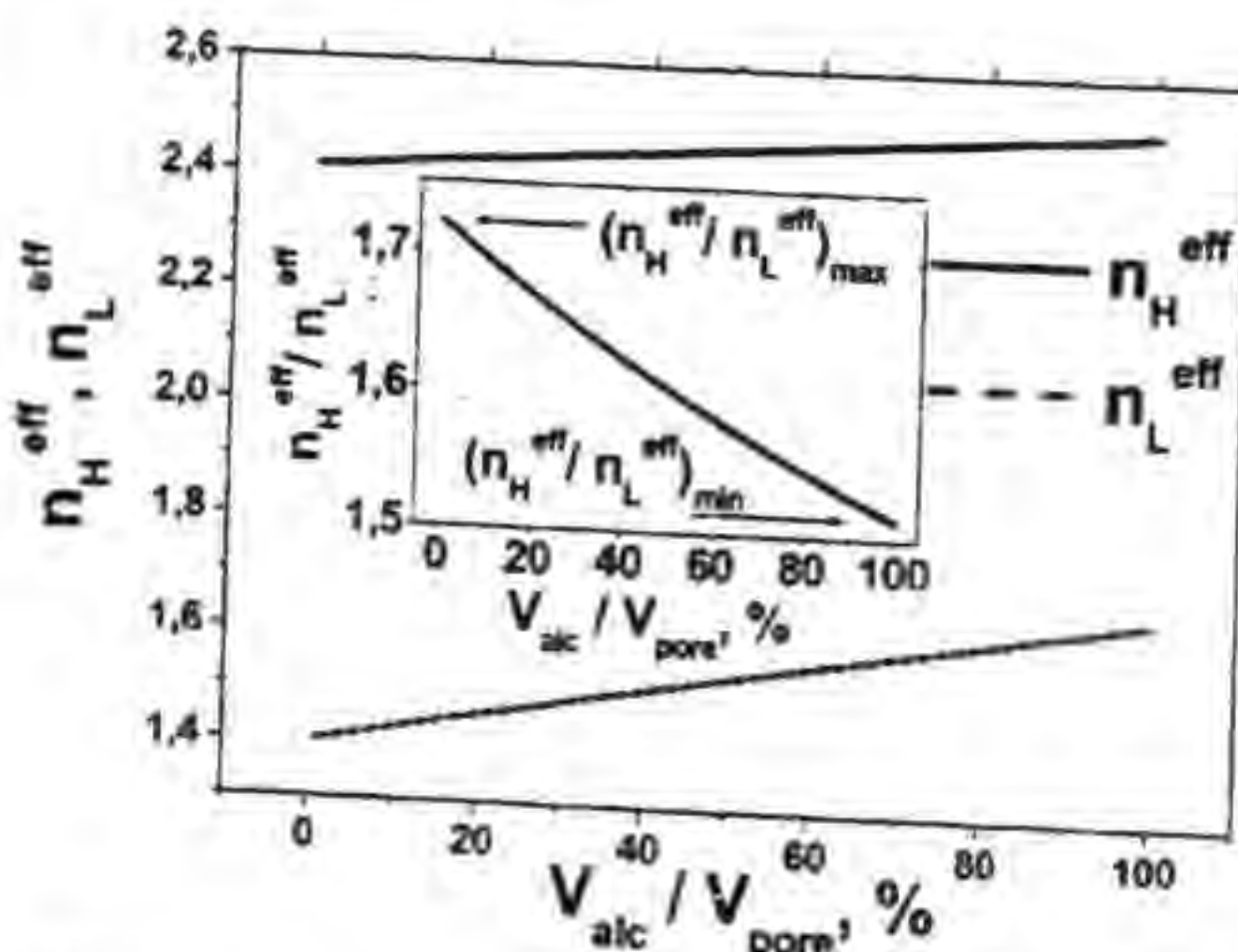


Рис. 1. Залежність коефіцієнтів заломлення n_H^{eff} , n_L^{eff} шарів ПК з великою і малою поруватістю в залежності від ступеню заповнення пори етиловим спортом

На рис. 1 наведені розраховані за допомогою Matlab залежності ефективних коефіцієнтів заломлення n_H^{eff} , n_L^{eff} шарів ПК з великою і малою поруватістю в залежності від ступеню заповнення пори етиловим спиртом V_{alc}/V_{pore} .

При заповненні пори спиртом від $V_{alc}/V_{pore}=0\%$ до $V_{alc}/V_{pore}=100\%$ n_H^{eff} , n_L^{eff} зростають. Одночасно відношення n_H^{eff}/n_L^{eff} зменшується від 1.72 до 1.51

Залежність спектру відбиття БД від коефіцієнта заповнення пор $F_{pore}=V_{alc}/V_{pore}$ наведена на рис. 2.

Збільшення величини коефіцієнта заповнення F_{pore} від 0% до 100% веде до зсуву положення БП з 802 нм до 893 нм. Ширина БП зменшується в 1.16 разів від 100 нм до 86 нм. Величина коефіцієнта відбиття в максимумі залишається практично постійною і повільно зменшується на 0.1% (рис. 3).

Для моделювання було використано припущення, що $V_{alc}/V_{pore}=\text{const} \neq(z)$ для всіх z : $0 \leq z \leq L$, де L – товщина БД.

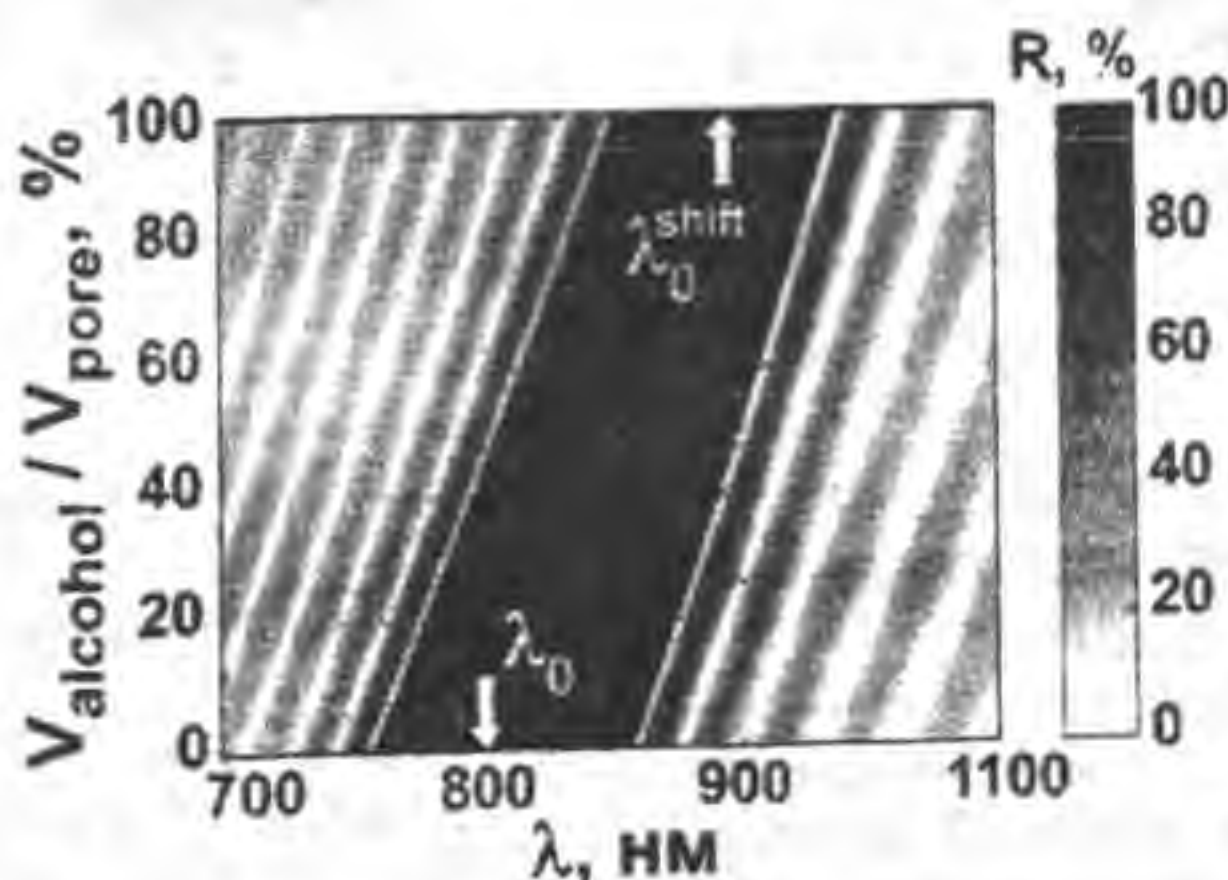


Рис. 2. Залежність коефіцієнта відбиття БД R з 10 бі-шарами від відношення V_{alc}/V_{pore} і від довжини хвилі

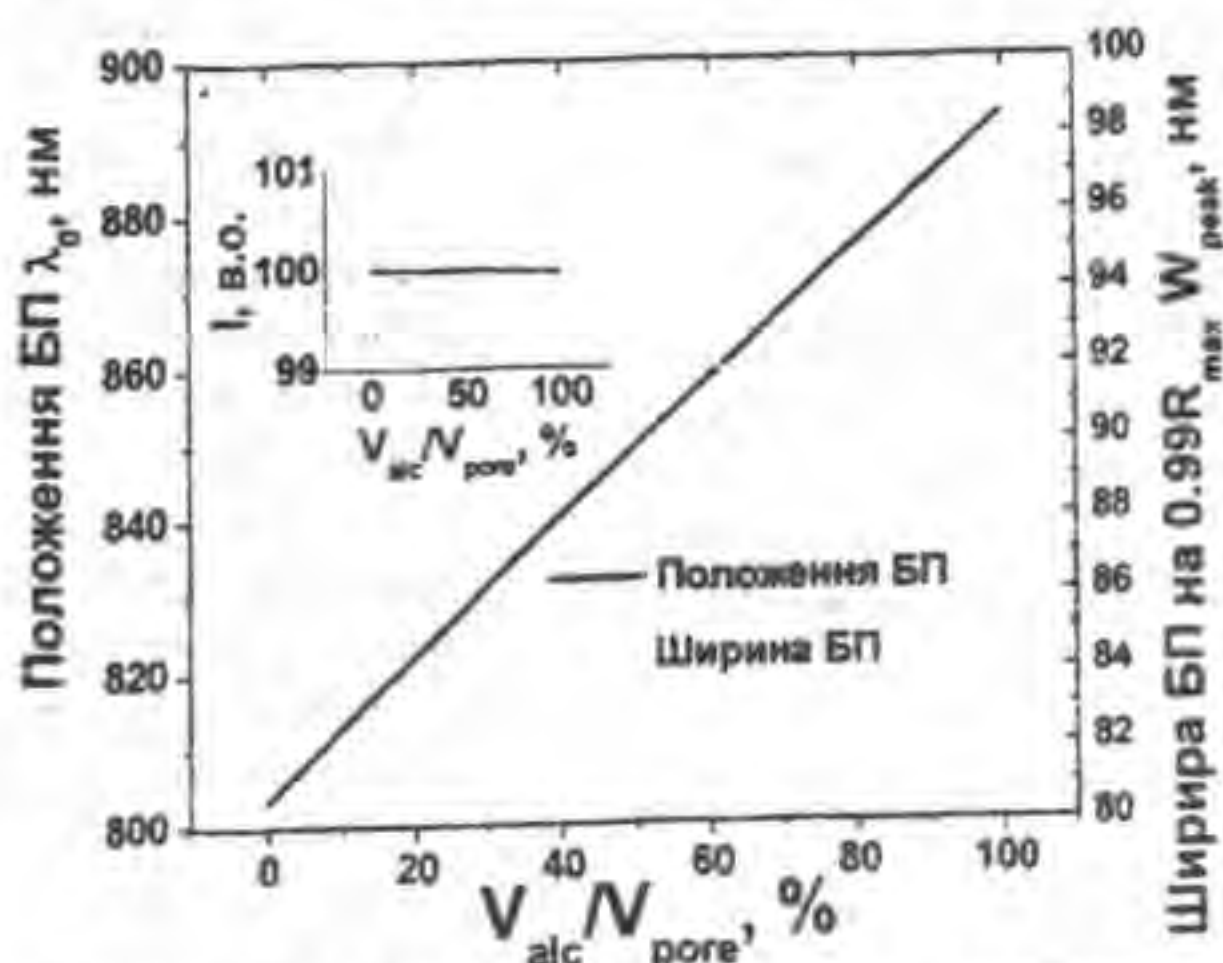


Рис. 3. Залежність коефіцієнта відбиття БД в максимумі, положення піка, ширини БП від відношення V_{alc}/V_{pore}

На рис. 4 наведена кінетика зміни спектра відбиття Бреггівського дзеркала з $\lambda_0=803$ нм до та після нанесення на поверхню дзеркала етилового спирту. Максимум відбиття відповідає чорному кольору. Чітко прослідковується зсув БП в

довгохвильову область зі зміною положення піку від $\lambda_0=803$ нм до $\lambda_0^{shift}=871$ нм.

Час t_0 відповідає моменту нанесення етилового спирту на поверхню Бреггівського

дзеркала. Зона В ($t_0 < t < t_d$) відповідає випаровуванню спирту з поверхні. В момент часу t_d починається процес десорбції абсорбованих молекул спирту з об'єму поруватого кремнію (ПК). Зона С ($t_d < t < t_r$)

відображає кінетику десорбції спирту з пор ПК. Зона D ($t > t_r$) відповідає стану, коли спектральний відгук дзеркала повернувся до початкового стану.

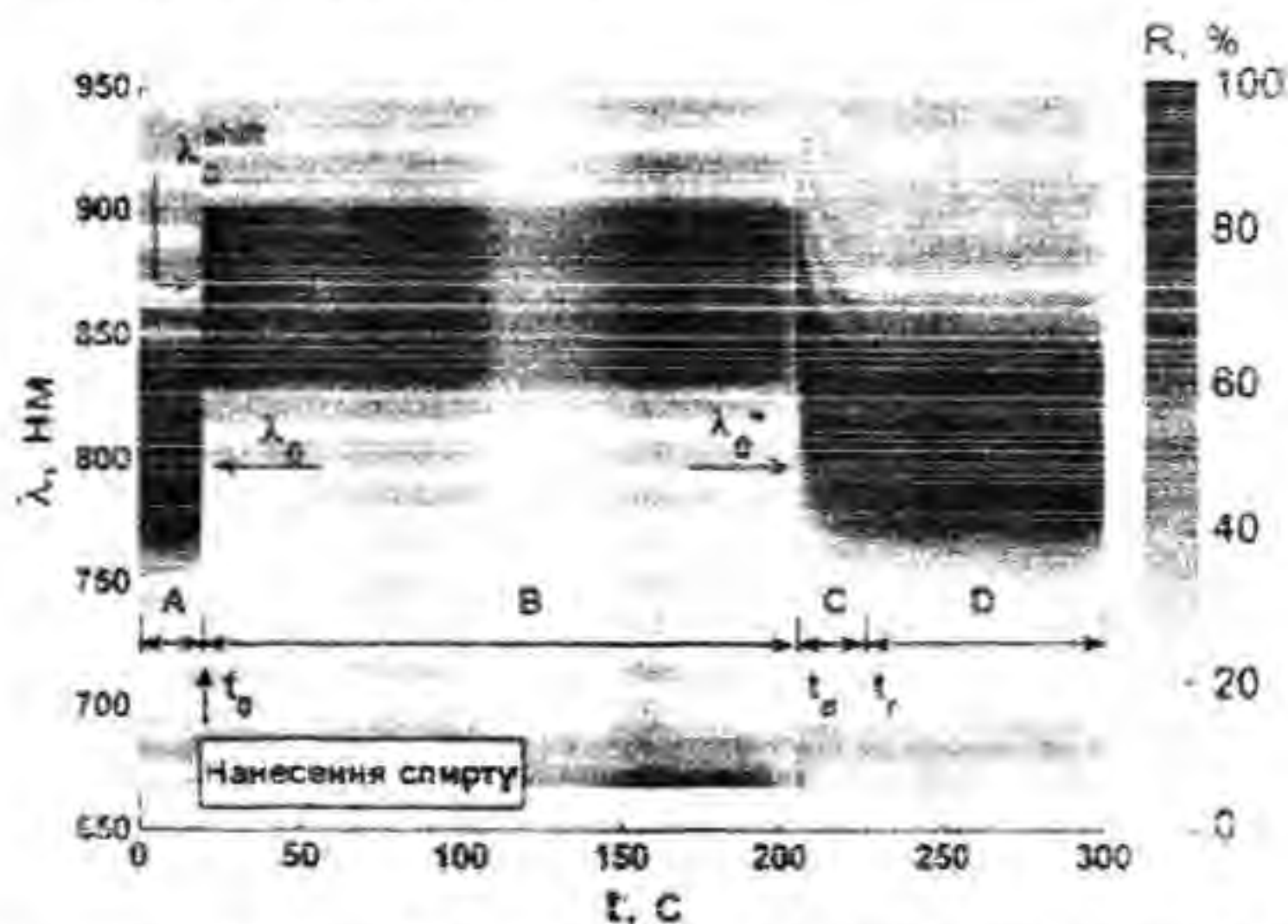


Рис. 4. Залежність спектру відбиття БД з $\lambda_0=803$ нм від часу під час процесів абсорбції/десорбції етилового спирту нанесеного на дзеркало.

Висновки

Результати моделювання та результати експерименту показують, що параметри БП, а саме: положення БП та ширина БП, можуть бути контрольовані введенням речовини з заданим показником заломлення в пори БД на основі ПК.

Використовуючи явища адсорбції-десорбції в порах БД з ПК і досліджуючи кінетику спектральних залежностей, можна створити сенсорні елементи для детектування наявності і визначення концентрації хімічних речовин у навколишньому середовищі.

Для СЕ з БД на основі ПК абсорбція речовин з навколишнього середовища в порах ПК є небажаним явищем, яке може призвести до зміни параметрів СЕ. Тому необхідно забезпечити захист поруватої поверхні БД шляхом нанесення захисного покриття.

Список використаних джерел

1. Green M. A. Third Generation Photovoltaics: Advanced Solar Energy Conversion – Springer. – Berlin – 2003. – 160 p.
2. Parkhutik V. Analysis of Publications on Porous Silicon: From Photoluminescence to Biology //

Journal of Porous Materials. – 2000. – 7. – P. 363-366.

3. Setzu S., Ferrand P., Romestain R. Optical properties of multilayered porous silicon //, Materials Science and Engineering. – 1999. – 34. – P. 69-70.
4. Mulloni V., Gahurgo Z., Pavest L. Porous silicon microcavities as optical and electrical chemical sensors // Phys. state solid(a). – 2000. – 182. – P. 479-484.
5. Duerinck F., Kuzma-Filipek I., Nieuwenhuysen V., Beaucarne G., Poortmans J. Reorganized porous silicon Bragg reflectors for thin-film silicon solar cells // Electron Device Letters. – 2006. – 27(10). – P. 837 – 839.
6. Kuzma-Filipek I., Duerinckx F., Van Nieuwenhuysen K., Beaucarne G., Poortmans J. Plasma texturing and porous silicon mirrors for epitaxial thin film crystalline silicon solar Cells // Electron device letters. – 1996. – 27(10). – P. 837 – 839.
7. Salem M.S., Sailor M.J., Fukami K., Sakka T., Ogata Y.H. // Proc. 6 Int.Conf. Porous Semiconductors Science and Technology. – 2008. – P. 107-112.

Надійшла до редколегії 10.06.2009

УДК 539.2.01

Ільченко* В.В., д.ф.-м.н., проф., Ільченко** Л.Г.,
к.ф.-м.н., с.н.с., Лобанов** В.В., д.х.н., п.н.с.

*Київський університет імені Тараса Шевченка,
Радіофізичний ф-т, вул.Володимирська 64, Київ.
**Інститут хімії поверхні НАН України ім.
О.О.Чуйка, вул.Генерала Наумова 17, Київ, 03164

Розподіл електростатичного потенціалу в системі напівпровідник - вакуум – метал у відсутності зовнішньої напруги.

В роботі в рамках нелокальної електростатики для квазінейтральної поверхні металу розрахований зарядовий потенціал для системи напівпровідник-вакуум-метал (НВМ) у відсутності контакту та зовнішньої напруги. На прикладі системи *n*-Si-вакуум-Au проведено аналіз впливу металу на формування області просторового заряду (ОПЗ) для невідродженого напівпровідника *n*-типу. Показано, що присутність на відстані $L < L_{OPZ}$ (L_{OPZ} – товщина ОПЗ) квазінейтральної поверхні металу призводить до часткової компенсації поверхневого заряду напівпровідника. При зменшенні роздільної відстані L ступінь екранування поверхневого заряду вільними електронами металу суттєво посилюється.

Ключові слова: потенціальний бар'єр, потенціал сил зображення, нелокальна електростатика

E-mail: vai@mail.univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Анісімов І.О.

Вступ

Визначення форми та висоти потенціального бар'єру, який виникає між близько розділеними вакуумним проміжком напівпровідником та металом, – ключова задача фізики напівпровідників та вакуумної електроніки [1,2].

Потенціальний бар'єр між твердими тілами, розділеними невеликим проміжком, який зумовлений різницею в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ ($j = 1, 2, 3$) і визначається розподілом потенціалу сил

V.V. Il'chenko*, Dr.Sci., Prof., L.G.Il'chenko**,
Dr.Ph., V.V.Lobanov**, Dr.,Sci.

*Radiophysical Dept., Kiev University,
Volodimirska st. 64, Kiev, 01033, Ukraine
**Chuiko Institute of Surface Chemistry NAS of
Ukraine, General Naumov Str. 17, Kiev, 03164

The electrostatic potential distribution in the semiconductor - vacuum – metal system in the absence of the external voltage.

In this work in the framework of non-local electrostatics for the semiconductor-vacuum-metal system the electrostatic potential is calculated in the absence of the contact and the external voltage. The analysis the influence of the metal on the forming of the space charge region (SCR) for the nondegenerate semiconductor of *n* – type is investigated on the example of the *n*-Si-vacuum-Au system. It is shown that the presence on the distance $L < L_{OPZ}$ (L_{OPZ} is the SCR thickness) of the quasi-neutral surface of a metal results in the partial compensation of the density of charge on the semiconductor surface. The degree of the screening of the semiconductor surface charge by the free electrons of a metal essentially increases with decreased separation distance L .

Key words: potential barrier, the image potential, non-local electrostatics

зображення $V_j^0(x)$, утворюється при зменшенні вакуумного інтервалу до $L < 5$ нм. В роботах [4,5] було встановлено, що неперервність $V_j^0(x)$ (поляризаційного потенціалу) між двома близько розділеними вакуумним проміжком твердими тілами (металами, напівпровідниками чи діелектриками) обумовлена коректним врахуванням просторової дисперсії в їх функціях діелектричної проникності, а одержаний в рамках нелокальної електростатики потенціальний бар'єр $V_j^0(x)$ суттєво відрізняється від класичного [4,5].

В [4,5] показано, що неперервність потенціалу сил зображення $V_j^0(x)$ на межах розподілу та єдиний (вакуумний) рівень відліку

енергії в системі напівпровідник-вакуум-метал (НВМ) забезпечується врахуванням ефектів просторової дисперсії в функціях діелектричної проникності напівпровідника $\epsilon_1(\vec{k})$ (екранування кристалічною ґраткою в наближенні Інсона [7]) та вільними носіями в наближенні Дебая-Хюккеля (НДХ) (у випадку невідродженого електронного газу) і металу $\epsilon_3(\vec{k})$ (екранування електронами в наближенні Томаса-Фермі (НТФ)).

У випадку наявності заряду на поверхнях напівпровідника з густиною $\sigma_1 \neq 0$ та металу з густиною $\sigma_2 \neq 0$ розподіл повного потенціалу $V_j(x)$ в системі НВМ змінюється завдяки зарядовій компоненті $\Delta V_j^\sigma(x)$, яка обумовлює також виникнення областей просторового заряду (ОПЗ) в напівпровіднику [1,2,6].

В даній роботі в рамках нелокальної електростатики [3-5] для квазінейтральної поверхні металу, коли $\sigma_2 = 0$, розрахований зарядовий потенціал $\Delta V_j^\sigma(x)$ в НВМ системі при відсутності контакту напівпровідник-метал та зовнішньої напруги $U = 0$. Для порівняння визначений також розподіл зарядового потенціалу $\Delta v_j^\sigma(x)$ в НВМ системі без врахування просторової дисперсії діелектричної функції напівпровідникової ґратки.

На прикладі системи n -Si-вакуум-Au проведено аналіз впливу металу на формування ОПЗ в приповерхневій області невідродженого напівпровідника n -типу.

Показано, що присутність на відстані $L < L_{\text{ОПЗ}}$ ($L_{\text{ОПЗ}}$ – товщина ОПЗ) квазінейтральної поверхні металу призводить до часткової компенсації поверхневого заряду напівпровідника σ_1 , причому при зменшенні роздільної відстані L ступінь екранування σ_1 вільними електронами металу суттєво посилюється, так що ефективна густина заряду на поверхні напівпровідника, яка визначає розподіл $\Delta V_1^\sigma(|x|)$ в його приповерхневій області, зменшується відносно первинно заданої густини σ_1 . Такий взаємозв'язок між близько розділеними вакуумним проміжком L напівпровідником та металом, який викликаний різницею в об'ємних властивостях трьох середовищ, значно підсилюється при наявності

заряду на поверхні напівпровідника – зарядового потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$.

Відмітимо, що для відстаней $L < 1$ нм. внесок структурного потенціалу $\Delta V_j^{st}(\vec{r})$, обумовленого мікроскопічною (атомною) структурою поверхонь напівпровідника та металу, в сумарний потенціал суттєво зростає зі зменшенням L , а для тісної НВМ структури, коли $L \rightarrow 0$, цей внесок $\Delta V_j^{st}(0, y, z)$ може стати визначальним [3,8].

Теорія

Визначимо розподіл електростатичного потенціалу $V_j(x)$ між двома близько розділеними вакуумним проміжком $0 \leq x \leq L$ напівпровідником з діелектричною функцією $\epsilon_1(\vec{k})$ в області $x \leq 0$ та густиною заряду $\sigma_1(y, z)$ на його поверхні і металом з діелектричною функцією $\epsilon_3(\vec{k})$ в області $x \geq L$ та з квазінейтральною поверхнею, коли $\sigma_2 = 0$.

Розглянемо НВМ структуру, задаючи функцію $\epsilon_1(\vec{k})$ легованого напівпровідника в наступному вигляді [4,5]

$$\epsilon(\vec{k}) = 1 + \frac{\epsilon - 1}{1 + \left(\frac{\vec{k}^2}{\lambda_1^2} \right) (\epsilon - 1)} + \frac{\kappa^2}{\vec{k}^2}, \quad (1)$$

де $\vec{k}^2 = k_{\perp}^2 + q^2$, ϵ – діелектрична стала кристалічної ґратки (при $\vec{k} \rightarrow 0$), λ_1^{-1} – ефективний радіус екранування зв'язаними (валентними) електронами іонних остовів кристалічної ґратки, який по порядку величини рівний розміру атома (іона) і який розраховується з врахуванням зонної структури напівпровідника [7], $\kappa_1^2 = \frac{4\pi e^2 n_1}{\epsilon k_B T}$ в НДХ у

випадку невідродженого електронного газу, k_B – постійна Больцмана; n_1 – концентрація невідродженого газу вільних електронів (дірок) (в роботі розглянуто випадок n -типу напівпровідників). Перші два члени в (1) відповідають інтерполяційній моделі Інсона [7]. Як показано в роботі [4], така комбінація наближення Інсона з НДХ призводить до

асимптотики $\varepsilon_1(\vec{k}) \approx 1 + \frac{(\lambda_1^2 + \kappa_1^2)}{\vec{k}^2}$, коли

$k \gg \lambda_1$ та до неперервності електростатичного потенціалу на межах розподілу.

Для врахування просторової дисперсії в діелектричній функції металу $\varepsilon_3(\vec{k})$ скористаємось загальновідомим довгохвильовим НТФ, в якому $\varepsilon_3(\vec{k})$ має наступний вигляд

$$\varepsilon_3(\vec{k}) = 1 + \frac{\kappa_3^2}{\vec{k}^2}, \quad \vec{k} = \{k_1, q\}, \quad (2)$$

де $\kappa_3^2 = \frac{6\pi e^2 n_3}{E_F}$, n_3 - концентрація,

$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n_3)^{2/3}}{2m_3}$ - енергія Фермі та m_3 -

ефективна маса вільних електронів в металі.

Використовуючи метод функцій Гріна нелокального рівняння Пуассона, розвинутий в роботах [3-6], та враховуючи граничні умови: неперервність потенціалу $V_f(x)$ на межах поділу ($x=0$ і $x=L$) та кінцевий скачок $\pm 4\pi\sigma_1$ нормальної компоненти вектора електростатичної індукції на поверхні напівпровідника ($x=0$), обумовлений зарядовим станом його поверхні, для визначення зарядової складової $\Delta V_f^\sigma(x)$ повного потенціалу $V_f(x) = V_f^0(x) + \Delta V_f^\sigma(x)$, для НВМ системи одержуємо наступні рівняння

$$\Delta V_1^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \sigma_1 \cdot a_1(0;|x|)}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot (1 + \kappa_3 L), \quad (x \leq 0), \quad (3)$$

$$\Delta V_2^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \sigma_1 \cdot a_1(0;0)}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot [1 + \kappa_3(L-x)], \quad (0 \leq x \leq L), \quad (4)$$

$$\Delta V_3^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \sigma_1 \cdot a_1(0;0) \cdot e^{-\kappa_3 \cdot (x-L)}}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]}, \quad (x \geq L). \quad (5)$$

Тут

$$a_1(0;|x|) = \frac{1}{\beta_+^2 - \beta_-^2} \cdot \left[\frac{e^{-|x|\beta_+}}{\beta_+} \left(\beta_+^2 - \frac{\kappa_1^2 \cdot \Lambda^2}{\varepsilon_1} \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{e^{-|x|\beta_-}}{\beta_-} \left(\beta_-^2 - \frac{\kappa_1^2 \cdot \Lambda^2}{\varepsilon_1} \right) \right], \quad (6)$$

де

$$\beta_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[\kappa_1^2 (1 + \Lambda^2) \right] \pm \frac{\kappa_1^2}{2} \sqrt{(1 + \Lambda^2)^2 - \frac{4\Lambda^2}{\varepsilon_1}},$$

$$\Lambda = \frac{\lambda_1}{\kappa_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - 1}}. \quad (7)$$

Для зарядової складової $\Delta v_f^\sigma(x)$ повного потенціалу без врахування просторової дисперсії в напівпровідниковій ґратці, коли потенціал сил зображення $V_f^0(x)$ має розбіжність на межі поділу ($x=0$) [9], а діелектрична функція напівпровідника $\varepsilon_1(\vec{k})$ має вигляд

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = \varepsilon_1 + \frac{\kappa_1^2}{\vec{k}^2} \quad (8)$$

одержуємо наступні рівняння:

$$\Delta v_1^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \sigma_1 \cdot \exp(-\kappa_1 \cdot |x|)}{\varepsilon_1 \kappa_1 + \kappa_3 + \varepsilon_1 L \kappa_1 \kappa_3} \cdot (1 + L \cdot \kappa_3) \quad (x \leq 0), \quad (9)$$

$$\Delta v_2^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \sigma_1}{\varepsilon_1 \kappa_1 + \kappa_3 + \varepsilon_1 L \kappa_1 \kappa_3} \cdot (1 + (L-x) \cdot \kappa_3) \quad (0 \leq x \leq L), \quad (10)$$

$$\Delta v_3^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \sigma_1 \cdot \exp[-\kappa_3 \cdot (x-L)]}{\varepsilon_1 \kappa_1 + \kappa_3 + \varepsilon_1 L \kappa_1 \kappa_3}, \quad (x \geq L). \quad (11)$$

Результати

Для прикладу розглянемо систему n -Si- вакуум - Al_n , яка широко використовується в напівпровідниковій мікроелектроніці і об'ємні параметри якої добре відомі [9]: для невиродженого напівпровідника n -типу (n -Si): діелектрична константа - $\varepsilon_1 = 11.9$, температура - $T = 293^\circ K$, концентрація - $n_1 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, ефективна маса

електронів $m_{\perp} = 0.98$ (поперечна) і $m_{\parallel} = 0.19$ (повздовжня), $\lambda_1 = 5.917 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$ і $\chi_1 = -E_c = 4.05 \text{ eV}$ – положення дна зони провідності в об'ємі напівпровідника та для металу (Au): робота виходу – $\phi_3 = 5.1 \text{ eV}$, концентрація – $n_3 = 5.9 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ і ефективна маса електронів – $m_3 = 0.87325 m_0$, де m_0 – маса вільного електрона.

Розглянемо розподіл потенціалу $V_1(x)$ в напівпровіднику з однорідною густиною заряду σ_1 , коли квазінейтральна поверхня металу $\sigma_2 = 0$ знаходиться на відстані, яка перевищує товщину ОПЗ $L > L_{OPZ}$, тобто $L \rightarrow \infty$, у відсутності контакту (спільний рівень Фермі) та зовнішньої напруги $U = 0$. Результати відповідних розрахунків $\Delta V_1^{\sigma}(x)$ згідно з рівняннями (3) та (6),(7) для вільної поверхні n-Si при різних ступенях об'ємного легування n_1 та їх порівняння з експоненціальним законом $\Delta v_1^{\sigma}(x)$ утворення ОПЗ (рівняння (9)) відображені на рис. 1.

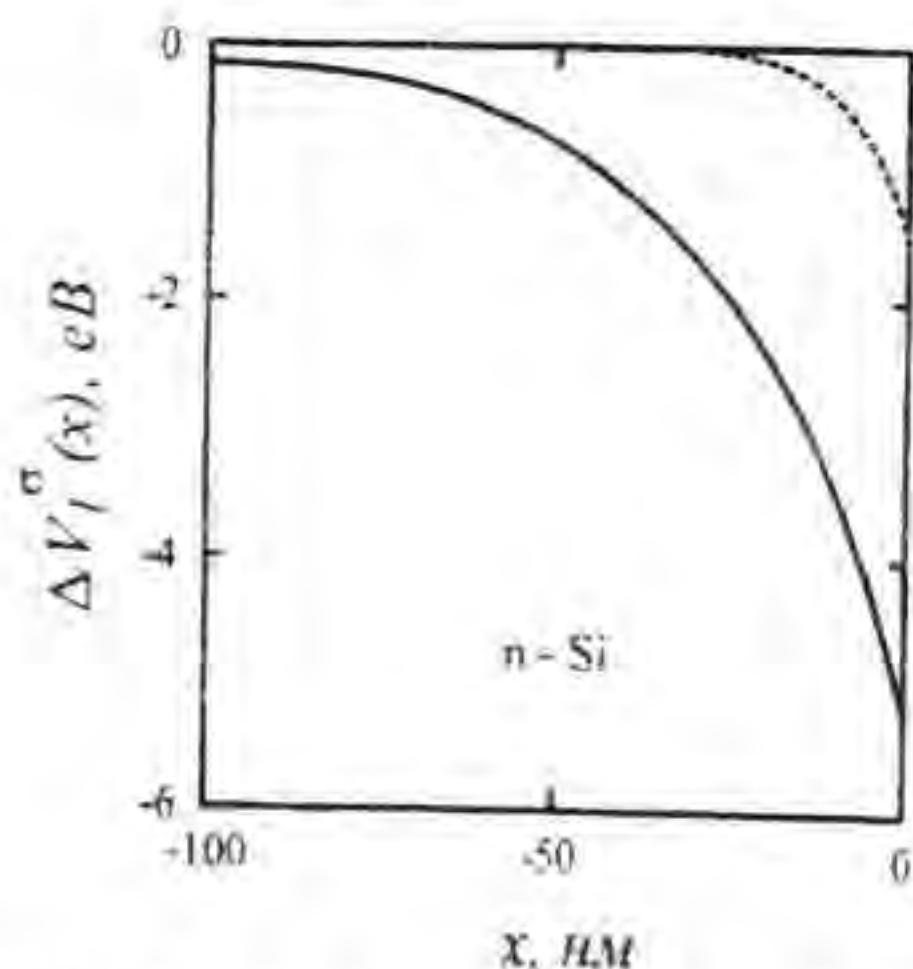


Рис.1. Розподіл потенціалу $\Delta V_1^{\sigma}(|x|)$ в напівпровіднику n-Si (суцільна крива) з наведеними вище параметрами та густиною заряду $\sigma_1 = 1.36 \cdot 10^{13} \text{ e/cm}^2$, коли $L \rightarrow \infty$. Точкова крива – розподіл потенціалу $\Delta v_1^{\sigma}(|x|)$.

З рис. 1 видно, що врахування просторової дисперсії в ґратці напівпровідника $\varepsilon_1(k)$ (1) призводить не тільки до неперервності потенціалу сил зображення $V_j^0(x)$ на межі

поділу [5], але і до суттєвого зростання товщини ОПЗ L_{OPZ} (в порівнянні з експоненціальним розподілом $\Delta v_1^{\sigma}(|x|)$) у відповідності з експериментальними даними [1,2,9].

При зменшенні роздільної відстані L між напівпровідником та металом, коли $L < L_{OPZ}$, збільшується внесок екранування поверхневого заряду напівпровідника σ_1 вільними електронами металу. На рис. 2 суцільними кривими показано розподіл $\Delta V_j^{\sigma}(|x|)$ в системі n-Si–вакуум–Au з наведеними вище параметрами, коли квазінейтральна поверхня золота знаходиться на відстані $L = 1..3 \text{ нм}$ від поверхні n-Si з густиною заряду $\sigma_1 = 1.36 \cdot 10^{13} \text{ e/cm}^2$ вільної поверхні (суцільна крива 4).

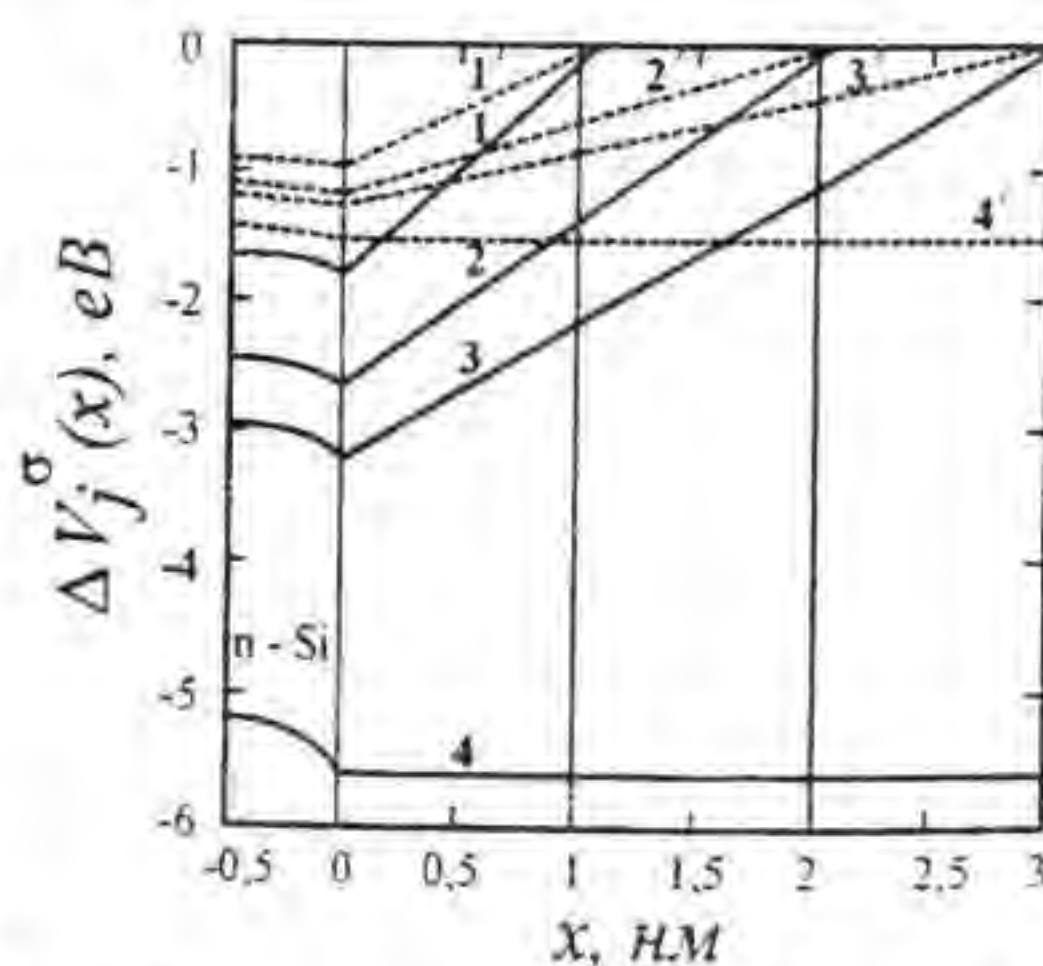


Рис.2. Суцільні криві – розподіл $\Delta V_j^{\sigma}(x)$ в системі n-Si–вакуум–Au з наведеними вище параметрами при $L = 1 \text{ нм}$ (крива 1), $L = 2 \text{ нм}$ (крива 2) та $L = 3 \text{ нм}$ (крива 3), розрахований згідно з рівняннями (3)–(7), при густині заряду на вільній поверхні n-Si $\sigma_1 = 1.36 \cdot 10^{13} \text{ e/cm}^2$ (крива 4). Точкові криві – розподіл $\Delta v_j^{\sigma}(x)$ розрахований згідно з рівняннями (9) – (11) при $L = 1 \text{ нм}$ (крива 1'), $L = 2 \text{ нм}$ (крива 2'), $L = 3 \text{ нм}$ (крива 3') та $L \rightarrow \infty$ (крива 4').

На рис. 3 суцільними кривими 1–4 показано розподіл $\Delta V_1^{\sigma}(|x|)$ в напівпровіднику, розрахований згідно з (3) з врахуванням (6),(7), для вакуумної щілини $L = 1..3 \text{ нм}$ між поверхнями n-Si та Au (криві 1–3) та у випадку, коли $L \rightarrow \infty$ (крива 4).

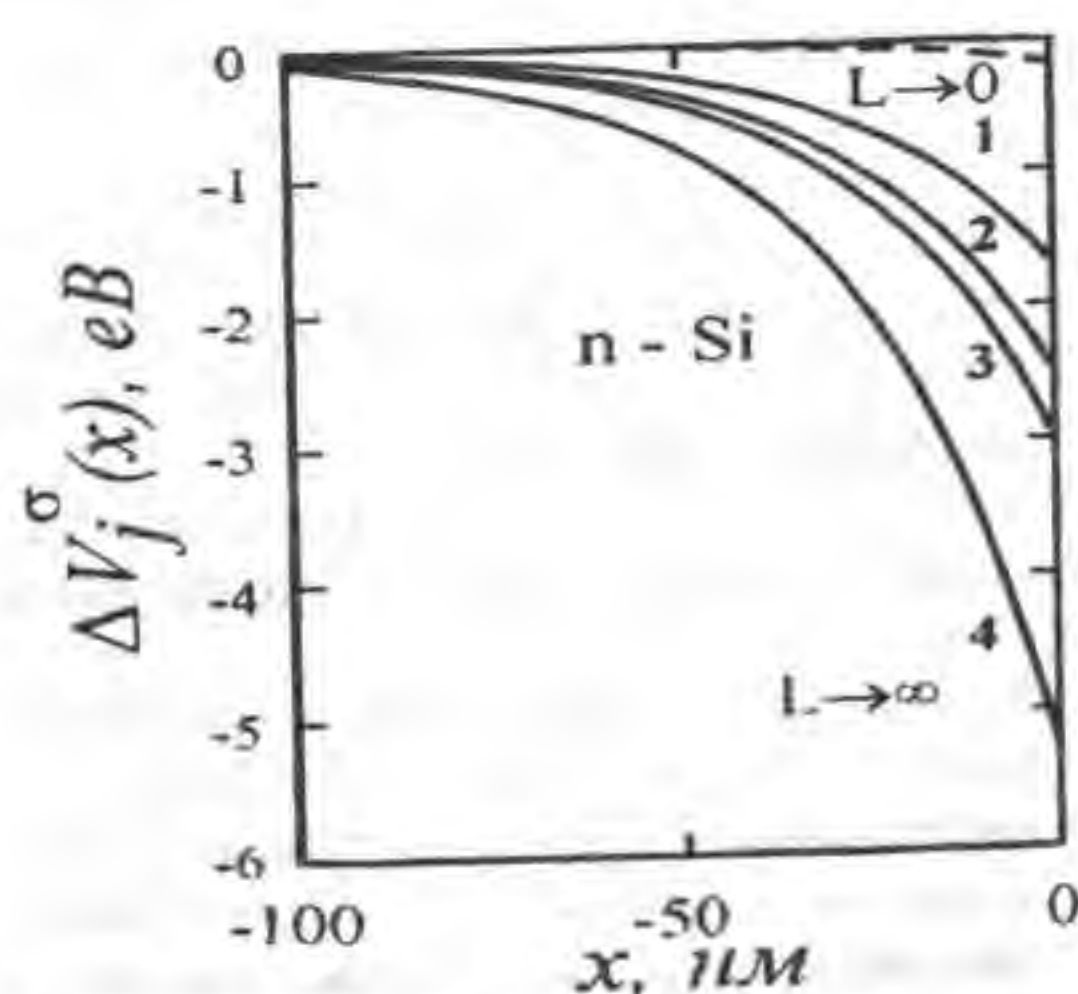


Рис.3. Суцільні криві – формування ОПЗ (розподіл $\Delta V_j^\sigma(|x|)$) в напівпровіднику n -Si), коли на відстані $L=1$ нм. (крива 1), $L=2$ нм. (крива 2) та $L=3$ нм. (крива 3) знаходиться квазінейтральна поверхня Au, а густина заряду на поверхні n -Si при $L \rightarrow \infty$ складає $\sigma_1 = 1.36 \cdot 10^{13}$ е/см² (крива 4). Пунктирна крива – формування ОПЗ для тісної НВМ структури, коли $L \rightarrow 0$.

Суцільною кривою на рис. 4 зображена зміна зарядового потенціалу $\Delta V_j^\sigma(|x|)$ на поверхні напівпровідника $\Delta V_1^\sigma(0) = \Delta V_2^\sigma(0)$ при зменшенні роздільної вакуумної відстані L .

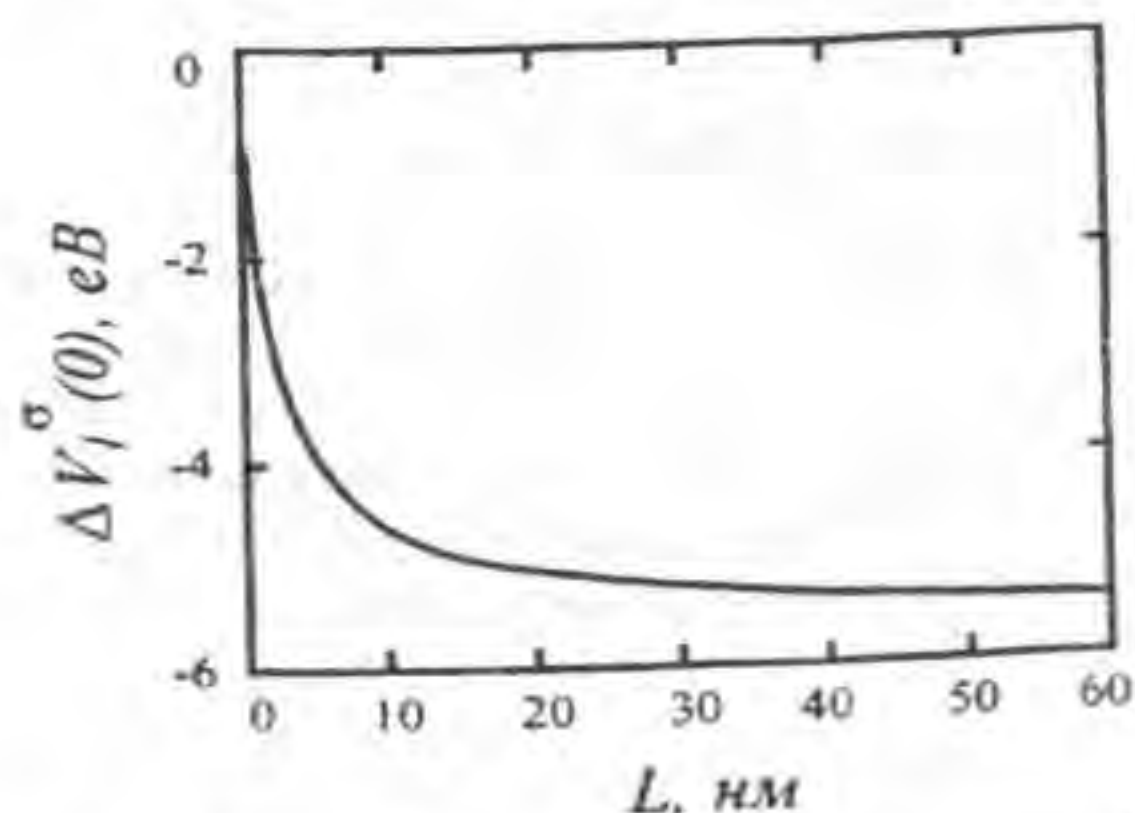


Рис.4. Залежність $\Delta V_1^\sigma(0)$ від товщини L вакуумного проміжку в системі n -Si–вакуум–Au з наведеними вище параметрами та $\sigma_1 = 1.36 \cdot 10^{13}$ е/см² і $\sigma_2 = 0$.

На рис. 5 показаний розрахований згідно з рівняннями (3) – (7) та роботою [5] сумарний

потенціал $V_j(x) = V_j^0(x) + \Delta V_j^\sigma(x)$ в системі n -Si–вакуум–Au у відсутності контакту та прикладеної зовнішньої напруги $U=0$ і без врахування мікроскопічної структури поверхонь напівпровідника та металу [3,6,8].

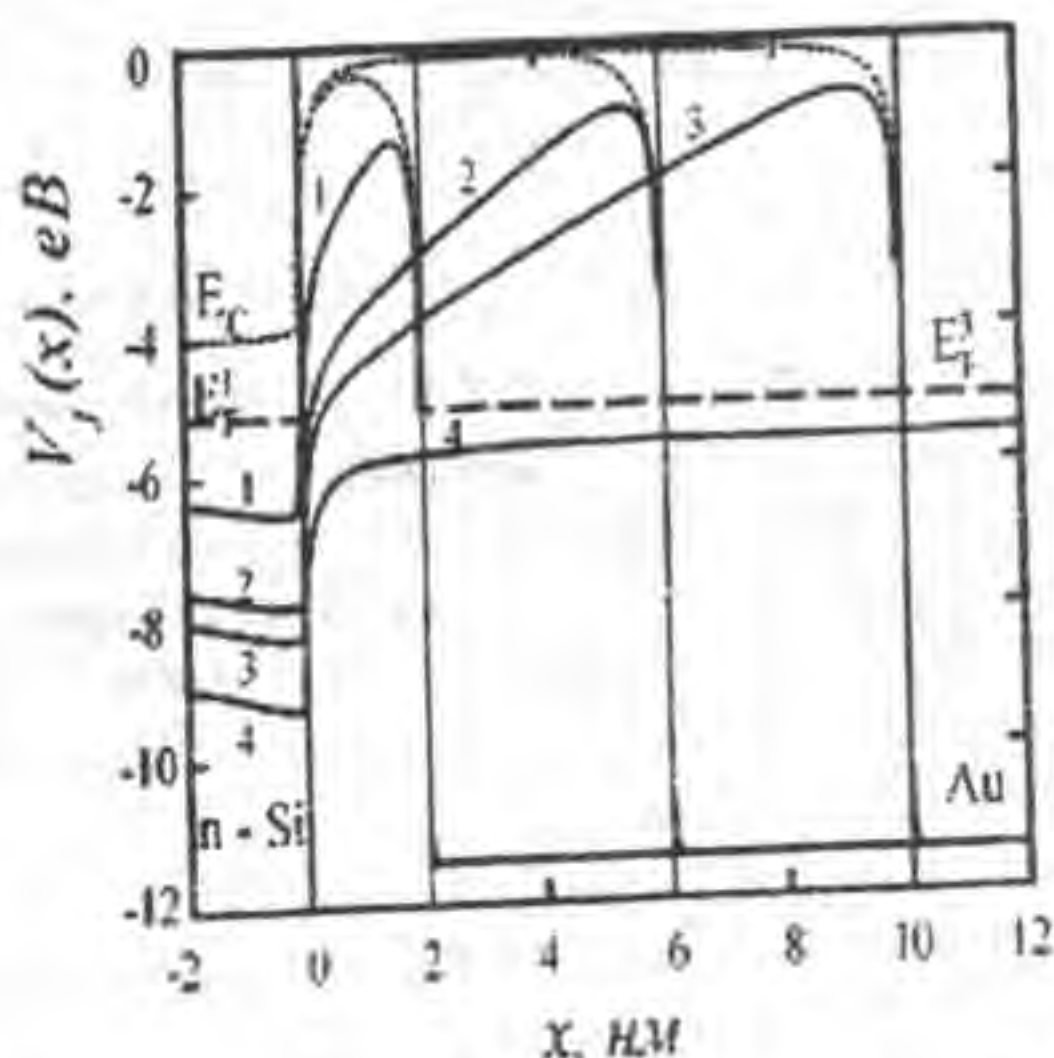


Рис.5. Розподіл сумарного потенціалу $V_j(x)$ для від'ємного заряду e в системі n -Si–вакуум–Au з приведеними вище параметрами для n -Si і Au при $\sigma_1 = 1.36 \cdot 10^{13}$ е/см² і $\sigma_2 = 0$ для роздільної відстані $L=2$ нм. (суцільна крива 1), $L=6$ нм. (суцільна крива 2), $L=10$ нм. (суцільна крива 3), та $L \rightarrow \infty$ (суцільна крива 4). Відповідні точкові криві – потенціал сил зображення $V_j^0(x)$ для тих же роздільних відстаней L . E_C та E_F^1 – положення дна зони провідності в об'ємі напівпровідника (n -Si) та його енергія Фермі, E_F^3 – енергія Фермі металу (Au).

Висновки

В даній роботі у відсутності контакту напівпровідник-метал та зовнішньої напруги $U=0$ [1] для несиметричної по об'ємним та поверхневим характеристикам НВМ системи в рамках нелокальної електростатики [4,5] теоретично розраховано зарядовий потенціал $\Delta V_j^\sigma(x)$, пов'язаний з наявністю на поверхні напівпровідника заряду з густиною $\sigma_1 \neq 0$, коли на відстані $L < L_{ОНЗ}$ розташована квазінейтральна поверхня металу $\sigma_2 = 0$. Неперервність сумарного потенціалу та єдиний

(вакуумний) рівень відліку енергії в НВМ системі забезпечується коректним врахуванням ефектів просторової дисперсії в функціях діелектричної проникності напівпровідника $\epsilon_1(\vec{k})$ (1) та металу $\epsilon_3(\vec{k})$ (2).

Аналіз одержаних в рамках нелокальної електростатики аналітичних рівнянь (3)–(7) показав, що виникнення ОПЗ пов'язане з присутністю на поверхні напівпровідника ($x=0$) заряду з густиною σ_1 . Параметри ОПЗ (товщина ОПЗ L_{OPZ} і значення потенціалу $\Delta V_j^\sigma(0)$ на його поверхні – вигин зони) визначаються як величиною і знаком поверхневого заряду, так і об'ємними характеристиками напівпровідника: діелектричною сталою ϵ_1 , типом та концентрацією n_1 вільних носіїв (ступінню об'ємного легування), температурою T тощо, і являються характеристикою вільної поверхні напівпровідника з заданими параметрами, коли $L \rightarrow \infty$ [2,6,10].

Присутність на відстані $L < L_{OPZ}$ квазінейтральної поверхні металу призводить до часткової компенсації поверхневого заряду напівпровідника з густиною σ_1 , причому при зменшенні роздільної відстані L екранування σ_1 вільними електронами металу суттєво посилюється, так що ефективна густина заряду на поверхні напівпровідника, яка визначає розподіл $\Delta V_1^\sigma(|x|)$ в його приповерхневій області, зменшується відносно первинно заданої σ_1 – для електрона та додатньо зарядженої поверхні напівпровідника n -типу вигин зони суттєво зменшується. Такий взаємозв'язок між близько розділеними вакуумним проміжком L напівпровідником та металом викликаний різницею в об'ємних властивостях трьох середовищ, зарядовим станом поверхонь напівпровідника та металу (в даній роботі розглянуто випадок квазінейтральної поверхні металу $\sigma_2 = 0$) і їх мікроскопічною (атомною) структурою [6,8]. Максимальний ефект впливу металу досягається для тісної НВМ структури, коли $L \rightarrow 0$.

Відмітимо, що для відстаней $L < 1 \text{ нм}$ внесок структурного потенціалу $\Delta V_j^{\text{st}}(\vec{r})$, обумовленого мікроскопічною (атомною) структурою поверхонь напівпровідника та металу, в сумарний потенціал суттєво зростає зі зменшенням L , а для тісної НВМ структури,

коли $L \rightarrow 0$, цей внесок $\Delta V_j^{\text{st}}(0, y, z)$ може стати визначальним [6,8].

Список використаних джерел

1. Rhoderick E.H., Williams R.H. Metal-Semiconductor contacts. – Oxford: Oxford Science Publishers, 1988. – 251 p.
2. Фишер Р., Нойман Х. Автоэлектронная эмиссия полупроводников. – Москва: Наука, 1971. – 216 с.
3. Ільченко Л.Г., Лобанов В.В. Теоретический расчёт структурного потенциала в сверхтонкой вакуумной щели между двумя твёрдыми телами. – Физико-химия наноматериалов и супрамолекулярных структур. – Киев: Наукова думка, 2007. – 2. С.52-81.
4. Il'chenko L.G., Pashitskii E.A. and Romanov Yu.A. Charge interaction in layered systems with spatial dispersion // Surf. Sci. – 1982. – 121. – P. 375-395.
5. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Потенціал сил зображення між близько розділеними вакуумним проміжком напівпровідником і металом (розмірно-квантованою плівкою металу). // Вісник Київського університету. Радіофізика та електроніка. – 2008. – №11. – С. 29-34.
6. Il'chenko L.G., Il'chenko V.V., Goraychuk T.V., Rangelow I.W. Microscopic structure of the semiconductor surface in the external electric field // Chemistry, physics and technology of surfaces. – 2001. – N 4-6. – P. 186-195.
7. Inkson J. C. The electrostatic image potential in metal semiconductor junctions // J. Phys. C. – 1971. – 4, N 5. – P. 591-597.
8. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Роль атомної структури поверхонь у формуванні потенціалу у вакуумному проміжку між близько розділеними металом та напівпровідником. // Химия, физика и технология поверхности. – 2008. – №14. – С. 43-51.
9. Jensen K.L. Improved Fowler-Nordheim equation for field emission from semiconductors // J. Vac. Sci. Technol. B. – 1995. – 13, N 2. – P. 516-521.
10. Il'chenko L.G., Ogenko V.M. Image forces near the surface of semiconductor with a space charge region // Surface Sci. Lett. – 1992. – 262. – P. L147- L150.

Надійшла до редколегії 26.06.09

УДК 519.9

Коломієць* І.С., студ., Обуховський В.В.,
доктор фіз.-мат. наук., проф.

Зміна кількості доступних станів при плавленні простих речовин

Для сукупності простих речовин теоретично досліджено зміну кількості доступних станів при фазовому переході першого роду «тверде тіло-рідина». Показано, що в більшості випадків підвищення рухомості атомів упорядкованого кристалового стану при плавленні має формальним наслідком збільшення кількості доступних станів в $2 \div 7$ разів. Аномальне збільшення (до $35 \div 40$ разів) має місце тільки в кристалах четвертої групи Si, Ge, де кристалова ґратка формується виключно за рахунок напрямлених ковалентних зв'язків

Ключові слова: плавлення, доступні стани, ентропія, прості речовини).

I. S. Kolomiets*, stud., V. V. Obukhovsky, D.Sci.

A change of amount of the accessible states is at melting of simple matters

The change of the accessible states numbers for the simple materials in the first type phase transition "solid-liquid" was investigated. It was shown that in most cases the increasing of atoms mobility of the ordered crystal states at melting leads to results in increasing of the accessible states numbers approximately $2 \div 7$ times. An abnormal increasing (up to $35 \div 40$ times) takes place only for 4th group crystals like Si or Ge, where the crystal grating forms exclusively by directed covalent bonds.

Key Words: melting, accessible states, entropy, simple matters.

*E-mail: vanyuxa05@rambler.ru, wo@voliacable.com
Статтю представив д.ф.-м.н. Данилов В. В.

Метою даної роботи є визначення зміни числа доступних станів системи в процесі плавлення простих речовин (фазовий перехід першого роду). Для цього випадку типову залежність температури T від кількості тепла Q , що передано речовині, показана на Рис. 1.

Енергія, що пішла на плавлення $\Delta E_{пл} = \Delta Q_{пл} = Q_2 - Q_1$. Ентропія плавлення в розрахунку на одну частинку

$$\Delta S_{пл} = \frac{\Delta Q_{пл}}{N_0 T_{пл}} = \frac{Q_2 - Q_1}{N_0 T_{пл}} \quad (1)$$

Нехай мала підсистема A в початковому стані має середню енергію $\langle E \rangle$ і може знаходитись в $\Omega(E)$ доступних станах (для спрощення запису символ усереднення $\langle \dots \rangle$ тут і далі будемо опускаати). Загалом, ентропія може розглядатися як функція $S = S(E, V, N)$. Надалі ми будемо розглядати частковий випадок, коли об'єм і кількість частинок в системі є фіксованими величинами. При цьому дифузійний внесок венергію відсутній і механічна робота не

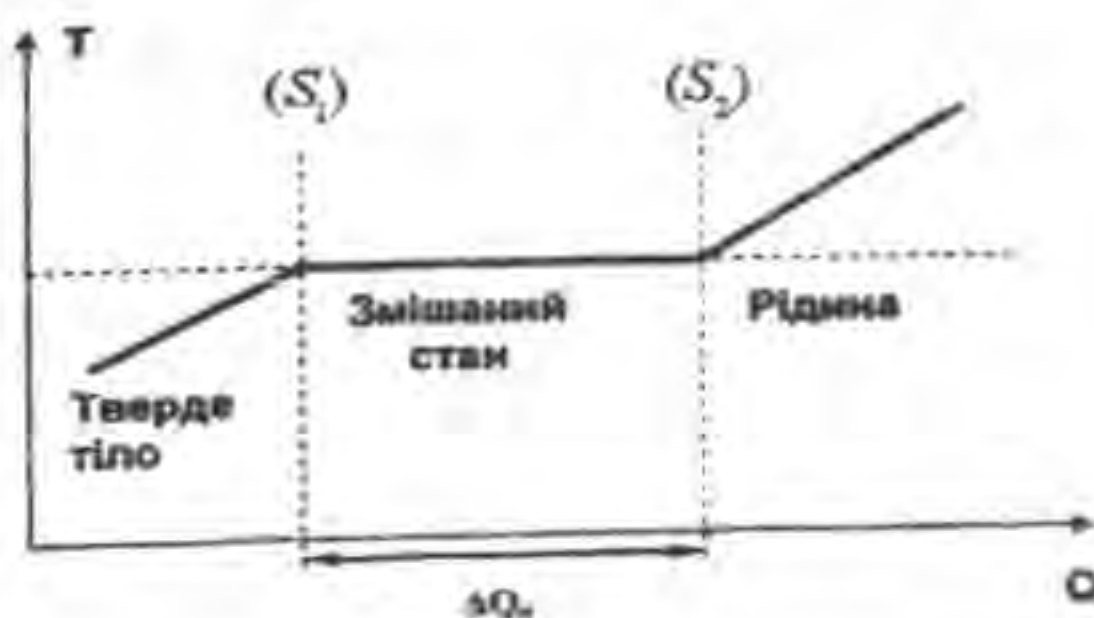


Рис. 1. Зміна фазового стану речовини при нагріванні. S_1, S_2 — ентропія системи на початку та в кінці процесу плавлення.

виконується ($\Delta W = 0$). Тоді $\Delta E = \Delta Q$, тобто зміна енергії пов'язана лише із процесом передачі тепла. Якщо за рахунок теплової взаємодії енергія підсистеми A збільшиться на ΔQ , то при цьому кількість доступних станів зросте до $\Omega(E + \Delta Q)$. Як відомо [1, 2], величина

Ω визначає ентропію системи:

$$S = k_0 \ln \Omega \quad (2)$$

Якщо виконується нерівність $\Delta Q \ll E$, $\Delta T \ll T$, то можна розкласти ентропію $S(E + \Delta Q)$ кінцевого стану підсистеми A в ряд Тейлора по малому параметру і отримати добре відоме співвідношення [1]:

$$\Delta S = S(E + \Delta Q) - S(E) \cong \frac{\Delta Q}{T} \quad (3)$$

Тут враховано, що за означенням перша похідна від ентропії

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_0 = \frac{1}{T} \quad (4)$$

в умовах рівноваги визначається температурою системи. За означенням

$$\Delta S_{12} = S_2 - S_1 = k_0 \ln \left(\frac{\Omega_2}{\Omega_1} \right) \quad (5)$$

Порівнюючи (1), (5) знаходимо підвищення числа доступних станів при переході в рідкий стан Ω_2 (тобто після плавлення) порівняно із таким в твердому стані (Ω_1):

$$\frac{\Omega_2(\text{рідк.})}{\Omega_1(\text{тверд.})} = \exp \left[\frac{Q_2 - Q_1}{N_0(k_0 T_m)} \right] \quad (6)$$

Звернемо увагу на те, що при плавленні об'єм речовини змінюється звичайно в незначній мірі. За означенням концентрація

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N \rho}{m} \quad (7)$$

де N — кількість частинок що переходять з однієї фази в іншу, m — маса речовини (в кристалевому стані), ρ — питома вага твердої фази. З іншого боку концентрація

$$n = \frac{C_0}{\Delta V} \quad (8) \text{де}$$

C_0 — кількість атомів в елементарній комірці

об'ємом $\Delta V = a^3$. Із (7,8) знаходимо загальну кількість атомів в речовині масою m

$$N = \frac{C_0 m}{\rho \Delta V} \quad (9)$$

Підставляючи (9) в (6), отримуємо співвідношення між числом доступних станів в рідкій та твердій фазі у формі, що може бути використана для практичних розрахунків:

$$\frac{\Omega_r}{\Omega_t} = \exp \left[\frac{Q_r \rho \Delta V}{C_0 k T} \right] \quad (10)$$

Тут Q_r — питома теплота плавлення (тобто теплота плавлення одиниці маси), стала Больцмана $k_0 = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж / К}$.

Величини ρ, Q_r беруться із [3,4], величини ΔV розраховуються по розмірах елементарних комірок a_0, c_0 . Для кубічних структур $\Delta V = a^3$. Для усіх різновидів (відрізняються кількістю шарів в упаковці) гексагональної найщільнішої упаковки (ГНУ) $\Delta V = (\sqrt{3}/2) a^2 c$. Таблицю даних, що використовувались, наведено в Додатках 1,2. Залежність температури плавлення T (К) від атомного номера показано на Рис. 2.

Залежність зміни ступеню виродження $K = \Omega_r / \Omega_t$ при плавленні як функцію атомного номеру речовини показано на Рис. 3.

Із зроблених розрахунків можна зробити наступні висновки:

1) Зміна ступеню вільності при плавленні твердого тіла суттєво залежить від структури речовини.

2) Як температура плавлення, так і зміна ступеню вільності має квазіперіодичну залежність від атомного номеру речовини, що пов'язано із періодичними змінами зовнішніх електронних оболонок хімічних елементів.

3) Типово величина K при плавленні збільшується в 2÷5 разів. Але у випадку кристалів із структурою алмазу ступень вільності при плавленні може зростати до 40 разів. Цей ефект пов'язаний із особливостями структури алмазу, а саме: а) наявність напрямлених ковалентних зв'язків, б) гібридизація sp^3 типу. Відомо, що ці особливості призводять до формування ажурної структури із великими пустотами. При плавленні напрямленість зв'язків зникає і кількість місць, що можуть бути зайняті атомами, зростає в більш значній мірі, ніж для інших структур.

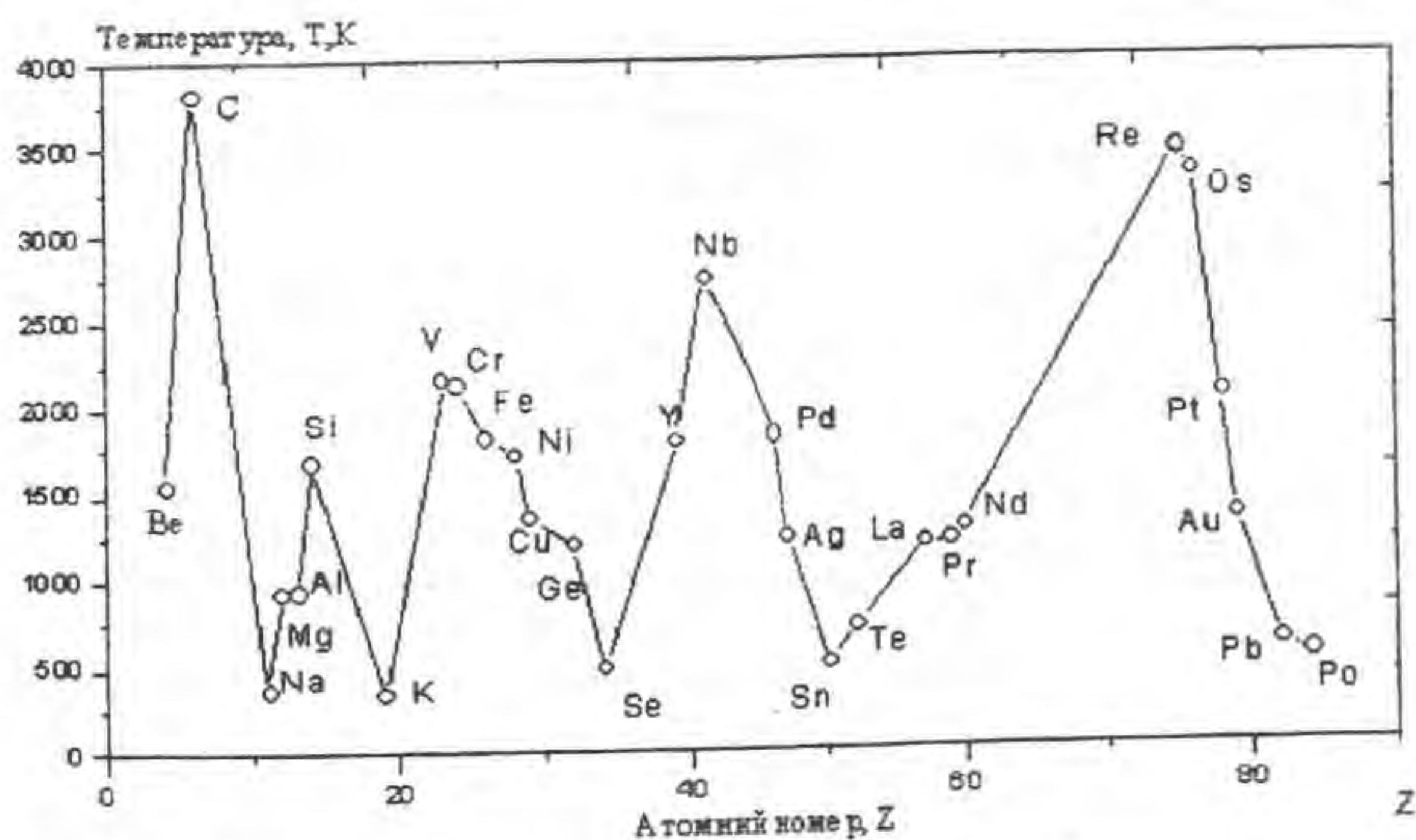


Рис.2 Залежність температури плавлення від номера елементу в таблиці Менделєєва

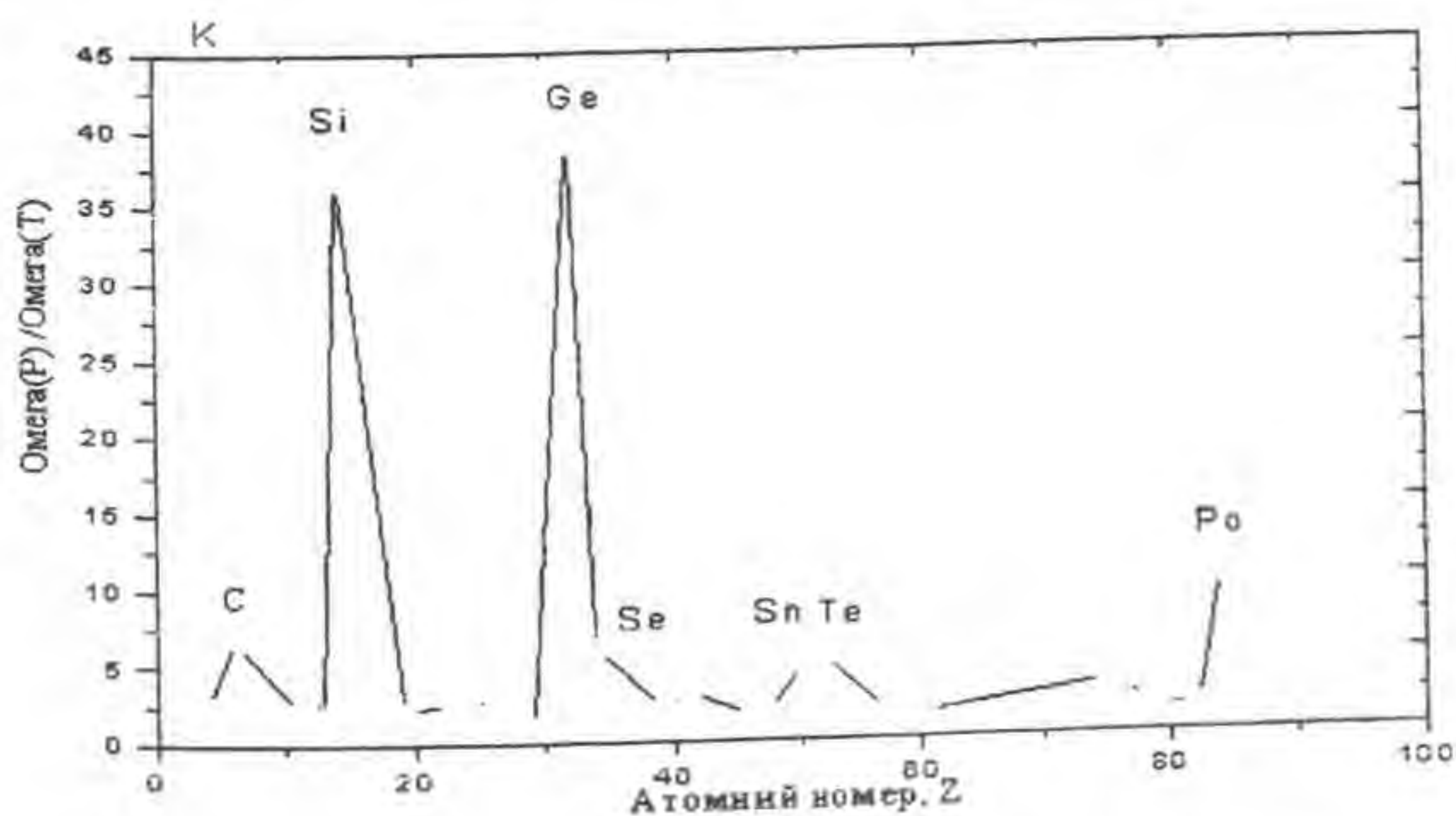


Рис.3 Залежність зміни кількості доступних станів від номера елементу в таблиці Менделєєва

Таблиця 1

Кубічні структури

Z (номер елемента)	Речовина, структура	Кількість атомів на ел. комірку, c_n	$Q_p \left(\frac{\text{кДж}}{\text{кг}} \right)$	$\rho \left(\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right)$	$a(\text{Å})$	$T(K)$
6	C, (структура алмазу)	8	8742,0	2230	3,57	3820
11	Na, Γ_C^V	2	117,0	971	4,23	371
13	Al, Γ_C^f	8	398,0	2698	4,05	933
14	Si, (структура алмазу)	8	1801,4	2330	5,43	1688
19	K, Γ_C^V	2	59,5	856	5,23	337
23	V, Γ_C^V	2	343,8	6110	3,02	2160
24	Cr, Γ_C^f	2	403,8	7182	2,88	2130
26	Fe, Γ_C^V	2	247,1	7874	2,78	1812
28	Ni, Γ_C^f	8	298,5	8502	3,52	1726
29	Cu, Γ_C^f	8	198,6	896	3,62	1356
32	Ge, (структура алмазу)	8	506,8	5323	5,66	1211
41	Nb, Γ_C^V	2	288,2	8570	3,30	2741
46	Pd, Γ_C^f	8	162,6	12020	3,89	1827
47	Ag, Γ_C^f	8	110,6	10500	4,09	1235
50	Sn, (структура алмазу)	8	59,6	7310	5,82	505
78	Pt, Γ_C^f	8	111,6	21450	3,92	2045
79	Au, Γ_C^f	8	64,4	19300	4,08	1332
82	Pb, Γ_C^f	8	23,1	11350	4,95	601
84	Po, Γ_C^P	1	47,8	9320	3,35	527

Таблиця 2

Гексагональні структури

Z (номер елемента)	Речовина, структура	Кількість атомів на ел. комірку, C_0	$Q_p \left(\frac{\text{кДж}}{\text{кг}} \right)$	$\rho \left(\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right)$	$a(\text{Å})$	c/a	$T(K)$
4	Be, Г.Н.У.	2	1356,7	1848	2,29	1,57	1551
12	Mg, Г.Н.У.	2	383,3	1738	3,21	1,62	922
34	Se, Г.Н.У.	2	66,2	4807	4,36	1,07	490
39	Y, Г.Н.У.	2	127,7	4470	3,65	1,57	1795
52	Te, Г.Н.У.	2	139,9	6250	4,46	1,25	723
57	La, Г.Н.У.	3	61,2	6162	3,75	1,62	1194
59	Pr, Г.Н.У.	3	80,2	6773	3,67	1,62	1204
60	Nd, Г.Н.У.	3	49,2	7007	3,66	1,61	1294
75	Re, Г.Н.У.	2	182,8	21020	2,76	1,62	3453
76	Os, Г.Н.У.	2	166,8	22610	2,75	1,58	3327

Список використаних джерел

1. Агафшин Н. П. Периодический закон и периодическая система элементов Д. И. Менделеева. — М.: Просвещение, 1973. — 208 с.
2. Макареня А. А., Трифонов Д. Н. Периодический закон Д. И. Менделеева. — М.: Просвещение, 1969. — 160 с.
3. Eric R. Scerri. The Periodic Table: Its Story and Its Significance. — New York, Oxford University Press, 2007. — 368 с.
4. Карпетянц М. Х., Дракин С. И. Общая и неорганическая химия: Учебник для вузов. — 4-е изд., стер. — М.: Химия, 2000, 529 с.

Надійшла до редколегії 29.10.08

УДК 519.9

Коротков П.А., д. ф.-м. н, проф, Кириленко Є.К.,
к. ф.-м. н, Гальченко С.М., аспірант.

**Методика підвищення чутливості
кількісного рентгенофлуоресцентного
аналізу біологічних проб, що базується на
методі максимальної правдоподібності**

Представлено результати практичного використання методики підвищення чутливості у кількісному рентгенофлуоресцентному аналізі. Методика базується на методі максимальної правдоподібності і може використовуватись у випадках сильного перекриття характеристичних ліній та слабких спектральних ліній у шумовому фоні. Спектри з'єднання ртуті та цинку було проаналізовано спочатку на тестових зразках фільтрувального паперу, а потім на тестових біопробах сухого залишку плазми крові. Абсолютну похибку визначення вмісту ртуті у біопробах зменшено у 2,4 рази, а поріг знаходження досягає 13 ppb, що суттєво нижче ніж отримані дані для стандартних методів обробки спектрів.

Ключові слова: слідова концентрація, метод максимальної правдоподібності, поріг знаходження, біопроба.

*E-mail: Svetadingo@gmail.com, viria@ips.com.ua
Статтю представив д. ф.-м. н. Скришевський В. А.

Вступ

Визначення вмісту мікроелементів у різних тканинах живого організму представляє великий науковий інтерес. Виявлення закономірностей та характеру змін їх хімічного складу під дією зовнішнього середовища та при різноманітних патологічних станах, встановлення їх ролі в етіології, патогенезі, при діагностиці, лікуванні та профілактиці захворювань вимагають вдосконалення старих та застосування нових методів аналізу з високими аналітичними характеристиками [7,8,9]. Одним із перспективних аналітичних методів є рентгенофлуоресцентний аналіз.

Добре відомі переваги рентгенофлуоресцентного аналізу, такі як висока експресність визначення (декілька хвилин), широкі діапазони елементів, що визначаються (від бору до урану) та їх кількості (від 100 до 10⁻⁴

P. A. Korotkov, D. Sc., prof., E. K. Kirilenko, Ph.D.,
S. N. Galchenko*, postgraduate student.

**Sensitivity increase technique of quantitative
X-ray fluorescence analysis of bioassays
based on the maximum likelihood method**

The practical use results of sensitivity increase technique in quantitative X-ray fluorescence analysis are presented. The technique is based on the method of maximum likelihood and can be used in the cases of the characteristic lines strong overlap and weak spectral lines in noise background. The spectra of mercury and zinc amalgam were analyzed, at first on the test samples of filter paper and than on the test bioassays of blood plasma solid. Absolute error of mercury content detection in bioassays was 2.4 times decreased. Detection limit achieved by the method is 13 ppb, significantly lower than obtained by standard spectral processing procedures.

Key Words: trace concentration, maximum likelihood method, detection limit, bioassay

мас.%), а у окремих випадках і нижче), можливість одночасного визначення елементів у зразку та деякі інші, роблять цей метод дуже перспективним при аналізі біологічних та медичних об'єктів [5]. Проте, маючи справу з біопробами, де мікроелементи представлені у слідових концентраціях, а також приймаючи до уваги той факт, що існує сильне перекриття характеристичних K та L ліній окремих елементів, визначення сліду мікроелементу досить складна задача. Все це призводить до пошуку різних методів підвищення чутливості аналізу.

Сьогодні існує велика кількість стандартних методів обробки спектрів. Наприклад, одним із найбільш використовуваних на практиці є метод фундаментальних параметрів [3]. При використанні цього методу, кожна аналітична

лінія рентгенівської флуоресценції апроксимується за допомогою функції Гауса з урахуванням енергетичної роздільної здатності приладу та відносної інтенсивності лінії в своїй серії. Такий підхід виправданий при високих інтенсивностях аналітичних ліній. Для низьких концентрацій, коли інтенсивність аналітичних ліній наближається до фонового рівня, цей метод дає велику похибку. У даній роботі представлено методику підвищення чутливості кількісного рентгенофлуоресцентного аналізу біопроб, що базується на методі максимальної правдоподібності [4]. Методику застосовано для визначення ртуті при наявності цинку. Такий вибір зумовлений тим, що концентрації ртуті у біопробах зазвичай мають слідовий характер, крім того, K_{β} -лінія цинку та L_{α} -лінія ртуті взаємно перекриваються, оскільки мають близькі енергії (9,570081 та 9,987144 KeV відповідно).

Базові поняття рентгенофлуоресцентної спектрометрії

Дуже важливо звернути увагу на те, що зростання будь-якого рентгенофлуоресцентного спектру є прямо пропорційним до часу збору даних, відповідно інтенсивність аналітичних ліній залежить лише від співвідношення елементів у зразку та від ефективності реєстрації рентгенівських квантів [1,2].

Базове рівняння для рентгенофлуоресцентної спектрометрії має наступний вигляд:

$$I_i = K_i I_0 N_0 \sigma_i \omega_i m_i / A_i \quad (1),$$

де I_i – інтенсивність сигналу від елемента i .

Воно описується в умовах наступних параметрів:

K_i – константа, що залежить від геометричних факторів та ефективності знаходження енергії лінії, яка розглядається;

I_0 – інтенсивність джерела збудження;

N_0 – число Авогадро;

M_i – поверхнева густина елемента i з атомним числом Z_i та атомною масою A_i ;

σ_i – переріз збудження;

ω_i – флуоресцентний вихід.

У випадку, коли характеристики сигналів, що відповідають кожному елементу відомі, спектр S може бути виражений, використовуючи рівняння (1), як добуток двох векторів:

$$S = I_0 N_0 (F_{z=1}, F_{z=2}, \dots, F_{z=n}) \begin{pmatrix} (Km\sigma\omega/A)_{z=1} \\ (Km\sigma\omega/A)_{z=2} \\ \vdots \\ (Km\sigma\omega/A)_{z=n} \end{pmatrix} \quad (2),$$

де ми нехтуємо впливом шумового фону та статистичними флуктуаціями.

Перший вектор містить інформацію про функцію кожного елемента. Характеристичні сигнали кожного елемента i є функцією F_i .

У нашому випадку функції отримані емпіричним способом за допомогою спектрометра і використання чистих зразків елементів. Вони визначені фіксованими енергетичними положеннями в спектрі і нам необхідно нормувати їх так, щоб інтеграл від функції в ділянці спектра, де вона визначається, дорівнював одиниці.

Ця функція незмінна, якщо ніякі експериментальні параметри спектрометра не змінюються, тобто ідентична геометрія збудження, ідентичний детектор для всіх зразків, однаковий коефіцієнт підсилення для підсилювача та електроніки збирання даних, тощо.

Другий вектор несе інформацію про склад зразка, фізичні властивості кожного елемента, ефективність знаходження для даної енергії та геометрію установки.

Параметри I_0 , N_0 , K , m , σ , ω та A кожного елемента і попередньо були визначені у рівнянні (1).

Відповідно до рівняння (2), у специфічному випадку для вивчення системи з'єднання (спектр з'єднання ртуті (Hg) та цинку (Zn)), будь-який отриманий спектр, A_m , може бути виражений як:

$$A_m = [Hg_N (Km\sigma\omega/A)_{Hg} + Zn_N (Km\sigma\omega/A)_{Zn}] I_0 N_0 \quad (3).$$

Результуюча інтенсивність двох ліній в спектрі об'єднання A_m , отримана як лінійна комбінація функцій $F_{Hg} = Hg_N$ та $F_{Zn} = Zn_N$, які є характеристичними функціями для цинку та ртуті, індекси N вказують на їх нормованість.

В рівнянні (3) ми зробили спрощення, припускаючи, що параметри K , ω , σ тотожні двом елементам, тому ми можемо його переписати як:

$$A_m = \left(Hg_N \frac{m_{Hg}}{m_{Hg} + m_{Zn}} + Zn_N \frac{m_{Zn}}{m_{Hg} + m_{Zn}} \right) \quad (4),$$

де A_m – спектр з'єднання, а індекс N вказує, що він також нормований.

Якщо ми визначимо α як відношення мас цинку та ртуті у з'єднанні:

$$\alpha = \frac{m_{Hg}}{m_{Zn}} \quad (5)$$

то рівняння (4) може бути записане як:

$$(1 + \alpha)Am_N - Zn_N = \alpha Hg_N \quad (6)$$

Ми повинні звернути увагу на те, що параметр α дає інформацію лише про відносний надлишок ртуті у кожному зразку з'єднання [6].

Визначення інтенсивності сигналу та порогу знаходження

В області спектру, де присутній сигнал, шумовий рівень встановлюється з обох боків від піку. Потім обраховується інтеграл ділянки і з цього значення вираховується площа, що відповідає шумовому фону.

В стандартних методах лінійна інтерполяція між двома сторонами піку подається як шумовий рівень. Також дуже часто використовують більш складні методи, які базуються на лінійній підгінній операції: сигнал та шум моделюються відповідними аналітичними кривими і піддаються операції підгонки, що базується на методі найменших квадратів. Використовуючи методику представлену у даній роботі, можна отримати більш точні оцінки інтенсивності сигналу, оскільки для апроксимації використовуються емпіричні характеристичні функції.

Поріг знаходження визначається як мінімальне значення, яке повинен мати зареєстрований сигнал, щоб бути виділеним з шумового фону [1,2].

Щоб розрахувати значення порогу знаходження визначається рівень фону та обраховується дисперсія шуму (σ_b).

Потім визначається критичний рівень сигналу, таким чином є небажаним його помилкове змішування із статистичними флуктуаціями шуму. Загально прийнятим критерієм порогу чутливості для спектрів з Гаусівським розподіленням шуму є величина інтенсивності, що дорівнює або більша ніж потрійно стандартна девіація (σ_b) рівня шуму.

В цьому випадку ймовірність того, що інтенсивність лінії, яку виміряно, є шумовою флуктуацією, є меншою ніж 1%. Цей критерій є простим у застосуванні та впливає в наступну умову для величини інтенсивності лінії N в області спектра, яка нас цікавить:

$$1 \geq \frac{3\sigma_b}{N} \quad (7)$$

Якщо значення інтенсивності лінії N є пропорційним концентрації C_i елементу i , то поріг знаходження може бути виражений не як функція кількості, а швидше як функція концентрації:

$$LOD \geq \frac{C_i}{N_i} 3\sigma_b \quad (8)$$

В особливому випадку рентгенофлуоресцентної спектроскопії та інших спектроскопічних технік для визначення порогу знаходження використовують:

$$LOD \geq \frac{C_i}{N_i} 3\sqrt{Bkgd} \quad (9)$$

де $Bkgd$ - це інтеграл від ділянки нижче сигналу, квадратний корінь береться тому, що шум підкоряється статистиці Пуассона [6].

Метод максимальної правдоподібності

На сучасному етапі розвитку науки, метод максимальної правдоподібності став ключовим методом аналізу. Загальне розповсюдження цього методу викликане низкою причин. По-перше, за його допомогою можна отримувати найкращі оцінки. По-друге, ще у 1976 році було показано, що багато методів оцінювання, такі як двох - та трьохетапний метод найменших квадратів та ін., можуть бути інтерпретовані як наближення до оцінок, отриманих за методом максимальної правдоподібності. Іншими словами, цей метод дозволяє отримувати спроможні та асимптотично ефективні оцінки. По-третє, цей метод є дуже загальним, що дозволяє використовувати його для широкого класу задач. По-четверте, незважаючи на відносну складність методу та необхідність чітко знати форму функції розподілу, з розвитком комп'ютерної техніки, можна позбутися проблем з підрахунком необхідних оцінок. Таким чином, можна сказати, що метод максимальної правдоподібності є універсальним методом отримання оцінок [4].

Ми опишемо методику визначення інтенсивності відомого сигналу, на який діє Гаусівський шум. Використання методики вимагає знання нами позиції в спектрі, де пік повинен з'являтися та функцію, що визначає

його. Якщо шум присутній, то його також необхідно адекватно змодельовати.

Ми візьмемо, як приклад, вимірювання інтенсивності I_{Hg} в пробі, де є тільки чиста ртуть. Спектр має відносну інтенсивність α і вона визначається як: $I_{Hg} = \alpha Hg(E)_N = F_N$, де $Hg(E)_N = F_N$ – це відома нормована функція (як визначено вище з рівнянь (2) та (3)).

Нижче ми визначимо довірчий інтервал для відносної інтенсивності α .

Новий поріг знаходження має похибку, $\Delta\alpha$, що отримана від значення α . Ця похибка дається з розрахунку флуктуацій, що припадають на шум та дійсну форму функції $Hg(E)_N$.

Оскільки у багатоканальному аналізаторі енергія змінюється дискретно по каналах зі значеннями енергії X_j , де $(j = 1, \dots, n)$ – номер каналу, то відома функція $Hg(E)_N$ буде визначена відповідно як дискретне значення $Hg(X)_N$.

Ми знаходимо випадкові значення M_j з якими пов'язані функції розподілу (pdf)-нормовані Гаусівські функції з середньою точкою в значенні $\alpha Hg(X)_N$ і флуктуації яких дані як σ^2_{Hj} (недостовірність чи стандартне відхилення розрахунків j -го каналу) (рис. 1).

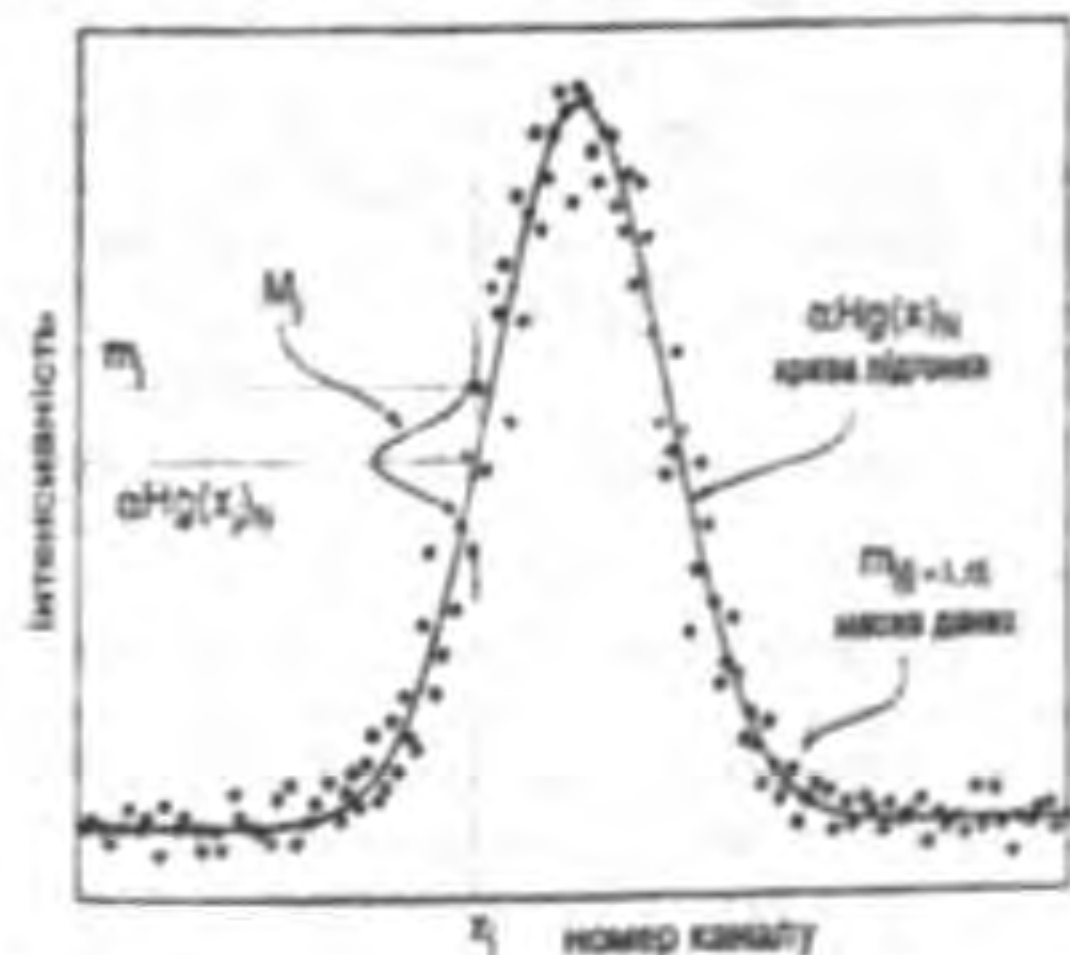


Рис. 1. Експериментальний спектр (x_j, m_j) , крива підгонки $(\alpha Hg(X)_N)$ та функція правдоподібності (M_j)

Кожна змінна M_j знаходиться з функції Гауса,

$$M(\alpha Hg(x)_N, \sigma^2_{Hj}, m_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2_{Hj}}} \cdot \exp\left(-\frac{[m_j - \alpha Hg(x)_N]^2}{2\sigma^2_{Hj}}\right) \quad (10)$$

Зробивши одне вимірювання, ми матимемо ансамбль точок $\{(x_j, m_j)\}$, $(j=1 \dots n)$.

Виникає наступне питання: якщо ми знаємо α , то що є загальною ймовірністю отримання результату $\{m_j\}$, передбачаючи, що ми знаємо pdf випадкових змінних M_j ? Оскільки випадкові змінні M_j незалежні, то ця загальна ймовірність є добутком ймовірностей того, що кожна змінна M_j виключає значення m_j . Ми позначимо загальну ймовірність L :

$$L(m_1, m_2, \dots, m_n, \alpha) = M(\alpha Hg(x)_1, \sigma^2_{H1}, m_1) \cdot \dots \cdot M(\alpha Hg(x)_n, \sigma^2_{Hn}, m_n) \quad (11)$$

Оскільки функція $\ln(x)$ монотонно зростає в x , максимізування L еквівалентне максимізуванню $\ln(L)$:

$$\ln L = -\sum_{j=1}^n \frac{[m_j - \alpha Hg(x)_j]^2}{\sigma^2_{Hj}} + \sum_{j=1}^n \ln\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2_{Hj}}}\right) \quad (12)$$

Шукаючи похідну, що відноситься до α в цьому виразі та прирівнюючи до нуля, ми знаходимо найбільш ймовірне значення α для ансамблю $\{m_j\}$ даних:

$$\alpha^* = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{m_j Hg(x)_j}{\sigma^2_{Hj}}}{\sum_{j=1}^n \frac{Hg^2(x)_j}{\sigma^2_{Hj}}} \quad (13)$$

Це єдине значення максимальної ймовірності α , воно має важливу властивість (в наближенні нескінченної кількості вимірів) – незміненість.

Отже, якщо ми розглядаємо розподіл для успішних подій цієї оцінки, їх очікувані значення наближаються до значень параметру α . Тобто, для великої кількості вимірювань:

$$E(\alpha^*) = \alpha \quad (14)$$

Pdf оцінки α^* отримано заміною, в р-ті 13, вимірюваних величин m_j на їх відповідні Pdf M_j .

Після взяття варіації в обох членах рівняння, ми отримаємо:

$$V(\alpha^*) = V\left(\frac{\sum_{j=1}^n M_j Hg(x)_j / \sigma^2_{Hj}}{\sum_{j=1}^n Hg^2(x)_j / \sigma^2_{Hj}}\right) = \frac{1}{\sum_{j=1}^n \frac{Hg^2(x)_j}{\sigma^2_{Hj}}} \quad (15)$$

$$\Delta\alpha^2 = V(\alpha^*) = \frac{1}{\sum_{j=1}^n \frac{Hg^2(x_j)_N}{\sigma_{b_j}^2}} \quad (16)$$

В результаті ми отримали наступний довірчий інтервал для параметра α :

$$\alpha = \frac{\sum_{j=1}^n m_j Hg(x_j)_N / \sigma_{b_j}^2}{\sum_{j=1}^n Hg^2(x_j)_N / \sigma_{b_j}^2} \pm \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \frac{[Hg(x_j)_N]^2}{\sigma_{b_j}^2}}} \quad (17)$$

Процедура обробки даних

Обробка спектру будь-якого з'єднання повинна проводитись шляхом повторення (ітерації). Початкове значення α_j вибране для різниці вказаної в р-ні (6), потім враховується для кожного каналу вибраної ділянки, яка нас цікавить.

В результаті цього отримаємо ансамбль даних $\{m_j\}$ точок. Цей новий ансамбль $\{m_j\}$ може бути проаналізовано за допомогою рівняння (13), яке дає результат – нове значення α_2 . Цей результат використовується знову в рівнянні (6) і процес повторюється до отримання збіжності. Для оцінки рівнянь (13) та (16), необхідні точні знання про стандартні відхилення шумового фону σ_{b_j} кожного каналу j .

Щоб обрахувати стандартне відхилення фону, два спектри чистого зразка вираховуються (тобто порівнююють спектри двох чистих зразків цинку, без ртуті).

Параметр α повинен бути нульовим.

Проте різниця в першій частині рівняння (6) не є строго нульовою, швидше, вона дає ненульове значення, як результат статистичних флуктуацій вимірювань чи флуктуацій фону. Позначимо B як функцію отриману з різниці двох функцій Zn_{N1} та Zn_{N2} :

$$B_j = Zn_{N1} - Zn_{N2} = \frac{Zn_{1j}}{\sum_{j=1}^n Zn_{1j}} - \frac{Zn_{2j}}{\sum_{j=1}^n Zn_{2j}} \quad (18)$$

Де Zn_j – це кількість підрахунків в j -му каналі та $\sum Zn_j$ є сумою Zn_j в інтервалі, який розглядається. Статистична дисперсія σ_{b_j} , яка відповідає кожному каналу j функції B , може бути обрахована як:

$$\sigma_{b_j} = \sqrt{\left(\frac{\partial B_j}{\partial X_j}\right)^2} \Delta X_j^2 \quad (19)$$

Де x_j це кожна з чотирьох змінних рівняння (18), які є взаємозалежними. Застосовуючи р-ня (19) до р-ня (18), ми отримаємо:

$$\sigma_{b_j} = \sqrt{\frac{\left(\frac{\sqrt{Zn_{1j}}}{\sum Zn_{1j}}\right)^2 + \frac{Zn_{2j}}{(\sum Zn_{1j})^2} \left(\frac{\sqrt{\sum Zn_{1j}}}{\sum Zn_{1j}}\right)^2}{\left(\frac{\sqrt{Zn_{1j}}}{\sum Zn_{1j}}\right)^2 + \frac{Zn_{2j}}{(\sum Zn_{1j})^2}}} + \frac{\left(\frac{\sqrt{Zn_{2j}}}{\sum Zn_{2j}}\right)^2 + \frac{Zn_{1j}}{(\sum Zn_{2j})^2} \left(\frac{\sqrt{\sum Zn_{2j}}}{\sum Zn_{2j}}\right)^2}{\left(\frac{\sqrt{Zn_{2j}}}{\sum Zn_{2j}}\right)^2 + \frac{Zn_{1j}}{(\sum Zn_{2j})^2}}} \quad (20)$$

або

$$\sigma_{b_j} = \sqrt{\frac{\left(\frac{\sqrt{Zn_{2j}}}{\sum Zn_{2j}}\right)^2 + \frac{Zn_{1j}}{(\sum Zn_{2j})^2} \left(\frac{\sqrt{\sum Zn_{2j}}}{\sum Zn_{2j}}\right)^2}{\left(\frac{\sqrt{Zn_{2j}}}{\sum Zn_{2j}}\right)^2 + \frac{Zn_{1j}}{(\sum Zn_{2j})^2}}} + \frac{\left(\frac{\sqrt{Zn_{1j}}}{\sum Zn_{1j}}\right)^2 + \frac{Zn_{2j}}{(\sum Zn_{1j})^2} \left(\frac{\sqrt{\sum Zn_{1j}}}{\sum Zn_{1j}}\right)^2}{\left(\frac{\sqrt{Zn_{1j}}}{\sum Zn_{1j}}\right)^2 + \frac{Zn_{2j}}{(\sum Zn_{1j})^2}}} \quad (21)$$

яке є кінцевим виразом для визначення стандартної девіації шуму [6].

Підготовка тестових зразків та виконання вимірювань

Для тестування запропонованої методики було виконано серію вимірювань за допомогою спектрометра енергій рентгенівського випромінювання СЕР-01 виробництва ТОВ "ЕЛВАТЕХ".

В якості матеріалу для тестових стандартних зразків використовували папір фільтрувальний лабораторний ГОСТ 12026-76.

Процес формування зразка включає у себе наступні етапи:

1. Зважування фільтрувального паперу – 100 мг;
2. Приготування тестових розчинів солей іонів цинку та ртуті з набору ГСОМ;
3. Закапування розчину з необхідною масою елемента у зразок;
4. Висушування зразків;
5. Пресування у таблетки.

Для зважування використовували ваги лабораторні ВЛР-20 з межею зважування 20 г та границею сумарної похибки 0.1 мг ГОСТ 24104-88.

Для процедури викапування скористались державними стандартними зразками складу розчинів солей іонів ртуті та цинку (1.0 мг/см³) ДСЗУ. Викапування проводилось піпеткою ГОСТ Р 50 444.

Висушування зразка здійснювалось за допомогою шафи сушильної з регулятором температури в діапазоні 60°-135° С.

Після цього кожен наважку пресують у таблетку діаметром 10 мм за допомогою пресу з комплексу спектрометра [10].

Для врахування фонові компоненти спочатку вимірювали спектр чистого зразка фільтрувального паперу. Для знаходження форм характеристичних функцій цинку та ртуті виміряли два спектри зразків фільтрувального паперу, що містили 100 мкг цинку та 100 мкг ртуті відповідно. А для розрахунку стандартної девіації шуму було зроблено ще два вимірювання зразка з цинком.

Наступним кроком було отримання спектрів 5 зразків з'єднання, що містили 100 мкг цинку та 28 мкг ртуті. Таке співвідношення має використане для того, щоб досягти приблизно однакової інтенсивності піків, що перекриваються.

Для виготовлення біопроб використовували сухий залишок плазми крові (Seropoint™ Trace Elements Serum L-1 LOT JL4409). Відповідно до вищезгаданої методики формування зразків, відважували 100мг плазми, добавляли розчин ртуті з GCORM так щоб загальна кількість ртуті у зразках становила 0.09 мкг, висушували та пресували у таблетки (5 зразків). Також було виготовлено одну таблетку плазми без закапування ртуті.

Для тестових біопроб плазми крові з ртутью також було отримано спектри рентгенівської флуоресценції, а для розрахунку стандартної девіації шуму у даному випадку було зроблено два виміри спектрів зразка сухого залишку плазми крові без ртуті.

Розробка та тестування програми на спектрах тестових зразків

Для автоматизації обробки отриманих даних було розроблено відповідне програмне забезпечення.

Програму написано на мові програмування Pascal в середовищі Delphi7.

Першим кроком програми є зчитування текстових файлів, що містять інформацію про виміряні спектри, в масиви даних. Для зручності програма дозволяє відкривати необхідні файли зі спектрами безпосередньо перед розрахунками.

Потім для наглядності програма будує графіки реальних спектрів (рис.2.).

Після цього знаходяться форми характеристичних функцій спектрів ртуті, цинку та з'єднання шляхом нормування реальних спектрів. Нормування відбувається діленням кожного значення елементу масиву на площу під кривою відповідного спектру (енергетичний діапазон 9-10,5 KeV). Програма видає графіки характеристичних функцій (рис.3).

Далі програма виконує процедуру визначення стандартного відхилення кожного каналу σ_H для коректного обчислення рівнянь (13) та (16).

А далі шляхом ітерації рахує відносну інтенсивність ртуті у спектрі з'єднання – m_{Hg} . Потім рахує похибку Δm_{Hg} . Значення виводяться в одиницях – мкг. Для даних спектрів, в результаті обчислення, отримано середні значення вмісту ртуті у 5-ти зразках:

$$m_{Hg} = 27,804 \text{ мкг.}$$

$$\Delta m_{Hg} = 0,007 \text{ мкг.}$$

Як бачимо, розроблена програма видає абсолютні значення ртуті у пробі, яке відповідає дійсності з похибкою менше 1% від заявленої величини (28 мкг).

Другим етапом роботи було випробовування програми на тестових зразках плазми крові – середні значення вмісту ртуті у 5-ти зразках:

$$m_{Hg} = 0,086 \text{ мкг.}$$

$$\Delta m_{Hg} = 0,005 \text{ мкг.}$$

Для оцінки отриманих результатів вміст ртуті було визначено також за допомогою методу фундаментальних параметрів:

$$m_{Hg} = 0,057 \text{ мкг.}$$

$$\Delta m_{Hg} = 0,012 \text{ мкг.}$$

а також пораховано абсолютну та відносну похибку вимірювання та поріг знаходження для обох методів (табл. 1).

За означенням поріг знаходження (LOD) дорівнює потроєному значенню Δm_{Hg} , де Δm_{Hg} – похибка метода обробки спектра.

Для метода фундаментальних параметрів:

$$LOD = 3 \Delta m_{Hg} / m_1 \cdot$$

$$= (3 \cdot 0,02100 \text{ мкг}) / 0,1 \text{ г} = 630 \text{ ppb,}$$

де m_1 – маса зразка.

Для метода максимальної правдоподібності

$$\text{LOD} = 3\Delta m_{\text{Hg}}/m_z =$$

$$= (3 \cdot 0,00043 \text{ мкг})/0,1 \text{ г} = 13 \text{ ppb.}$$

З представлених даних бачимо (табл.1), що при використанні метода максимальної правдоподібності абсолютна похибка зменшилась у 2,4 рази, а поріг знаходження становить 13 ppb, що наближається до

теоретичного порогу чутливості рентгенофлуоресцентного метода кількісного аналізу. Усе це робить його більш придатним, у порівнянні із методом фундаментальних параметрів, для визначення слідових концентрацій елементів у біопробах.

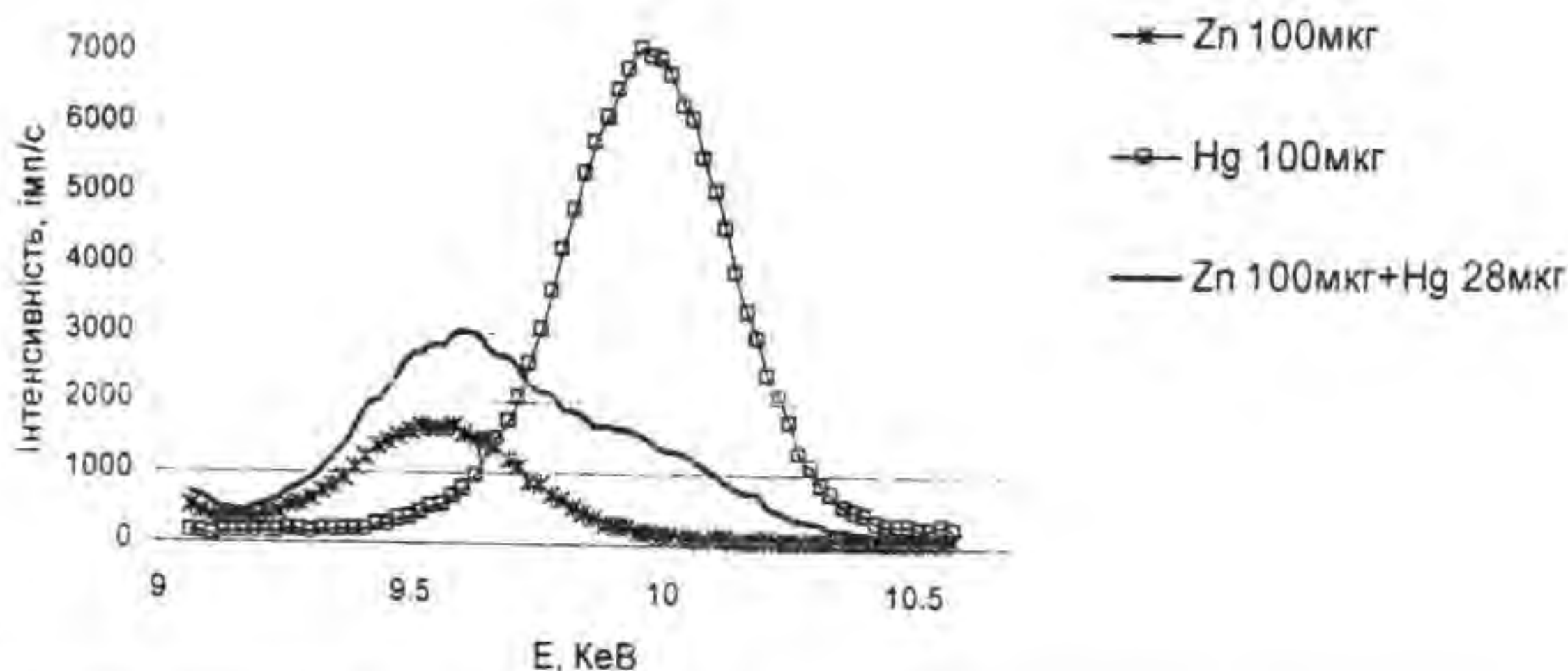


Рис. 2. Реальні спектри для цинку, ртуті та з'єднання

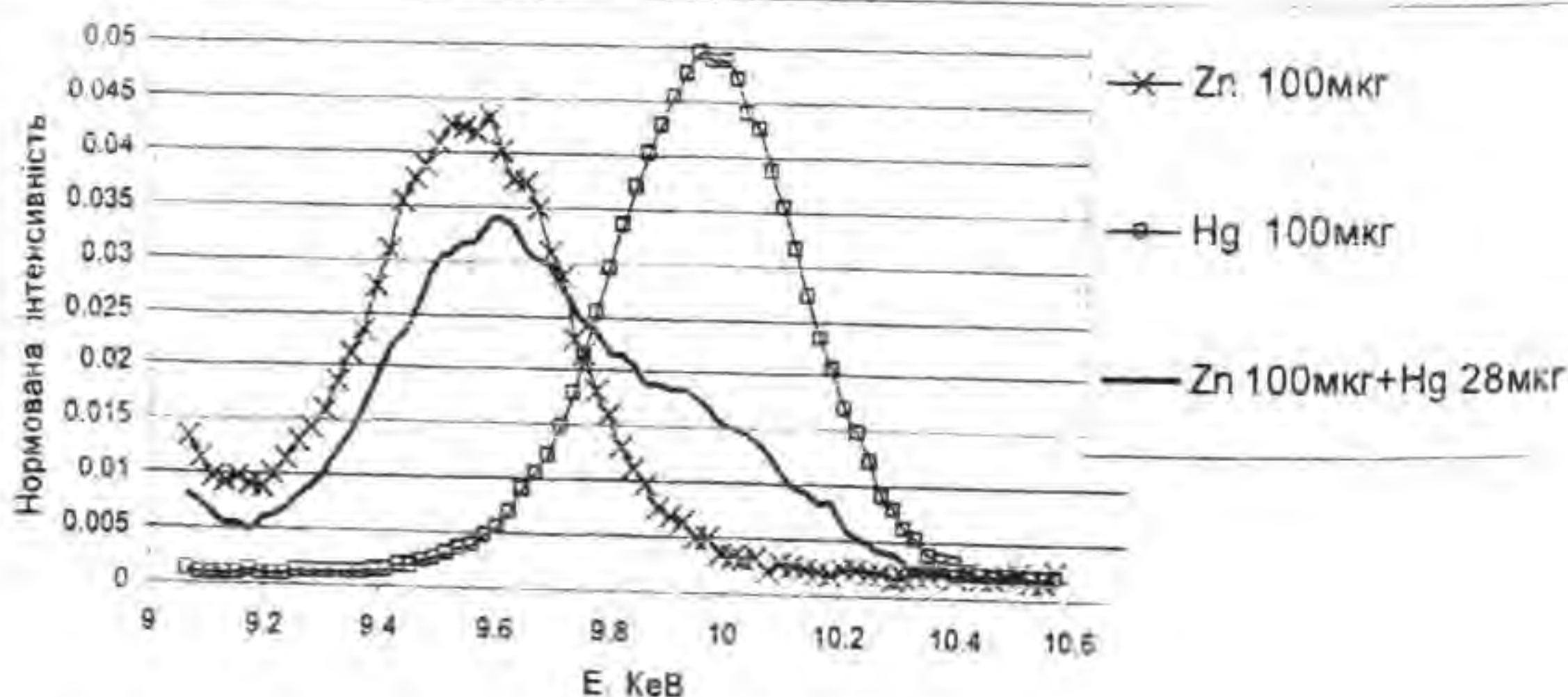


Рис. 3. Форми характеристичних функцій для спектрів цинку, ртуті та з'єднання

Таблиця 1

Значення вмісту ртуті у тестових біопробах сухого залишку плазми крові, похибки вимірювань та поріг знаходження для методів: фундаментальних параметрів та максимальної правдоподібності

№ Зразка	Метод фундаментальних параметрів		Метод максимальної правдоподібності	
	Вміст ртуті $m_{Hg} \cdot 10^{-6} \text{ г}$	Похибка метода, $\Delta m_{Hg} \cdot 10^{-6} \text{ г}$	Вміст ртуті $m_{Hg} \cdot 10^{-6} \text{ г}$	Похибка метода, $\Delta m_{Hg} \cdot 10^{-6} \text{ г}$
1	0,065	0,033	0,082	0,00032
2	0,043	0,015	0,085	0,00054
3	0,049	0,016	0,089	0,00054
4	0,073	0,019	0,080	0,00035
5	0,095	0,022	0,092	0,00042
Середнє значення, $\cdot 10^{-6} \text{ г}$	0,057	0,021	0,086	0,00043
Абсолютна похибка, $\cdot 10^{-6} \text{ г}$	0,012		0,005	
Відносна похибка, %	21,36		5,76	
LOD, ppb	630		13	

Висновки

- У роботі представлено результати практичного використання методики підвищення чутливості рентгенофлуоресцентного визначення мікроелементів у біологічних пробах, що базується на методі максимальної правдоподібності і може використовуватись у випадках сильного взаємного перекриття характеристичних ліній різних елементів;

- Для автоматизації обробки даних розроблено відповідне програмне забезпечення;

- Поріг знаходження ртуті у плазмі крові становить: LOD = 13 ppb (метод максимальної правдоподібності) та LOD = 630 ppb (метод фундаментальних параметрів);

- абсолютну похибку визначення вмісту ртуті зменшено у 2,4 рази:

$\Delta m_{Hg} = 0,005 \text{ мкг}$ (метод максимальної правдоподібності) та $\Delta m_{Hg} = 0,012 \text{ мкг}$ (метод фундаментальних параметрів).

Список використаних джерел

1. Лахович Дж., Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986. – 496 с.
2. Вольдсет Р., Прикладная спектрометрия рентгеновского излучения. Изд. доп. (США, 1977). Пер. с англ. М., Атомиздат, 1977. – 192 с.
3. Борходоев В. Я., Рентгенофлуоресцентный анализ горных пород способом фундаментальных параметров. Магадан: СВКНИ ДВО РАН, 1999. – 279 с.
4. Крянгов А. В. Лукин Г. В., Математические методы обработки неопределенных данных. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 216 с.
5. Куприянова Т. А. Лямина О. И., Семенов В. Ф., Методические особенности определения основных и микроэлементов в сыворотке и клетках периферической крови рентгенофлуоресцентным методом. // Клиническая лабораторная диагностика, 1999. - №8. - С. 11-15.
6. L.Bennun, E.D. Greaves and J.J. Blostein. New procedure for intensity and detection limit determination in spectral trace analysis: application for trace mercury by TXRF. // X-Ray Spectrom., 2002. – 31. – P. 289-295.
7. Magdalena Szczerbowska-Boruchowska. X-Ray fluorescence spectroscopy as analytical tool in neurochemical research. // X-Ray Spectrometry, 2008. – 37. – P. 21-31.
8. Elke E. M. Brouwers, Matthijs Tibben, H. Rosing, Jan H. M. Schellens, and Jos H. Beijnen. The application of inductively coupled plasma mass spectrometry in clinical pharmacological oncology research. // Mass Spectrometry Reviews, 2008. – 27. – P. 67-100.
9. M. L. Carvalho, J. Brito and M. A. Barreiros. Study of trace element concentration in human tissues by EDXRF Spectrometry. // X-Ray Spectrometry, 1998. – 27. – P. 198-204.
10. Методика. Виконання вимірювань масової частки хімічних елементів у волоссі рентгенофлуоресцентним методом. МВВ 081/12-4502-00 – Київ, 2000. – 17 с.

Надійшла до редколегії 30.06.09.

УДК 519.9

Кучеренко Є.Т., канд.ф.-м.н., доцент,
Костюкевич О.М., інженер

Дослідження жевріючого розряду з порожнинними катодами

Проведено порівняльне дослідження жевріючого розряду із плоским, порожнинним та блоком порожнинних катодів резонаторного типу. Експерименти проводились на модернізованій промисловій установці ВУП-5 в атмосфері аргону при тисках $10^{-1} - 10^{-2}$ тор. Порожнинні катоди були виготовлені з алюмінію і попередньо оброблялись розрядом в атмосфері кисню для створення захисної плівки змінної товщини, що суттєво підвищує термін їх використання.

Ключові слова: жевріючий розряд, порожнинний катод, вольт-амперні характеристики.

*E-mail: mitor@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н. Анісімов І.О.

Жевріючі розряди з холодними порожнинними катодами [1] знаходять широке застосування завдяки тому, що вони мають менше падіння напруги горіння, ніж розряди з плоскими катодами, і дозволяють суттєво збільшувати розрядні струми.

Ефект порожнинного катода вивчався в багатьох електродних конфігураціях [1,5,6,7,8], однак ці дослідження проводились, в основному, при порівняно високих тисках, коли у відповідних системах із звичайним катодом виникав низьковольтний жевріючий (нормальний чи аномальний) або навіть дуговий розряд.

При тисках баластного газу менших за 10^{-1} тор жевріючий розряд з плоским катодом реалізувати практично неможливо [2].

В зв'язку з тим, що часто виникає практична потреба у використанні плазми розряду при більш низьких тисках, наприклад, у іонно-плазмовій технології [3], і до того ж з підвищеною концентрацією заряджених частинок, є цікавою реалізація розрядів з порожнинними катодами при тисках, нижчих 10^{-1} тор і з порівняно великим розрядним струмом. Одна з таких можливостей була нами запропонована шляхом використання блока порожнинних циліндричних катодів для гелій-неонових лазерів [10], систематичні дослідження яких, на жаль, не проводились.

Ye. T. Kucherenko, Ph.D, docent,
O. M. Kostiukevych*, engineer.

Investigation of hollow-cathodes glow discharge

The glow discharge in systems with plane cathode, hollow-cathode and block of interconnected hollow-cathodes was investigated comparatively. All experiments are realized on the basis of modernized industrial plant "ВУП-5" in the atmosphere of argon at the pressures $10^{-1} - 10^{-2}$ Torr. For the purpose of life time increase, aluminium hollow-cathodes were processed previously by the discharge in the atmosphere of oxygen to obtain protective oxide film with variable thickness.

Key Words: glow discharge, hollow-cathode, work functions.

Таким чином, дослідження розрядів із порожнинними катодами при тисках, нижчих за 10^{-1} тор і з порівняно великим розрядним струмом є цікавим з точки зору подальшого застосування цих розрядів в іонно-плазмовій технології.

Метою даної роботи було дослідити жевріючі розряди в системах із плоским, порожнинним та блоком порожнинних катодів резонаторного типу і здійснити порівняльний аналіз їх вольт-амперних характеристик.

Дослідження проводились на базі модернізованої промислової установки ВУП-5, схематичне зображення робочого об'єму якої показано на рис. 1.

В першу чергу було перероблено систему напуску газу. Оскільки у штатному режимі вона розрахована на напуск у обмежений об'єм для іонного травлення об'єктів при електронно-мікроскопічному препаруванні і не забезпечувала стабільної роботи в широкому інтервалі тисків, замість натікача з п'єзострикційним приводом було встановлено голчастий, на який газ подавався через додатковий понижуючий редуктор. Крім того, над вихідним отвором у робочому об'ємі було встановлено додаткову заслінку і, управління якою виведено назовні. Це дозволяло шляхом часткового або повного

перекриття вихідного отвору надійно стабілізувати тиск газу у робочому об'ємі.

Подальша модернізація була пов'язана із заміною металевого ковпака на скляний 2, у верхній частині якого виконано вакуумний ущільнювач для рухомого електрода 3, до якого кріпився анод. Також було перероблено вакуумне ущільнення охолоджувача 4 і тим самим підвищено електричну міцність його ізоляції до 3-4 кіловольт. На охолоджувачі розміщувалися катоди. З метою збільшення робочого об'єму по висоті було використане проміжне металеве кільце 5 висотою ~100 мм. Для обмеження позитивного стовпа плазми розряду використовувалась ізольована металева трубка 6.

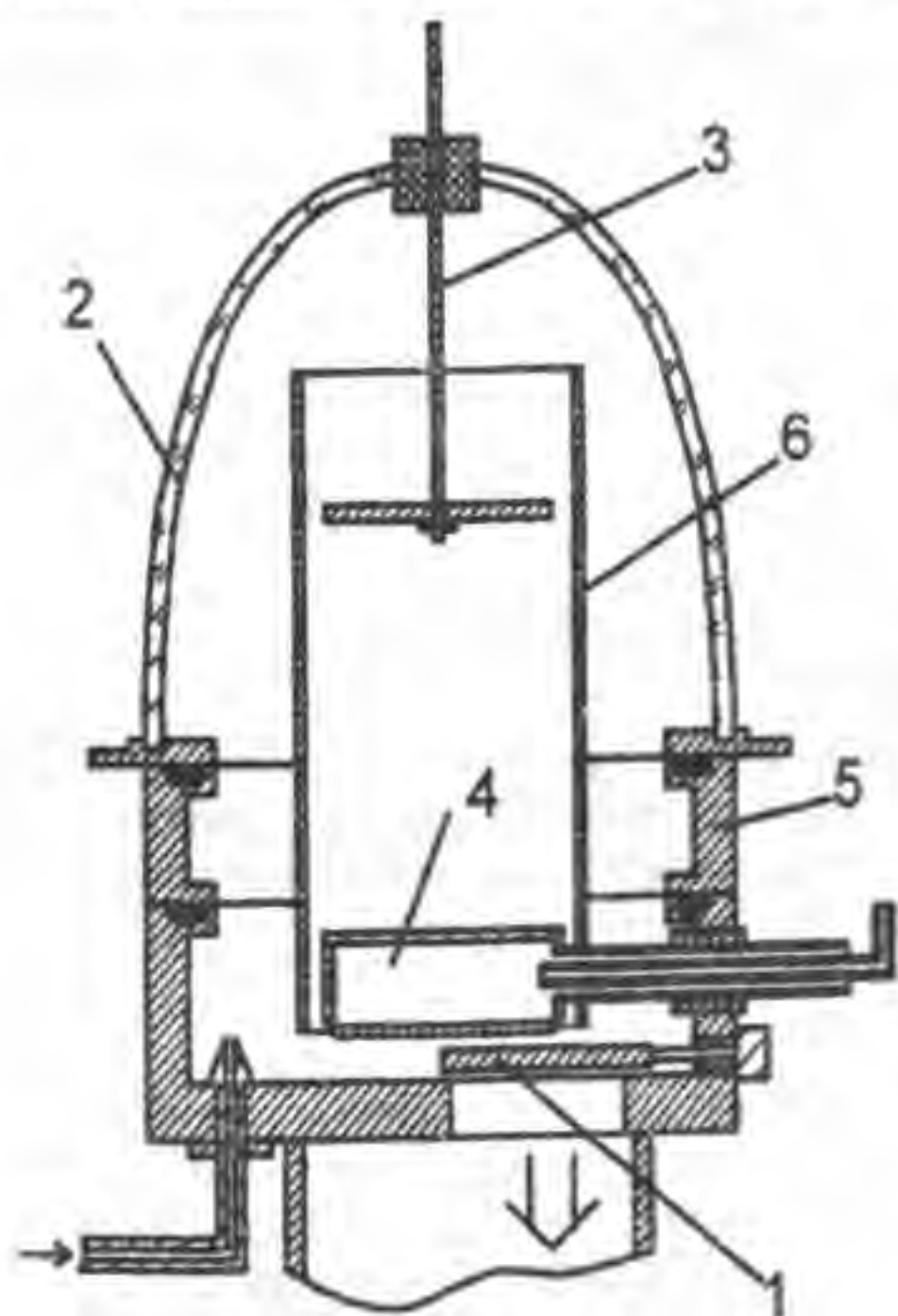


Рис. 1. Перероблений робочий об'єм експериментальної установки.

Таким чином у робочому об'ємі переробленої установки ВУП-5 можна було реалізовувати різні варіанти жевріючих розрядів, як із плоскими, так і з порожнинними катодами.

Блок порожнинних катодів (рис. 2) виготовлявся з п'яти алюмінієвих циліндрів діаметром 32 мм та довжиною ~75 мм. Як видно з рисунку, посередині, між циліндрами, утворено додаткову порожнину, яка виконує роль шостого катода. Всі внутрішні порожнини були зв'язані між собою додатковими отворами, що забезпечувало практично одночасне запалення

розряду в окремих циліндрах і в середній частині блока. Вибір матеріалу катодів диктувався тими обставинами, що на їх внутрішніх поверхнях можна було створювати захисну плівку оксиду алюмінію змінної товщини, як це було запропоновано в роботі [9]. Така обробка дозволяє зменшити коефіцієнт катодного розпорошення майже в тисячу разів [4] і суттєво подовжити термін роботи катодів.



Рис. 2. Конструкція блока зв'язаних порожнинних катодів.

Усі дослідження проводились в атмосфері аргону при тисках $10^{-1} - 10^{-2}$ тор.

Для порівняльного аналізу спочатку було проведено дослідження розряду із плоским катодом діаметром 90 мм, вольт-амперні характеристики якого при різних тисках баластного газу показані на рис. 3.

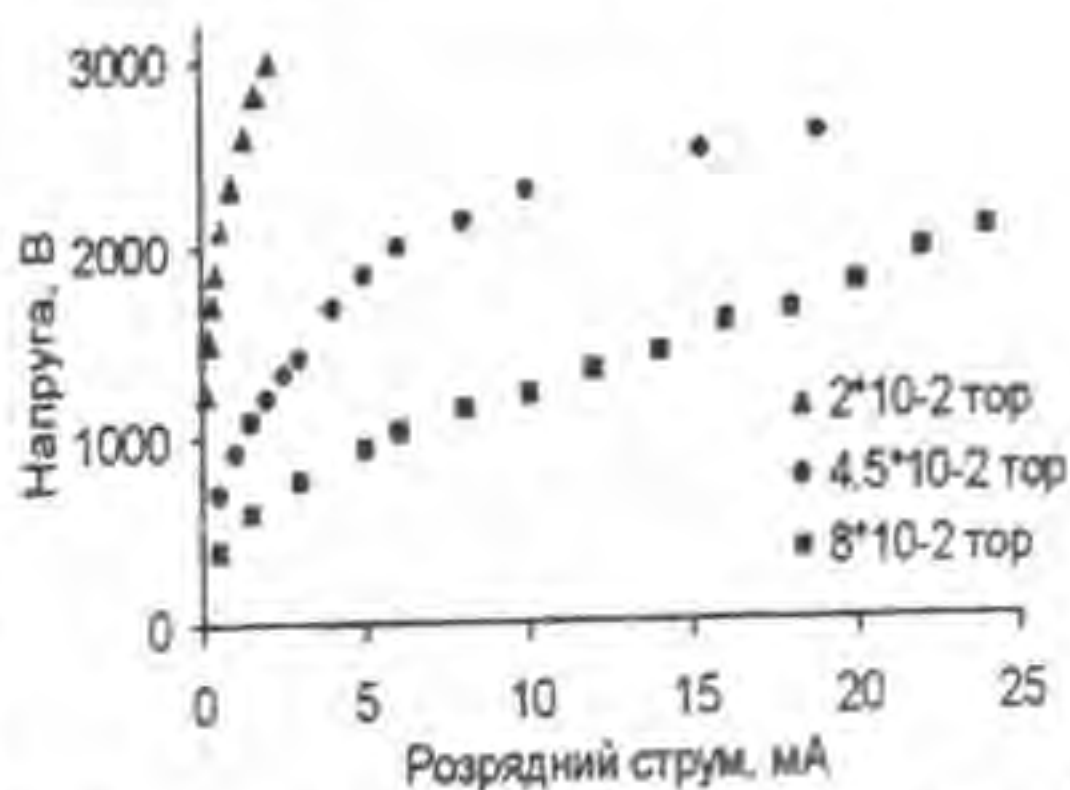


Рис. 3. Вольт-амперні характеристики розряду із плоским катодом при різних тисках баластного газу.

Як видно з наведеного рисунка, в інтервалі тисків $(2-8) \cdot 10^{-2}$ тор у розрядному проміжку має

місце аномальний режим горіння жевріючого розряду з порівняно малими розрядними струмами і достатньо високими величинами падіння напруги.

На рис. 4 показано серію вольт-амперних характеристик розряду з одним порожнинним катодом діаметром 32 мм і довжиною ~75 мм при тих самих тисках робочого газу. Баластний опір в зовнішньому колі живлення становив 100 кОм. Як видно з рисунка, типовим тут є те, що при збільшенні розрядного струму спостерігаються два режими горіння розряду: високовольтний і низьковольтний. Причому перехід першого в другий відбувається стрибкоподібно, при значеннях падіння напруги й струму, що залежать як від величини баластного опору R_b так і від тиску робочого газу.

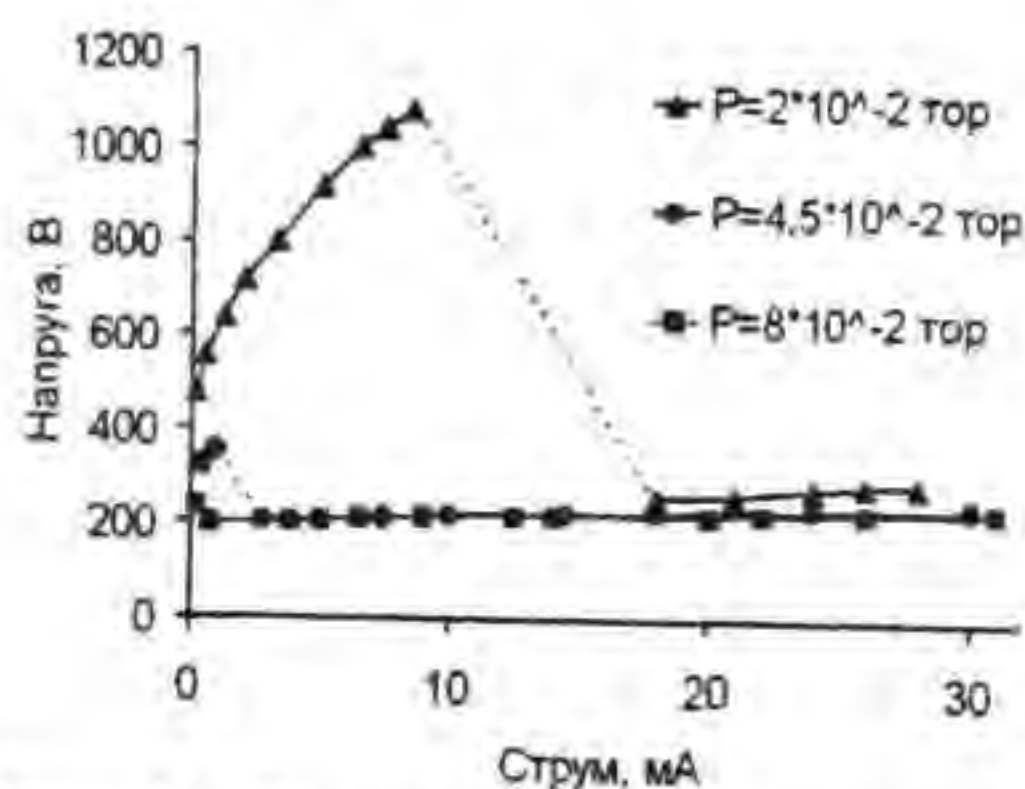


Рис. 4. Вольт-амперні характеристики для розряду з одним порожнинним катодом при різних тисках баластного газу.

Слід зауважити, що в області існування високовольтного й низьковольтного розрядів виконується закон Ома для повного кола з розрядним проміжком, тому є всі підстави стверджувати, що високовольтний розряд є самостійним аномальним жевріючим розрядом, катодом якого є торцева поверхня циліндра. По мірі збільшення струму плазма глибше проникає у порожнину катода, і врешті запалюється розряд із порожнинним катодом [6].

Порівнюючи ВАХ розряду із плоским катодом (рис. 3) і ВАХ для порожнинного катода (рис. 4) при однакових тисках газу, можна зробити висновок, що використання порожнинного катода дозволяє понизити тиск робочого газу, падіння напруги на розрядному проміжку і суттєво збільшити величину розрядного струму. При цьому, як видно із кривих рис. 4, збільшення розрядного струму в низьковольтному режимі практично не

супроводжується підвищенням падіння напруги на розряді, значення якого при тисках аргону в межах $(1-10) \cdot 10^{-2}$ тор змінюється від 200 до 250 вольт.

На рис. 5 показані вольт-амперні характеристики для розряду із блоком зв'язаних порожнинних катодів при тих самих тисках газу і з однаковим баластним опором $R_b = 100$ кОм.

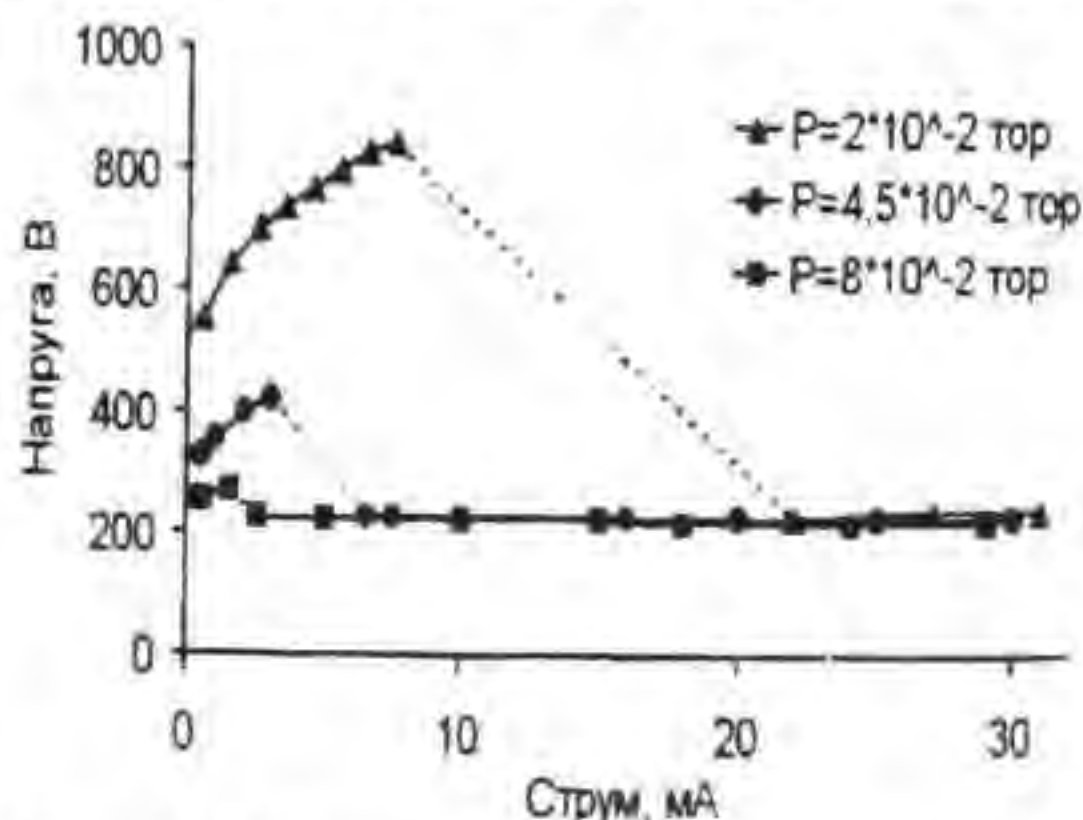


Рис. 5. Вольт-амперні характеристики для розряду із блоком зв'язаних порожнинних катодів при різних тисках баластного газу.

Порівняльний аналіз кривих рис. 4 і 5 показав, що хід залежностей $I = f(V)$ у високовольтному режимі майже однаковий, і перехід у нормальний режим горіння розряду з блоком порожнинних катодів відбувається майже при тих самих розрядних струмах, що і для одного порожнинного катода.

Причому, як видно на рис. 4 і 5, із зменшенням тиску перехід високовольтного розряду у низьковольтний відбувається при більших розрядних струмах. Але при тиску ~ 1 тор ця різниця майже зовсім зникає.

В низьковольтному режимі горіння розряду падіння напруги на розрядному проміжку практично не змінюється, але величина розрядного струму помітно збільшується. Крім того, дослідження показали, що якщо з одним порожнинним катодом граничний розрядний струм становив декілька сотень міліампер, то із блоком катодів цей струм міг сягати одного ампера, при забезпеченні відповідного охолодження катода.

Слід також відзначити, що струм і падіння напруги переходу високовольтного розряду в низьковольтний залежать не лише від тиску газу, як це видно з рис. 4 і 5, але і від величини баластного опору R_b у колі живлення. Для розряду з блоком порожнинних катодів при тиску $3 \cdot 10^{-2}$ тор це проілюстровано кривими рис. 6.

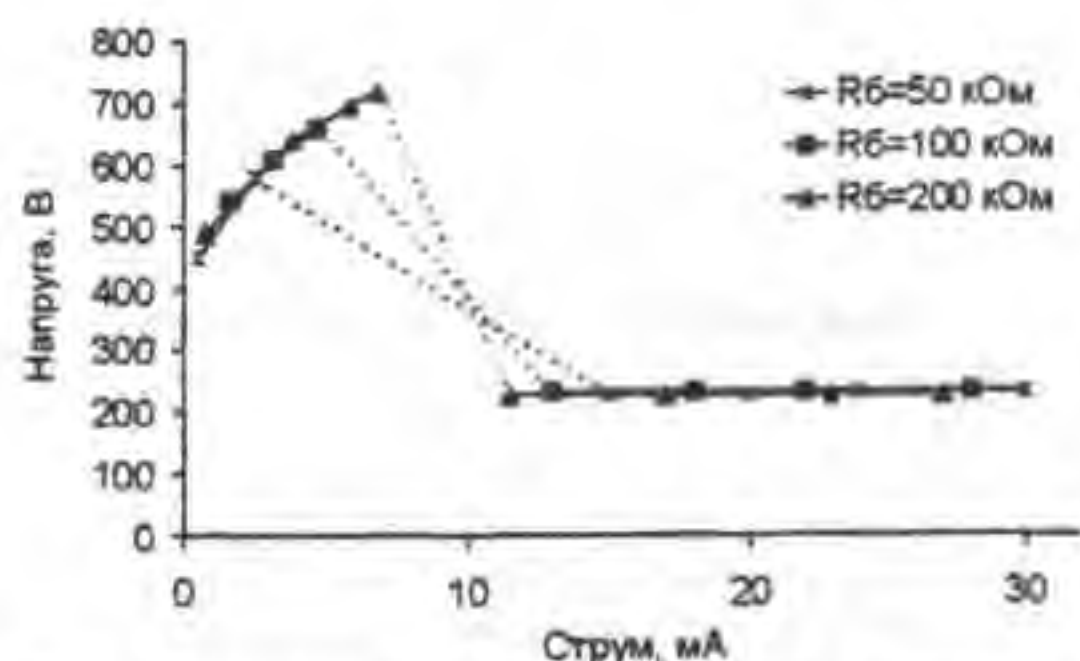


Рис. 6. Перехід високовольтного розряду в низьковольтний при різних величинах баластного опору.

Як видно з рисунка, при зменшенні R_6 інтервал горіння високовольтного розряду зменшується, а величина перехідного струмового інтервалу збільшується. Звідси випливає, що при необхідності використання високовольтного режиму горіння розряду, величину баластного опору треба збільшувати, а для низьковольтного – зменшувати.

Цікавою особливістю розряду з порожнинним катодом при низьких тисках є наявність “петлі гістерезису” на вольт-амперних характеристиках, при їх вимірюванні у прямому й зворотному напрямках. Це проілюстровано кривою на рис. 7, для розряду з одним порожнинним катодом при тиску $2 \cdot 10^{-2}$ тор.

З рисунка видно, що при струмі – 10 мА розряд стрибкоподібно переходить у

низьковольтний режим, і при подальшому зменшенні напруги на розрядному проміжку повторюється хід кривої, але перехід до високовольтного режиму відбувається при значно менших значеннях розрядного струму. Цей перехід також залежить як від тиску робочого газу, так і від величини баластного опору у розрядному колі.

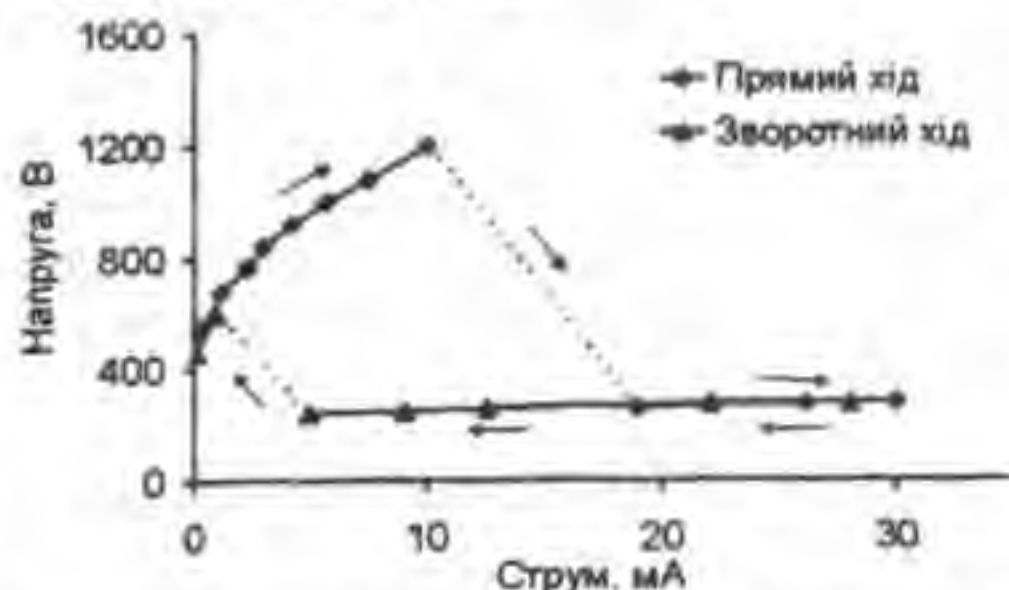


Рис. 7. Гістерезисний характер ВАХ розряду для випадку з одним порожнинним катодом.

Отже, з аналізу отриманих результатів видно, що в системі з одиночним порожнинним катодом вдається отримувати значно більші розрядні струми, ніж у випадку із звичайними плоскопаралельними електродами, при однакових падіннях напруги на розряді і при тих самих тисках $\sim 10^{-2}$ тор. Але найбільш доцільним з точки зору ефективності є застосування саме блоку зв'язаних порожнинних катодів, оскільки це дає змогу додатково підвищити розрядний струм при інших однакових умовах.

Список використаних джерел

1. Москалев Б.И. Разряд с полым катодом. – М.: Энергия, 1969. – 184 с.
2. Капцов Н.А. Электроника – М.: Гостехиздат, 1956. – 459 с.
3. Майселл Л., Глэнг Р. Технология тонких пленок. Справочник. Т. 1 – М.: Сов. радио, 1977. – 664 с.
4. Плещинцев Н.В. Катодное распыление. – М.: Атомиздат, 1963. – 344 с.
5. Визирь А.В., Окс Е.М., Щанин П.М., Юшков Г.Ю. Несамостоятельный тлеющий разряд с полым катодом для широкоапертурных ионных источников // Журнал технической физики – 1997. – 67, № 6. – С. 27-31.
6. Кучеренко Е.Т., Зыкова Е.В. Исследование полых катодов разных диаметров // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 1975. – № 16. – С. 55-57
7. Кучеренко Е.Т., Зыкова Е.В. Полый катод конической формы // Радиотехника и электроника. – 1975. – № 2. – С. 438-439
8. Гырылов Е.И. Тлеющий разряд в трубчатой катодной полости // Журнал технической физики. – 2001. – 71, № 2. – С. 137-138.
9. Кучеренко Е.Т. Получение окисных пленок алюминия переменной толщины в плазме газового разряда // Вакуумные технологии и оборудование. – 2001. – С. 279-282.
10. А.с. 338165 СССР, Полый холодный катод для гелий-неоновых лазеров/ Е.Т. Кучеренко, Е.В. Зыкова. – Оpubл. 1972, Бюллетень изобретений № 28.

Надійшла до редколегії 27.05.2009

УДК 538.566

Левитський С.М., докт. фіз.-мат.наук, проф.

Компресія ЛЧМ – імпульсів у плазмі іоносфери

Показано, що при проходженні через плазму радіоімпульси з лінійною частотною модуляцією (ЛЧМ – імпульси) зазнають компресії. На прикладі іоносферної плазми розраховані умови оптимальної компресії і параметри таких оптимально стиснутих імпульсів.

Ключові слова: ЛЧМ-імпульс, компресія, плазма, іоносфера

*E-mail: sml@univ.kiev.ua.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов І.О.

Levitsky S.M., Dr. of Sci., Prof.

Compression of LFM –pulses in ionospheric plasma

It is shown that passing of a linear frequency modulated radiopulse (LFM –pulse) in a plasma it becomes time-compressed. For the case of ionospheric plasma were evaluated the conditions of optimal compression and the parameters of a such optimal compressed pulse.

Key Words: LFM-pulse, compression, plasma, ionosphaera

Імпульси з лінійною частотною модуляцією (ЛЧМ- імпульси) використовуються як для покращення співвідношення сигнал-шум у радіолокаційних системах [1], так і для збільшення миттєвої потужності генераторів радіоімпульсів НВЧ – діапазону [6], а також для створення надкоротких світлових імпульсів [2]. У подібних імпульсах частота зростає на протязі імпульсу лінійно

$$\omega(t) = \omega_0 + \mu t,$$

в межах від $\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2}$ в момент $t - \frac{\tau}{2}$ до $\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2}$ при $t + \frac{\tau}{2}$, де τ - тривалість імпульсу.

Очевидно, що $\Delta\omega = \mu\tau$. Добуток $\Delta\omega\tau = B$ має назву бази ЛЧМ – імпульсу і характеризує ступінь його частотної модуляції.

При обробці ЛЧМ – імпульсу він пропускається через узгоджений фільтр, тобто систему з дисперсією, у якій час затримки сигналу зменшується з частотою. Тому на виході подібної системи відбувається стискання імпульсу у часі, що дає основний пік відгуку набагато більший, ніж початкова амплітуда коливань у ЛЧМ – імпульсі. На практиці для подібного стискання (компресії) ЛЧМ – імпульсів застосовуються пасивні або активні лінії затримки, які мають потрібний закон дисперсії і являють собою досить складні системи [3]

В даній роботі показано, що компресія ЛЧМ – імпульсів може відбуватися також і при проходженні подібних імпульсів через середовище, що має природну дисперсію, наприклад, через плазму. Дійсно, групова швидкість електромагнітних хвиль у плазмі зростає з частотою, так що пізня (високочастотна) частина імпульсу буде "наздоганяти" його ранню (низькочастотну) частину. Це схоже на фазове фокусування електронів, де пізні швидкі електрони наздоганяють ранні повільні, утворюючи на певній відстані фазовий фокус.

У загальному випадку форма ЛЧМ – імпульсу, що пройшов у середовищі з дисперсією деякий шлях, буде

$$U(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{s}(\omega) \exp[i\omega t - i\varphi(\omega)] d\omega \quad (1)$$

де $\dot{s}(\omega)$ - спектр початкового ЛЧМ - імпульсу а $\varphi(\omega)$ - набіг фази сигналу з частотою ω на цьому шляху. Для ЛЧМ - імпульсів з базою $B \gg 1$ спектр наближено може бути представлений як [4]

$$\dot{s}(\omega) = \frac{U_m}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \exp\left[-i \frac{(\omega - \omega_0)^2}{2\mu}\right], \quad (2)$$

а закон дисперсії $\varphi(\omega)$ у загальному вигляді як

$$\varphi(\omega) = \varphi(\omega_0) + \varphi'(\omega_0)\Omega + \frac{\varphi''(\omega_0)}{2}\Omega^2 + \dots, \quad \text{де } \Omega = \omega - \omega_0. \quad \text{Тоді} \quad (3)$$

$$U(t) = \frac{1}{2\pi} \frac{U_m}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i\omega_0 t + i\Omega t - i\frac{\Omega^2}{2\mu} - i\varphi(\omega_0) - i\varphi'(\omega_0)\Omega - i\frac{\varphi''(\omega_0)\Omega^2}{2}] d\Omega \quad (4)$$

Виносячи з-під інтеграла множники, що не залежать від Ω та групуючи члени за ступеням Ω , одержимо

$$U(t) = \frac{U_m}{4\sqrt{\pi\mu}} \exp[i\omega_0 t - \varphi(\omega_0)] \int_{-\infty}^{\infty} \exp i\{ -[\frac{1}{2\mu} + \frac{\varphi''(\omega_0)}{2}]\Omega^2 + [t - \varphi'(\omega_0)]\Omega \} d\Omega \quad (5)$$

або

$$U(t) = A \int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} \exp[i(ax^2 + bx)] dx \quad (6)$$

де

$$A = \frac{U_m}{4\sqrt{\pi\mu}} \exp[i\omega_0 t - \varphi(\omega_0)]$$

$$a = -[\frac{1}{2\mu} + \frac{\varphi''(\omega_0)}{2}],$$

$$b = t - \varphi'(\omega_0).$$

Тут A – комплексна амплітуда несучої частоти ЛЧМ-імпульсу, що зазнав на пройденому шляху набіг фази $\varphi(\omega_0)$, b – час t , відрахований від моменту входження імпульсу в розглядуване середовище, а параметр a описує ступінь компресії.

Дійсно, при $a = 0$, тобто при $1/\mu = -\varphi''(\omega_0)$ наведений вище інтеграл зводиться до

$$\int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} \exp(ibx) dx = \Delta\omega \frac{\sin[(t - \varphi'(\omega_0))\Delta\omega]}{[(t - \varphi'(\omega_0))\Delta\omega]} = \Delta\omega \text{Sinc}(\Delta\omega t') \quad (7)$$

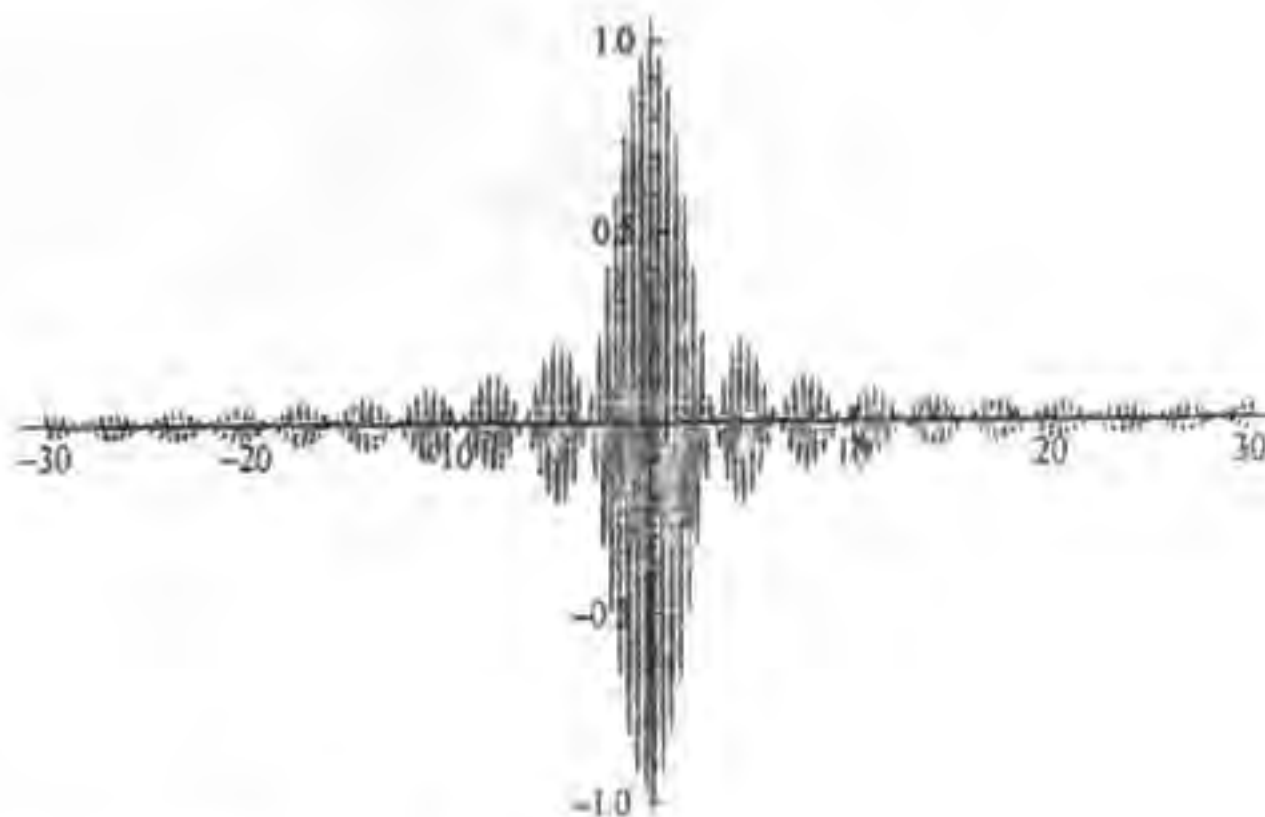


Рис. 1. Форма оптимально стиснутого ЛЧМ-імпульсу

відомої функції *Sinc*, у якій тривалість основної частини імпульсу складає

$$T = 4\pi / \Delta\omega \quad (8)$$

тобто величину в $B/4\pi$ разів меншу, ніж початкова тривалість ЛЧМ-імпульсу τ (рис.1).

Якщо середовищем, у якому поширюється ЛЧМ-імпульс, є однорідна плазма, то і в ній діелектрична проникливість $\epsilon_p = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$

показник заломлення $n(\omega) = \sqrt{\epsilon_p}$, а загальний набіг фази на шляху z буде

$$\varphi(\omega) = \omega \frac{z}{c} n(\omega) = \theta \omega n(\omega) \quad (9)$$

де $\theta = z/c$ – час, пропорційний шляху z .

Тоді

$$\begin{aligned} \varphi(\omega_0) &= \theta \omega_0 n(\omega_0) = \\ &= \theta \omega_0 \sqrt{1 - \omega_p^2 / \omega_0^2} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\varphi''(\omega_0) = -\frac{\theta}{\omega_0} \frac{1 - n^2(\omega_0)}{n(\omega_0)^3} = -\frac{dv_{gr}/d\omega}{v_{gr}^2}, \quad (11)$$

де $v_{gr} = c n(\omega)$ – групова швидкість електромагнітних хвиль з частотою ω .

Розглянемо як приклад поширення ЛЧМ - імпульсу в іоносферній плазмі.

Нехай параметри імпульсу будуть: несуча частота $\omega_0 = 10^8 \text{ сек}^{-1}$, тривалість імпульсу $\tau = 20 \text{ мкс}$, девіація частоти $\Delta\omega = 10^7 \text{ сек}^{-1}$. Тоді $\mu = \Delta\omega \tau = 5 \cdot 10^{11} \text{ сек}^2$ і база $B = \Delta\omega \tau = 200 \gg 1$.

Нехай $\omega_p = 7 \cdot 10^7 \text{ сек}^{-1}$, що відповідає концентрації електронів $n_e = 10^6 \text{ см}^{-3}$, характер -

ній для F-шару у іоносфері [5]. Тоді $n(\omega_0) = 0.71$, $\varphi'(\omega) = 1.41 \theta$, а

$$\varphi''(\omega_0) = -1.41 \theta / \omega_0$$

З умови $\alpha = 0$, тобто умови оптимальної компресії $\varphi''(\omega_0) = 1/\mu$ визначаємо $\theta = \omega_0 / 1.41 \mu = 144 \text{ мкс}$, що відповідає шляху $z = c\theta = 43 \text{ км}$, на якому і відбувається оптимальна компресія.

Оскільки протяжність F-шару складає декілька сотень кілометрів [6], припущення про однорідність плазми виконується задовільно.

А ефективна тривалість стиснутого імпульсу складає $T = 4\pi / \Delta\omega = 1.26 \text{ мкс}$, що в 16 разів менше початкової тривалості ЛЧМ - імпульсу.

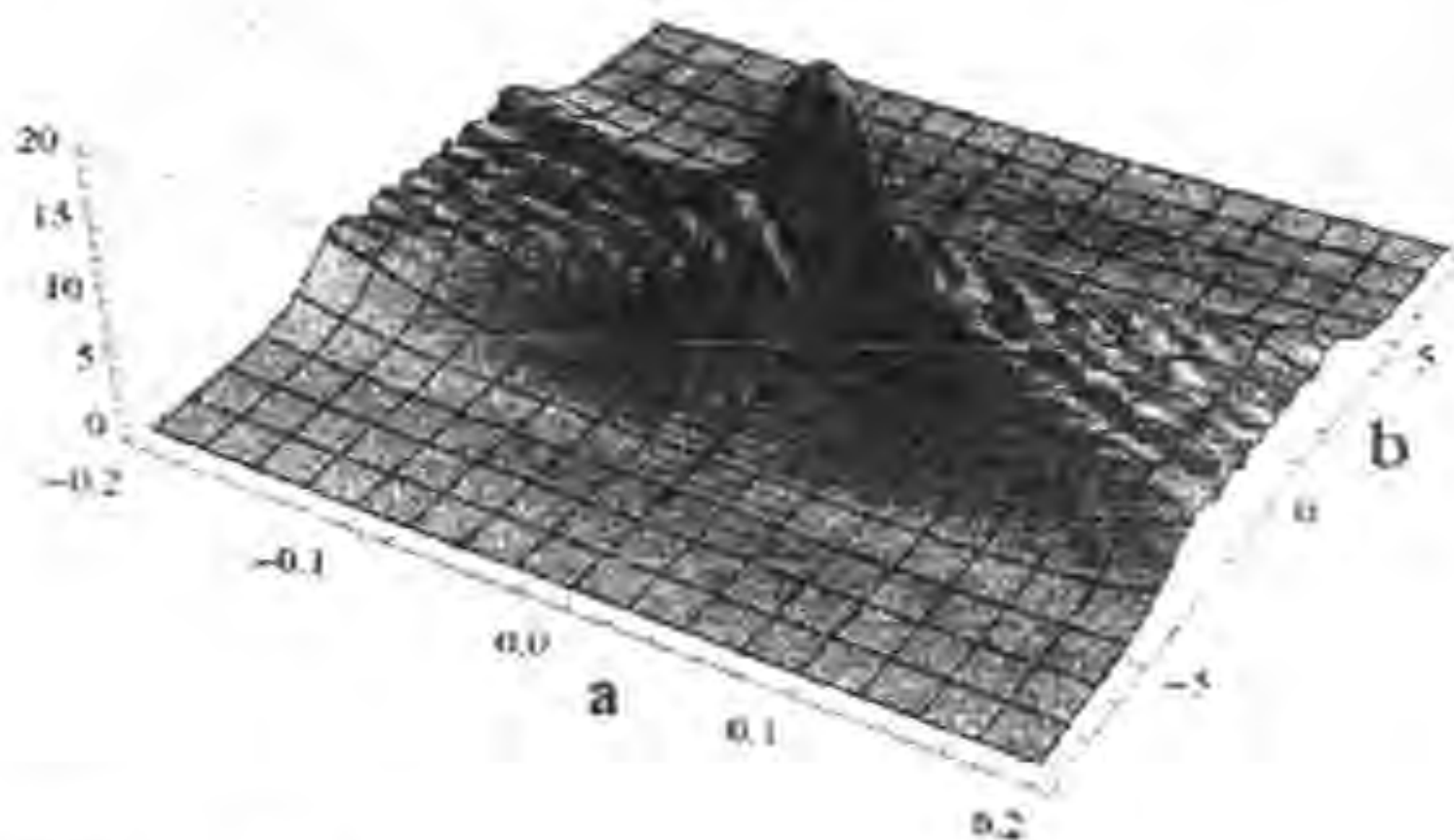


Рис.2. Процес компресії ЛЧМ – імпульсу

Процес компресії ЛЧМ - імпульсу у плазмі ілюструється рис.2. Тут по вісі a відкладено довжину шляху, відраховану від місця оптимальної компресії. Для даного прикладу реальний шлях z , пройдений імпульсом у плазмі дорівнює $z = 4,3 \cdot 10^4 (a + 1)$ метрів. А по вісі b відкладений час, відрахований від центру імпульсу, що знаходиться на відстані a від місця його оптимальної компресії, у даному прикладі – у мікросекундах.

З енергетичних міркувань очевидно, що співвідношення середнього значення амплітуд

коливань у оптимально стиснутому імпульсі до амплітуди коливань у початковому ЛЧМ - імпульсі має бути порядку $\sqrt{\pi \tau}$. У наведеному вище прикладі це співвідношення близьке до чотирьох.

Як видно з формули (8), величина T може бути скорочена за рахунок збільшення $\Delta\omega$. Але при цьому фігуруюче в фл-ах (4)-(5) Ω може стати настільки великим, що перестане виконуватися умова $\Omega \ll \omega_0$, і істотним стане

роль неврахованого в $\varphi(\omega)$ члена $\frac{\varphi'''(\omega_0)}{6}\Omega^3$.

Це особливо небезпечно при наближенні ω_0 до ω_p , бо вираз для $\varphi'''(\omega)$ містить у знаменнику у знаменнику n^3 , і кубічний член в $\varphi(\omega)$ швидко зростатиме при наближенні до плазмового резонансу. А це може істотно погіршити компресію ЛЧМ-імпульсів.

Цікаво відмітити, що аналогічний ефект компресії ЛЧМ-імпульсів можливий в принципі також у хвильоводах, які мають такий же закон дисперсії, як і плазма. Але у реальних умовах для хвиль сантиметрового діапазону ($\lambda = 3-10$ см) і тривалості імпульсів у частки мікросекунди відстані, на яких могла б здійснюватися оптимальна компресія, виявляються надто великими (у сотні метрів).

Так, наприклад, для хвиль довжиною $\lambda = 10$ см при критичній частоті хвильовода $\omega_c = 1,2 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-1}$ друга похідна $\varphi''(\omega_0)$ дорівнюватиме $-2,5 \cdot 10^{-11} \theta$.

При прямокутному імпульсі тривалістю $\tau = 0,1$ нс та $\Delta\omega = 0,1\omega_0$ величина $\mu = 2 \cdot 10^{16} \text{ сек}^{-2}$, так що час $\theta = 2$ нс, що відповідає відстані, на якій компресія буде оптимальною, складатиме 600 м. Отже, практично одержання компресії НВЧ – хвиль у хвильоводах можна вважати нереальним.

Висновки

Розрахунковим шляхом показано, що у середовищі, яке має певну природну дисперсію (наприклад, у плазмі), ЛЧМ-імпульси можуть зазнавати істотну компресію у часі. В роботі визначені умови оптимальної компресії.

На прикладі іоносферної плазми продемонстровано компресію мікросекундного імпульсу зі скороченням його тривалості більш як на порядок з відповідним виграшем його амплітуди. Визначена довжина шляху у плазмі, потрібна для оптимальної компресії.

Список використаних джерел

1. Кук Ч., Бернфельд М. Радиолокационные сигналы. – М. Сов.радио. 1971. – 283 с.
2. Ахманов С.А., Выходин В.А., Чиркин А.С. Оптика фемто-секундных лазерных импульсов. – М. Наука. 1988. – 159-162 с.
3. Ширман Я.Д. Расширение и сжатие сигналов. – М. Сов.Радио. 1974. – 112 с.
4. Баскаков С.И. Радиотехнические цепи и сигналы. – М. Выс.школа. 1988. – 104 с.
5. Альперт Я.Л., Гинзбург В.Л., Фейнберг Е.Л. Распространение радиоволн. – М. ГИТТЛ. 1953. – 69 с.
6. Бартман В.Л., Денисов Г.Г. Метод достижения мультимега-ваттных пиковых мощностей путем компрессии импульсов СВЧ в винтовом волноводе // Изв.вузов, сер. Радиофизика – 2007. – 50, №1. – С.40-53.

Надійшла до редколегії 15.06.2009.

УДК 621.385.833

Находкін М.Г., докт. фіз.-мат. наук, проф.,
академік НАН,
Федорченко М.І., канд. фіз.-мат. наук,
Лепявко Б.С., студент

Формування інтерфейсу Sb/Ge(100)

Методами електронної спектроскопії досліджено зміну електронних властивостей (робота виходу, загин зон поблизу поверхні, густина електронних станів поблизу рівня Фермі) поверхні Ge(100)-(2x1) при адсорбції на ній атомів Sb. Показано, що на початкових стадіях адсорбції атомів Sb на поверхні Ge(100)-(2x1) ($\Theta_{\text{Sb}} \leq 0.5 \text{ ML}$) та при відпалі поверхні Ge(100) з кількома монослоями Sb зміна загину зон та синхронне збільшення роботи виходу може бути пояснене проявом ефекту поверхневого змішування між атомами Sb та Ge (вбудовуванням атомів Sb в матрицю атомів Ge).

Ключові слова: Sb, Ge(100), адсорбція, робота виходу, загин зон, поверхневі стани, перемішування.

*E-mail: mif@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Introduction

The using of surface-active materials (surfactants) in order to reach layer-by-layer growth of adsorbate films on the surfaces of solids excites various fundamental and practical interests [1-4]. The elements of the V group, like Sb and Bi, are found to be used widely as surfactants for metal and semiconductor films growth on the surfaces of Si and Ge. In spite of significant achievements in the surfactants study, the way of their influence is not quite clear. The surface intermixing effect was observed during investigations of Sb atoms adsorption onto Ge(100) surface, and the point of view, that intermixing could play a great role in thin films growth process, appeared [2]. The effect of Sb and Ge atoms intermixing was researched by scanning tunnel microscopy (STM) method [2]. Yet, investigations of the Sb/Ge(100) interface electronic features' changes, which can accompany the intermixing effect, were not performed by this time.

In this work we studied the process of forming Sb/Ge(100) interface, that includes investigations of

Nakhodkin M.G., D.Sc., prof., acad. of NAS of Ukraine,
Fedorchenko M.I., Ph.D.,
Lepiavko B.S., student

Formation of the Sb/Ge(100) interface

The electronic properties (work function, surface band bending, density of electronic states near Fermi level) of the Ge(100)-(2x1) surface were investigated using electron spectroscopy methods during adsorption of Sb atoms on it. It is shown, that on the beginning stages of Sb atoms adsorption onto Ge(100)-(2x1) surface ($\Theta_{\text{Sb}} \leq 0.5 \text{ ML}$) and during annealing of Ge(100) surface with several monolayers of Sb on it, the change of band bending with simultaneous change of work function value can be explained by occurrence of the surface intermixing effect between Sb and Ge atoms (build-in of Sb atom into the Ge lattice).

Keywords: Sb, Ge(100), adsorption, work function, band bending, surface states, intermixing.

electronic properties, like work function, band-bending and valence band structure, with purpose to found out additional arguments of surface intermixing effect appearing.

Experiment

Research was performed in ultra-high vacuum system with basic pressure $\sim 2 \cdot 10^{-10}$ torr. It was equipped with Auger-electron spectroscopy (AES), low-energy electron diffraction (LEED) and UV-photoelectron spectroscopy (UPES) facilities.

Due to AES, the element composition of the surface and the mechanism of Sb film formation on Ge were determined. LEED allowed to detect changes of crystallographic structure of the studied surfaces. UPES gives possibility to take photoelectron spectra (PES), stimulated by photon energy $h\nu = 7.7$ and 10.8 eV . PES gave information about valence band structure, work function and band bending values near the specimen surface. The chamber was equipped with an ion gun for cleaning of the investigating Ge surface by Ar ions, and the

system of controlled Sb film deposition of precise thickness *in situ*.

The Ge(100) samples were cut from the non-doped germanium plate of (p-type, $\rho \approx 40 \Omega \cdot \text{cm}$). On the beginning of the cleaning, the samples were washed in ultrasound bath by several organic dissolvents. Then the etching in hydrogen peroxide and washing in deionized water took place. In the vacuum chamber the samples were cleaned by several cycles of Ar ion bombardment, followed by annealing to 600 °C for two minutes. The chosen regular method of sample cleaning provided crystal surfaces of Ge(100) samples without traces of additional elements in AES spectra but with contrast LEED images, corresponding with 2×1 reconstruction. The work function (ϕ) was determined, as in articles [3,4], due to Einstein's equation: $\phi = h\nu - (E_f - E_{\min})$, where E_f – kinetic energy of photoelectrons which escaped from the Fermi level, $E_{\min}$ – minimal kinetic energy of photoelectrons, which was defined from the position of low-energy edge of PES. The determination of the work function was done from PES taken with $h\nu = 7.7 \text{ eV}$. The change of spectral peculiarities position of the photoelectron peaks, accorded with the Ge sp^3 hybrid electrons, relatively to E_f ($h\nu = 10.2 \text{ eV}$), and parallel shift of PES, taken with $h\nu = 7.7 \text{ eV}$, made able estimation values of band bending (ΔY). Possible mistakes in ϕ and ΔY evaluations were $\pm 0.01 \text{ eV}$.

The Sb vapour flow was generated by Knudsen source. The Sb coverage (Θ_{Sb}) was determined by the quartz microbalance. Deposition of Sb was performed in rate about 0.1 ML per minute. The formation of interfaces Sb atoms with the Ge(100)- 2×1 surface occurs by two ways. In first of them Sb atoms were deposited in series stage-by-stage at near to room temperature. The another way was characterized by annealing interfaces at 350C for two minutes after each stage of Sb deposition at room temperature.

Results & discussion

The surface of Ge(100), after cleaning and annealing, always has sharp LEED image with 2×1 reconstruction. During stage-to-stage deposition of Sb onto such surface at room temperature, fractional diffraction spots were losing their intensity and contrast with increasing of Θ_{Sb} .

At $\Theta_{\text{Sb}} \approx 1.0 \text{ ML}$, LEED pattern showed weakened diffraction spots of 1×1 reconstruction, following deposition of Sb up to $\Theta_{\text{Sb}} > 3 \text{ ML}$ led to disappearing of any diffraction structure. That could

mean transition of the surface into amorpheus state during deposition of Sb onto Ge(100)-(2×1) surface, if deposition is performed at room temperature. Annealing of Ge surface with several monolayers of Sb on it, deposited at room temperature, to more than 200 C, led to appearing of sharp 2×1 LEED image. However, sharpness and contrast of this image was less noticeable than it used to be in case of atomically clean surface Ge(100)-(2×1).

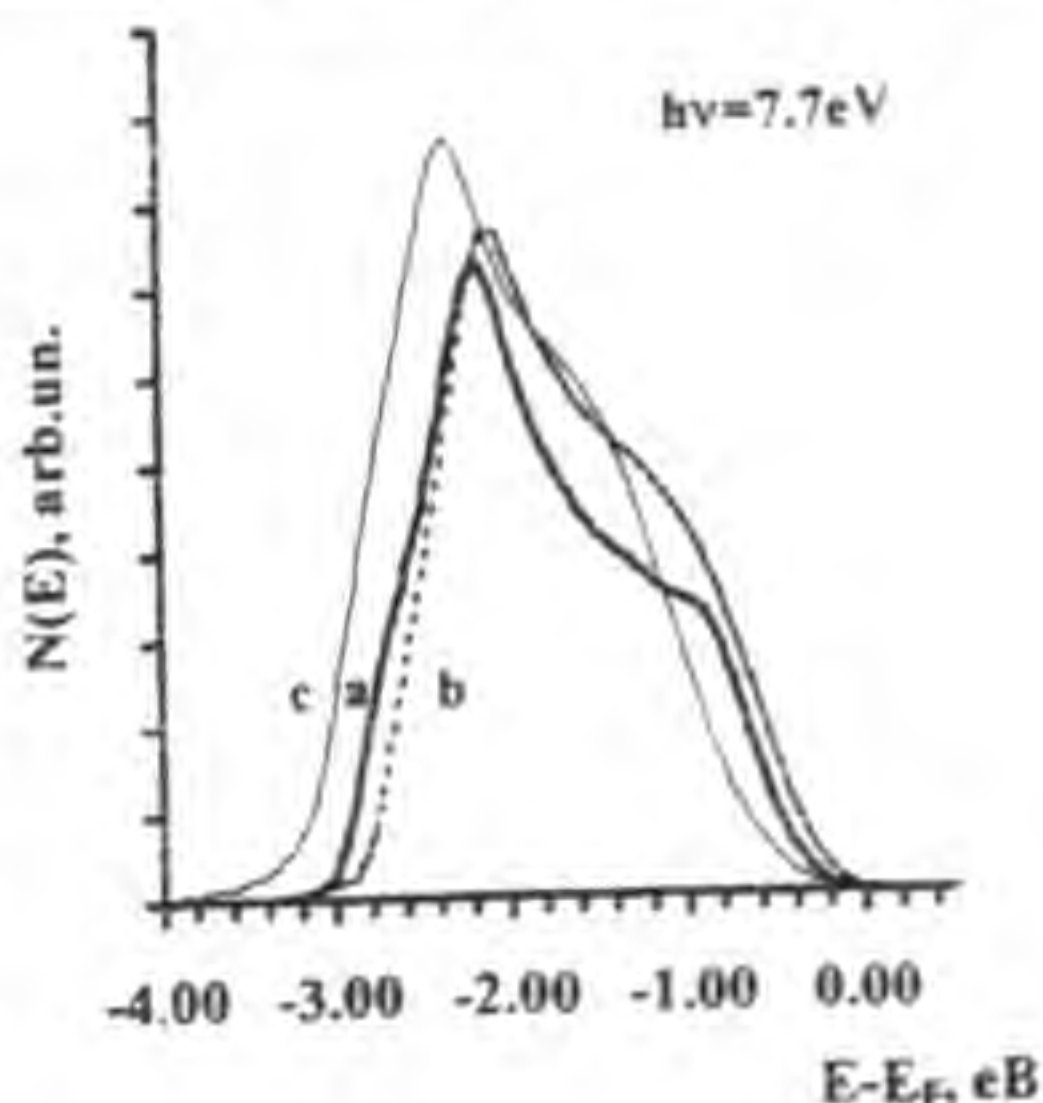


Fig.1 – PES ($h\nu = 7.7 \text{ eV}$) of atomically clean surface Ge(100)- 2×1 (a), followed by Sb deposition at the room temperature: b– $\Theta_{\text{Sb}} = 0.45 \text{ ML}$; c– $\Theta_{\text{Sb}} = 1 \text{ ML}$. up to $\Theta_{\text{Sb}} > 3 \text{ ML}$ led to disappearing of any diffraction structure.

Simultaneously with the control of the LEED images PES were taken. Fig.1 shows PES ($h\nu = 7.7 \text{ eV}$) of atomically clean Ge(100)- 2×1 surface (a) and the same surface with Sb atoms, deposited at room temperature (b,c). It is clear, that at $\Theta_{\text{Sb}} = 0.45 \text{ ML}$ (b) PES, without visible changes, shifts parallel with itself towards Fermi level. It means, that ϕ of the surface has increased. Nevertheless, at $\Theta_{\text{Sb}} = 1 \text{ ML}$ PES shifts to side, opposite from Fermi level, that witnesses the decrease of the ϕ value. Paying no regards to PES form changes, it can be affirmed, that the differences of ϕ values are mainly determined by ΔY near the surface.

Fig.2 shows dependences of ΔY near the surface and ϕ changes of Ge(100)-(2×1) surface from the amount of deposited Sb, for two different ways of interface formation, defined from PES data, collected by using 10.2 eV and 7.7 eV photon energy.

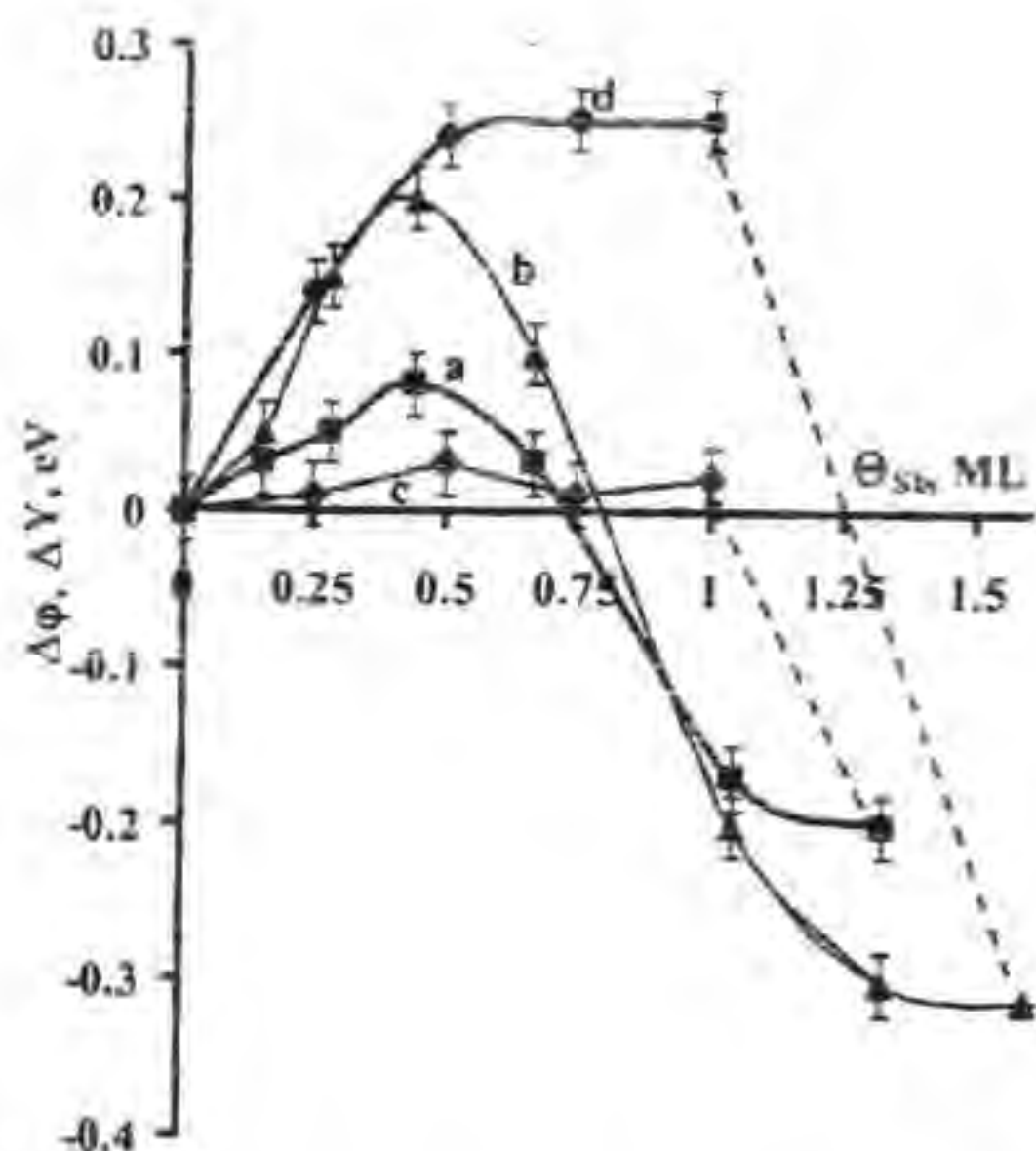


Fig.2 – ΔY and $\Delta\phi$ of Sb/Ge(100) interface, depending from Θ_{Sb} and annealing temperature: a– ΔY at the room temperature; b– $\Delta\phi$ at the room temperature; c– ΔY after annealing to 350 °C after each deposition; d– $\Delta\phi$ after annealing to 350 °C after each deposition. Arrows show change of the according features after annealing of the interface, formed at room temperature, to 350 °C.

It is obvious, that increase of Θ_{Sb} in the interval 0–0.5 ML at room temperature bands bend upward from their primary positions (a), and ϕ increases synchronously (b). Further increase of Θ_{Sb} leads to band bending downwards, and ϕ value decreases down to the value, typical for the bulk Sb [5]. By that time near surface region is disordered, which is clear from LEED images. Annealing of Sb/Ge(100) interface with $\Theta_{Sb} \geq 1$ ML to ≈ 350 °C causes rapid change of ΔY and ϕ (shown by stippled arrows on Fig.2); desorption of Sb atoms, till there is about 1 ML of Sb left on the surface; near surface ordering.

In the case of stage-by-stage Sb adsorption, followed by annealing of the interface to ≈ 350 °C after each deposition, value of ΔY (curve c on Fig.2) is almost stable, and ϕ (d) in the interval of Θ_{Sb} from 0 to 1.0 ML gradually increases up to 0.25 eV and equals ≈ 4.95 eV. The values of $\Delta\phi$ and ΔY of annealed interfaces, formed in the two different ways, coincide with each other.

Deposition of extra 0.5–0.7 ML of the Sb atoms onto annealed Ge(100)-2x1 interface with the one monolayer Sb coverage results in near surface disordering, ϕ decrease equals ≈ 0.5 eV and bands

bend downward to ≈ 0.2 eV. Followed annealing of this Sb/Ge(100) interface leads to ϕ value's increase and band bending upward. The difference between band bending of ordered (annealed) and disordered (deposition without annealing) structures is ≈ 0.2 eV, for ϕ this difference equals ≈ 0.5 eV.

Detailed study of PES, taken with different photon energy, allow to ascertain, that ϕ change of Ge(100)-2x1 surface during Sb deposition, as well as during annealing of the Sb/Ge(100) interface to 350–600 °C, is result of not only band bending, but also of effective electron affinity change.

It is important to point out, that the value of ΔY in near surface region, determined by comparison of PES ($h\nu = 10.2$ eV), is not equal to the contribution of ΔY into ϕ change. That is happened because of fact, that photoelectrons (when $h\nu = 10.2$ eV) skip into vacuum not exactly from the surface, but from near surface region of about 12 Å [5]. It is the reason of understatement of the ΔY contribution into ϕ change. This suggestion is proved by estimation of ΔY contribution into ϕ value, made on Fig. 2. ΔY for $\Theta_{Sb} = 0.45$ ML was determined to be ≈ 0.08 eV, while the $\Delta\phi$ is ≈ 0.2 eV. However, parallel shift of the PES from Fig. 1 ($h\nu = 7.7$ eV) shows, that all the change of ϕ value has happened due to ΔY .

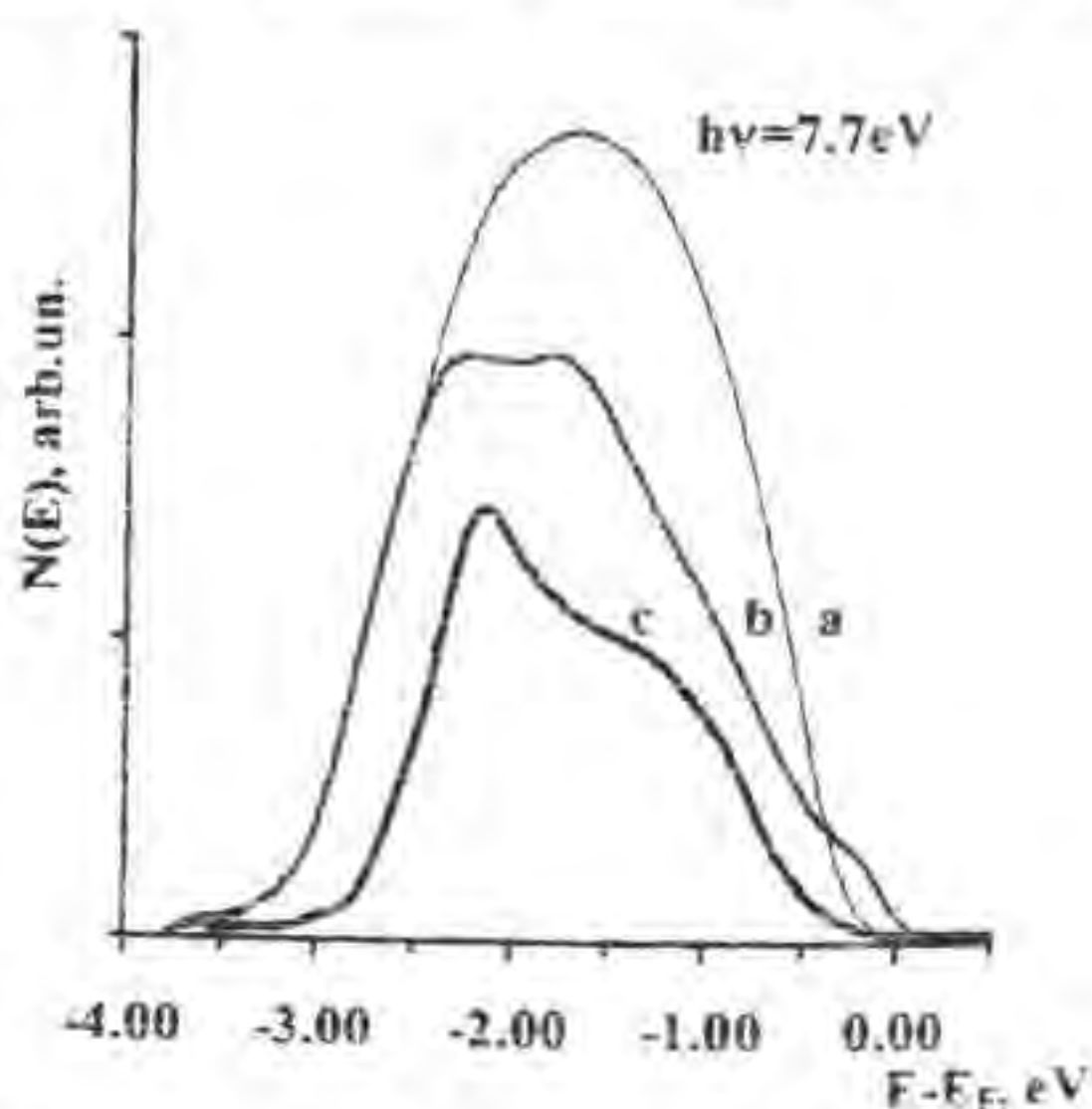


Fig.3 – Change of PES of Sb/Ge(100) interface, formed at room temperature with $\Theta_{Sb} = 10$ ML (a), during annealing: b– $T = 160$ °C; c– $T = 360$ °C

Though data, collected by comparison of PES taken with energy $h\nu = 7.7$ eV is not capable for band bending determination in wide interval of Θ_{Sb} , when the shape of PES curves strongly changes. The PES

of Ge(100) surface with $\Theta_{\text{Sb}} \approx 10$ ML and changes, that occur on it during annealing of the interface, are shown on Fig.3. It is evident, that PES of structure with $\Theta_{\text{Sb}} \approx 10$ ML is unordered and typical for amorphous surface (a). Small electron density near Fermi level suggests, that Sb film, deposited at room temperature, has semiconductor properties [5]. Low temperature annealing ($T \approx 160^\circ\text{C}$) results in arrangement of such film and its metallization. This conclusion also could be based on appearing of electron structure peculiarities on PES curve and rapid increase of electron states density near Fermi level (b). LEED patterns show accurate 1×1 structure for metallic Sb film. The fact, that low-energy edges of PES curves of amorphous and metallic are almost equal, can be testify, that work functions of these film surfaces are equal too.

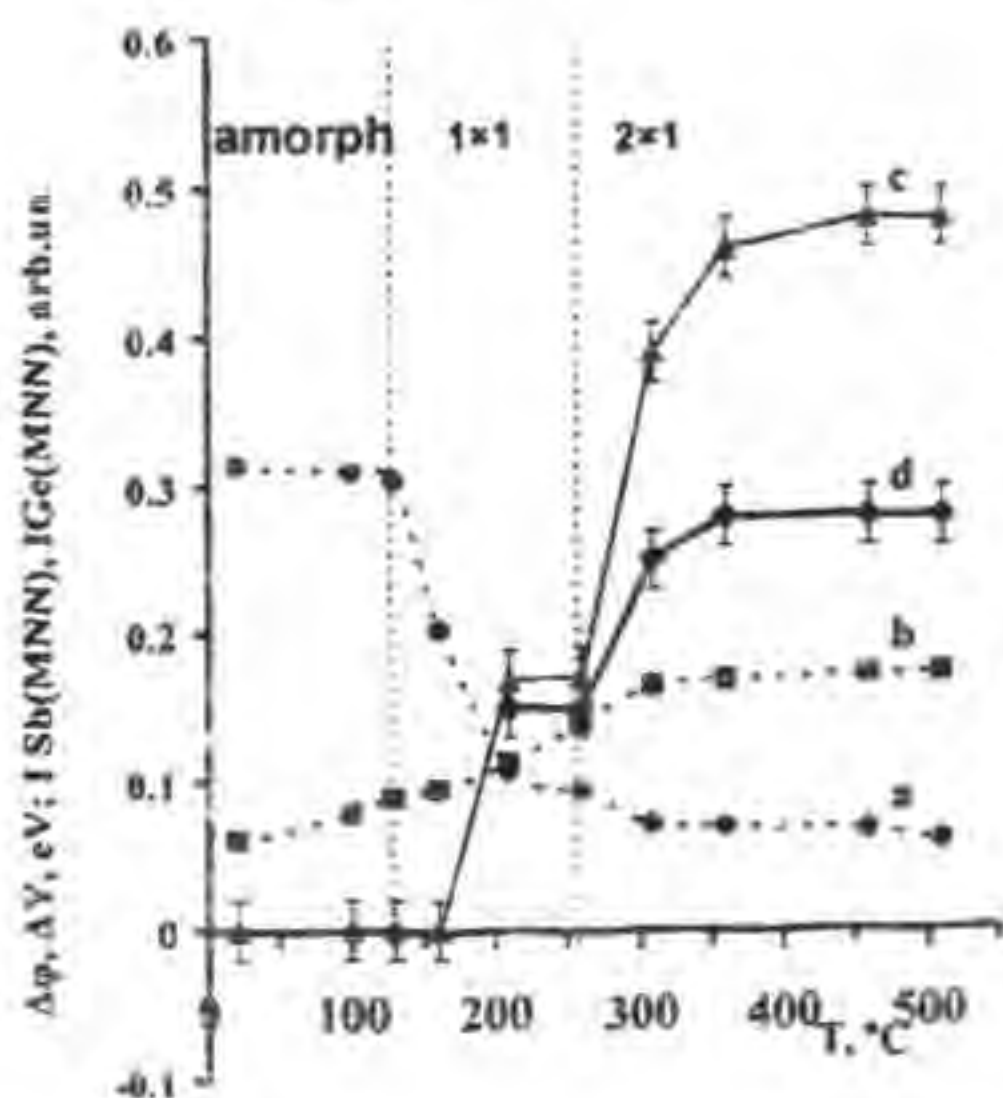


Fig.4 – Dependence of electronic feature changes of Sb/Ge(100) interface, formed at room temperature with $\Theta_{\text{Sb}} = 5$ ML, from the annealing temperature: a–Sb MNN Auger peak intensity; b– Ge MNN Auger peak intensity; c–work function ($\Delta\phi$); d–band bending (ΔY).

The values of work function for amorphous and metallic Sb films are determined as ≈ 4.4 eV, that coincides with work function values of Sb films, determined by another methods [6]. Increase of annealing temperature to $\approx 300^\circ\text{C}$ highly changes PES of Sb/Ge(100) interface. Electron state density near Fermi level rapidly decrease, and low-energy edge of the PES shifts towards Fermi level up to 0.45 eV (c on Fig.3). That means, that work function value also decrease for 0.45 eV. LEED images show the occurrence of 2×1 reconstruction.

Fig.4 shows changes of MNN Auger peaks intensity for Sb and Ge atoms and also behavior of ϕ and ΔY in near surface region during Sb/Ge(100) interface annealing. The intensity of MNN Auger Sb line is almost stable till $T = 130^\circ\text{C}$ (a). Most of its change takes place, when T varies from 130 to 300°C – noticeable reduction is observed. Increase of MNN Auger Ge line (b) is present in this temperature interval too. It is known [2], that temperature desorption of Sb from Ge(100) surface happens in just this temperature interval. Annealing to higher temperatures leads to formation of structure with only one monolayer left on the surface. In such conditions there is possibility of intermixing between Sb and Ge atoms. The results of the experiment suit these ideas.

Temperature increase causes desorption of weak-fixed atoms of Sb. The Auger peak intensity of the adsorbed atoms decreases, while intensity of the underlayer atoms of substrate increases. The surface is being arranged into 2×1 reconstruction. Further increase of temperature up to 600°C doesn't effect on Auger peaks intensity, which means that bond energy between atoms of Ge and Sb is much stronger, than between a pair of Sb atoms. Significant changes of ϕ (c) and ΔY in near surface region (d) take place simultaneously with changes of Auger peaks intensity in temperature interval $130\text{--}300^\circ\text{C}$. Also, the effect of surface intermixing can occur in this temperature interval. Sb and Ge atoms can exchange their positions, or Sb atoms may build-in into crystal lattice of germanium surface. That could be an explanation for increase of ϕ value during Sb/Ge(100) interface annealing, so the occurrence of the surface intermixing effect in this system is accompanied by ϕ increase.

In fact, the behavior of ϕ and ΔY of Sb/Ge(100) interface during its formation and annealing is similar with behavior of these features for Sb/Ge(111) [3]. Nevertheless, unlikely Sb/Ge(100) interface, for Sb/Ge(111) the surface intermixing between Sb and Ge atoms had not been observed by STM methods [8]. It could be explained by more complicated geometry of Sb building-in into germanium matrix in this system.

Detailed analysis of experimental data let us set a work model for its explanation, like the model, that was used earlier for Sb/Ge(111) system [3].

On early stages of Sb atoms adsorption onto atomically clean Ge(100)- 2×1 surface the part of Sb atoms replace Ge atoms within the underlayer lattice, or simply build-in into Ge matrix. That leads to rearrangement of the surface and to gradual crystalline- amorphous transition of near surface

region. New electronic states are generated, while primary electronic states could disappear. The difference of these processes results in band bending changes in near surface region and changes of the effective electronic affinity. As a result, in the beginning stages of Sb film growth increase of ϕ value of the surface is observed. During further deposition ($\Theta_{\text{Sb}} > 0.5$ ML) the process of transition near surface region into amorphous state becomes dominating. New electron states, brought by intermixing, disappear as well as primary. The behavior of ϕ is determined mostly by effective electronic affinity. Sb atoms are settled above atoms of Ge. Electron density exchange between Sb and Ge atoms happens in accordance with their electronegativity values. In our laboratory was established that the most suitable scale for determination of charge transfer between different atoms is Allred-Rochow scale [9]. This statement was proved by investigating many pairs of adsorbent-adsorbate atoms. According to this scale, the value of electronegativity for Sb atoms is 1.82, for Ge – 2.02. Such values cause transfer of electron density from Sb atoms to atoms of Ge, that results into ϕ value reduction of the surface with $\Theta_{\text{Sb}} \geq 1.0$ ML down to ≈ 4.4 eV.

Several processes take place during annealing of amorphous surface of Ge with amorphous film of Sb on it. Arrangement of the near surface region of germanium underlayer, arrangement of Sb film, and transition of this film from semiconductor into metallic state occur in interval 130–300 °C. Temperature desorption (sublimation) of Sb atoms, bonded only to other Sb atoms, happens simultaneously with these processes. Only Sb atoms, bonded with atoms of Ge, are finally left on the surface. In such conditions there could be building-in of Sb atoms into germanium surface lattice. This process is accompanied by generation of new surface and near surface acceptor electron states and increase of effective electron affinity of the surface. The explanation of effective electronic affinity increase is not obvious and requires an additional theoretical research. Band bending upward and increase of effective electron affinity cause increase of ϕ up to value ≈ 4.95 eV. In fact, increase of ϕ of the surface during annealing of Sb/Ge(100) interface is evidence of intermixing occurrence between Sb and Ge atoms.

Conclusions

The investigations of Sb/Ge(100) interface formation has shown, that on the beginning stages of Sb atoms adsorption onto Ge(100)-(2x1) surface

($\Theta_{\text{Sb}} \leq 0.5$ ML) and during annealing of Ge(100) interface with several monolayers of Sb on it, the change of band bending with simultaneous increase of ϕ value takes place. It is explained by occurrence of the surface intermixing between Sb and Ge atoms (build-in of Sb atom into the Ge lattice).

References

1. Rich D.H., Miller T., Chiang T.C. Electric and chemical properties of In and Sb adsorbed on Ge(100) studied by synchrotron photoemission // *Phys.Rev.B.* – 1990. – Vol. 41, N5, – P. 3004-3016
2. Chan L.H., Altman E.I. Effect of surface intermixing on the morphology of Sb-terminated Ge(100) surfaces // *Phys.Rev.B.* – 2001. – Vol. 63. – P. 195309
3. Nakhodkin M.G., Fedorchenko M.I. The Sb/Ge(111) interface formation// *Bulletin of the University of Kiev. Series: Physics & Mathematics.* – 2006. – Vol. 4 – P. 323-332.
4. Nakhodkin M.G., Fedorchenko M.I. The work function dependence of Si(100)-2x1 surface on Bi coverage degree // *Bulletin of the University of Kiev. Series: Physics & Mathematics.* – 2004. – Vol. 4 – P.373–378.
5. Wagner L.F., Spicer W.E. Photoemission study of the effect of bulk doping and oxygen exposure on silicon surface states // *Phys.Rev.*–1974.–V.B9. P.1512-1515.
6. Apker L., Tafi E., and Dickey J. Some Semimetallic Characteristics of the Photoelectric Emission from As, Sb, and Bi // *Phys.Rev.* –1949.–V.76,N2.–P.270-272.
7. Gorodetsky D.A., Melnik Yu.P., Proskurin D.P. and Usenko V.A. Structure and Electronic Properties of Antimony Films on the Mo(110) Surface // *Physics of the Solid State.* – 2004. – Vol. 46, No.10. – P.1940-1948.
8. Kuzmin M., Laukkanen P., Perala R.E., Ahola-Tuomi M., Vayrynen J.J. 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. –V.601.–P.837–843.
9. Allred A.L., Rochow E.G. A scale of electronegativity 504.834909091 based on electrostatic force // *J. Inorg. Nucl. Chem.* – 1958. –Vol. 5, N4. – P. 264-268.

Received by editorial board on 03.10.2009

УДК 535.345.67

*Онишук В.М., аспірант, Первак Ю.О., д.ф.-м.н., проф.

Прояви резонансу в багатошарових тонкоплівкових структурах без явно виражених резонаторів

Багатошарові тонкоплівкові структури з високою просторовою дисперсією представляють значний інтерес як компактні пристрої для багатоканальної частотної селекції, а також для управління пучками світла та як пристрої контролю дисперсії. Для структури з 202 шарами з високим просторовим зміщенням в спектральному діапазоні 1500-1570 нм отримано залежність амплітуди електричного поля від позиції в структурі. Дана залежність дозволяє визначити механізми виникнення високої просторової дисперсії. Для даної структури показано, що виникнення високого просторового зміщення в залежності від довжини хвилі зумовлене декількома механізмами виникнення просторової дисперсії. Також показано, що ефект залежної від довжини хвилі величини накопиченої енергії (ефект резонансу) присутній не лише в півхвильовому шарі, але і в шарах з товщиною значно меншою за чвертьхвильову.

Ключові слова: багатошарова тонкоплівкова структура, просторова дисперсія, просторове зміщення

*E-mail: vetonyx@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Немонохроматичне світло, що падає під кутом до поверхні призми, внаслідок дисперсії показника заломлення матеріалу призми, поширюється в призмі в залежності від довжини хвилі в різних напрямках. Промені, що вийшли з призми, також поширюються в залежності від довжини хвилі в різних напрямках, згідно геометрії призми. Робота такої звичайної призми ґрунтується на дисперсії показника заломлення матеріалу, з якого вона виготовлена [1]. Оскільки величина показника заломлення зазвичай слабо залежить від довжини хвилі для прозорих матеріалів, то і величина розщеплення є обмеженою. Попередні дослідження показали що

V.M. Onishchuk, post grad. stud., Yu.O. Pervak, Dr. Sci.

Resonance phenomenon in multilayer thin-film structures without presence well-defined cavities

Multilayer thin-film structures with high spatial dispersion are interesting as compact devices for wavelength multiplexing and beam-steering and dispersion-control devices. For structure which consists of 202 layers with high spatial shift in the spectral range from 1500 to 1570 nm, we theoretically calculate the E-field amplitude of the propagating wave as a function of the position in the structure. This dependence allows us to determine mechanisms of origin of high spatial dispersion. High spatial dispersion exists in this structure is due to a mixture of few dispersion effects. We also demonstrate that effect of wavelength-dependent amount of stored energy (resonance effect) exists not only in a half-wave layer but also in layers with thicknesses too much less than quarter-wave layer.

Key words: multilayer thin-film structure, spatial dispersion, spatial shift

тонкоплівкові структури, зокрема одновимірні фотонні кристали та структури з півхвильовим шаром можуть бути застосовані для отримання значно більшої просторової дисперсії [3-7]. Однак просторова дисперсія в таких структурах існує у вузьких діапазонах довжин хвиль на межах спектральних інтервалів з високим коефіцієнтом відбиття. Крім того, в даних діапазонах довжин хвиль існують значні втрати інтенсивності відбитого променя. Більш привабливими структурами з точки зору практичного застосування є структури з декількома резонаторами та чирповані дзеркала [7].

На практиці важливо конструювати тонкоплівкові структури, які відповідають певним характеристикам [8-10]. Так наприклад, для частотної селекції важливо мати структуру з високим просторовим зсувом який лінійно залежить від довжини хвилі. Бажано також досягти якомога більшого просторового розщеплення світла по довжинам хвиль в більш широкому спектральному діапазоні.

В багатьох випадках з практичної точки зору немає ніякої різниці, що відбувається з хвилею при проходженні крізь структуру [11,12]. Важливими є лише ті характеристики, які отримано на виході зі структури. Однак, розуміння процесів, які відбуваються всередині структури може відіграти значну роль при розробці нових структур із заданими характеристиками. Зокрема, за допомогою дослідження характеру проходження хвилі крізь структуру можна визначити механізми виникнення дисперсії

При заданих параметрах багатошарової структури (q – число шарів, n_r – показник заломлення, k_r – коефіцієнт екстинкції, d_r – товщина r -го шару, n_m і k_m – оптичні сталі підкладки, n_0 і k_0 – оптичні сталі зовнішнього середовища, θ_0 – кут падіння) легко розраховуються матричним методом [2] спектр відбивання $R(\lambda)$, зміна фази при відбиванні $\varphi(\lambda)$ та групову затримку GD :

$$R = \left(\frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right) \left(\frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right)^*, \quad (1)$$

$$\lg \varphi = \operatorname{Im} \left[\eta_0 (CB^* - BC^*) / (\eta_0^2 BB^* - CC^*) \right] \quad (2)$$

$$GD = -\frac{d\varphi}{d\omega} = \frac{\lambda^2}{2\pi c} \cdot \frac{d\varphi}{d\lambda}, \quad (3)$$

Просторове зміщення $s(\lambda)$ прямо-пропорційне величині групової затримки та груповій швидкості вздовж шарів v_g :

$$s = GD \cdot v_g. \quad (4)$$

Групову швидкість можна визначити згідно наближення ВКБ [13,14].

$$\frac{1}{v_g} = \left(\frac{\partial \beta}{\partial \omega} \right)_{\text{опт}} \bigg|_{K=\cos \theta} = \frac{\overline{n_{\text{eff}}^2}}{c \sin \theta}, \quad (5)$$

де

$$\overline{n_{\text{eff}}^2} = \frac{\sum_i \{ n_i^2 d_i / [n_i^2 - \sin^2 \theta]^{3/2} \}}{\sum_i \{ d_i / [n_i^2 - \sin^2 \theta]^{1/2} \}} \quad (6)$$

При цьому характеристична матриця ансамблю має вигляд

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left(\prod_{r=1}^q \begin{bmatrix} \cos \delta_r & (i \sin \delta_r) / \eta_r \\ i \eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix}, \quad (7)$$

де $\delta_r = (2\pi N_r d_r \cos \theta_r) / \lambda$, $\eta_{r,m} = \chi_{\text{vac}} N_{r,m} \cos \theta_{r,m}$ для ТЕ хвиль, $\eta_{r,m} = \chi_{\text{vac}} N_{r,m} / \cos \theta_{r,m}$ для ТМ хвиль, $\chi_{\text{vac}} = 2,6544 \cdot 10^{-3}$ сменс, λ – довжина хвилі, $N_r = n_r - ik_r$ – комплексний показник заломлення r -го шару, η_0 – провідність зовнішнього середовища, $c = 3 \cdot 10^8$ м/с – швидкість світла. Значення кутів θ_r визначається законом Снеліуса

$$N_0 \sin \theta_0 = N_r \sin \theta_r = N_m \sin \theta_m. \quad (8)$$

Також за допомогою матричного методу можна отримати співвідношення, які дають змогу визначити залежність амплітуди електричного поля від позиції в структурі. Таке співвідношення для межі поділу i -тої та $i+1$ шару має вигляд:

$$\begin{bmatrix} E_0 \\ H_0 \end{bmatrix} = \left(\prod_{r=1}^i \begin{bmatrix} \cos \delta_r & (i \sin \delta_r) / \eta_r \\ i \eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} E_i \\ H_i \end{bmatrix}, \quad (9)$$

де E_0 , H_0 – величини електричного та магнітного полів на межі поділу структури та зовнішнього середовища, E_i , H_i – величини електричного та магнітного полів на межі поділу i -тої та $i+1$ шару. Визначення поля E_i зводиться до розв'язування матричного рівняння. Для визначення величини електричного поля всередині i -тої плівки можна ввести уявну межу поділу, та записати для неї таке ж матричне співвідношення.

На рис.1 показано пошарову зміну оптичних товщин для структури, що складається з 202 шарів, утворених плівками Nb_2O_5 і SiO_2 , які чергуються. Перший шар межує з повітрям, останній з підкладкою з оптичного скла. Перший шар утворений плівкою оксиду ніобію. В усіх структурах оптичні товщини більшості шарів близькі $\lambda_0/4$ на довжині хвилі $\lambda_0 = 1550$ нм (рис.1). При цьому фізичні товщини шарів Nb_2O_5 порядку 182 нм, а шарів SiO_2 – 294 нм. Мінімальна товщина шару в структурі – 6.37 нм (18 шар). Також в структурі присутній шар з

оптичною товщиною близькою до $\lambda_0/2$. Це 68 шар товщиною 574,6 нм.

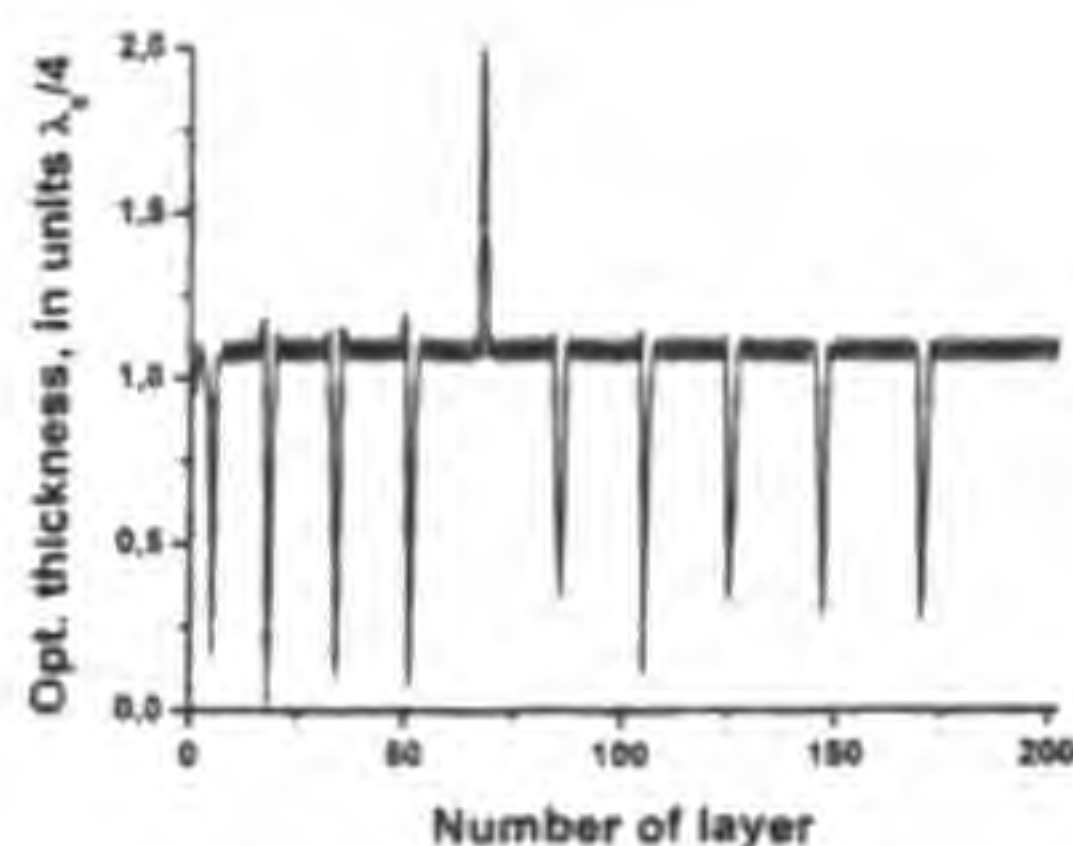


Рис.1. Залежність оптичної товщини від номеру шару для структури з 202 шарами.

При моделюванні спектральних характеристик багатошарових структур врахована дисперсія вибраних плівкових матеріалів: оксидів кремнію (SiO_2) і ніобію (Nb_2O_5). Для опису дисперсії матеріалів використовували формулу Коші. Показники заломлення SiO_2 визначали за формулою $n_1 = 1,46 + (3,35 \cdot 10^{-3}/\lambda^2) + (1,41 \cdot 10^{-5}/\lambda^4)$, а Nb_2O_5 за формулою $n_2 = 2,22 + (2,18 \cdot 10^{-2}/\lambda^2) + (4 \cdot 10^{-3}/\lambda^4)$, де λ - довжина хвилі в мкм. Врахована також дисперсія показника заломлення підкладки за формулою $n_3 = 1,50 + (5,33 \cdot 10^{-3}/\lambda^2) + (4,92 \cdot 10^{-4}/\lambda^4)$. Поглинання в шарах при розрахунку характеристик не враховувалось.

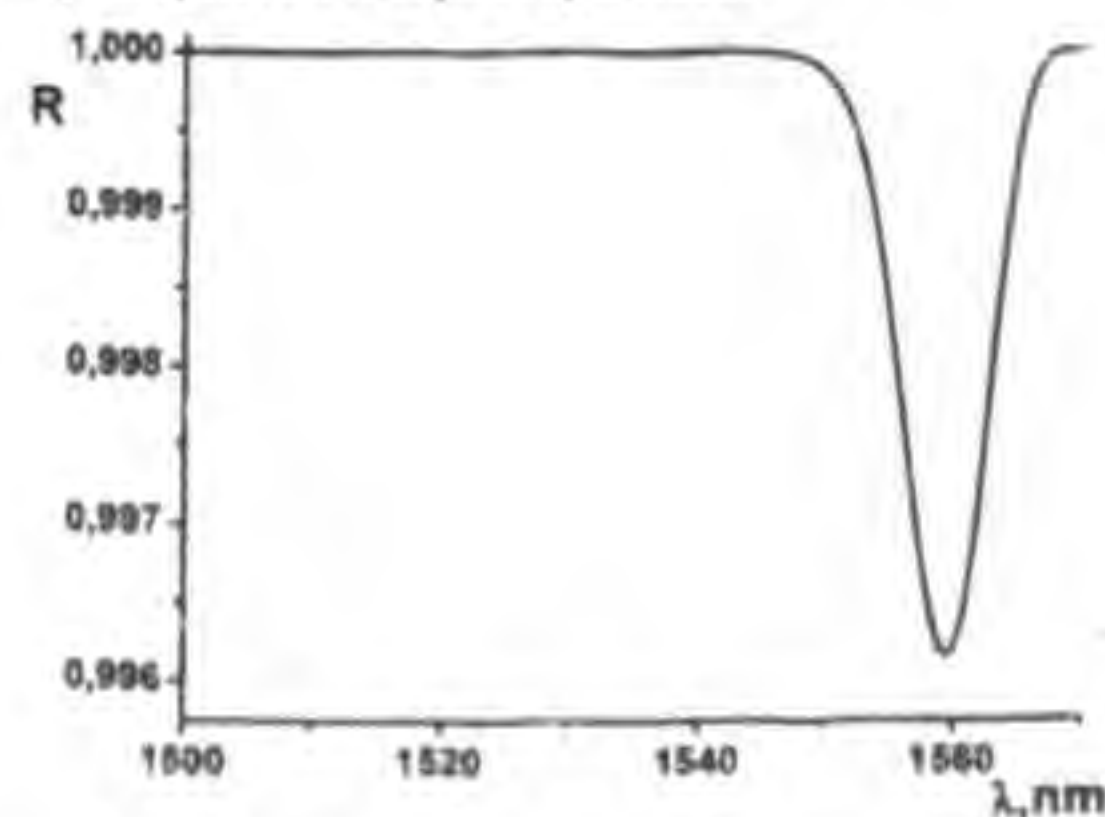


Рис.2. Залежність коефіцієнта відбиття від довжини хвилі.

Дана структура характеризується високим коефіцієнтом відбиття в спектральному діапазоні 1500-1570 нм (рис. 2). Розрахунки проводились

при куті падіння $\theta = 40^\circ$ для хвилі ТМ-поляризації (р-поляризації). В даному спектральному діапазоні побудовано залежність просторового зміщення від довжини хвилі (рис.3). Структура характеризується високою просторовою дисперсією.

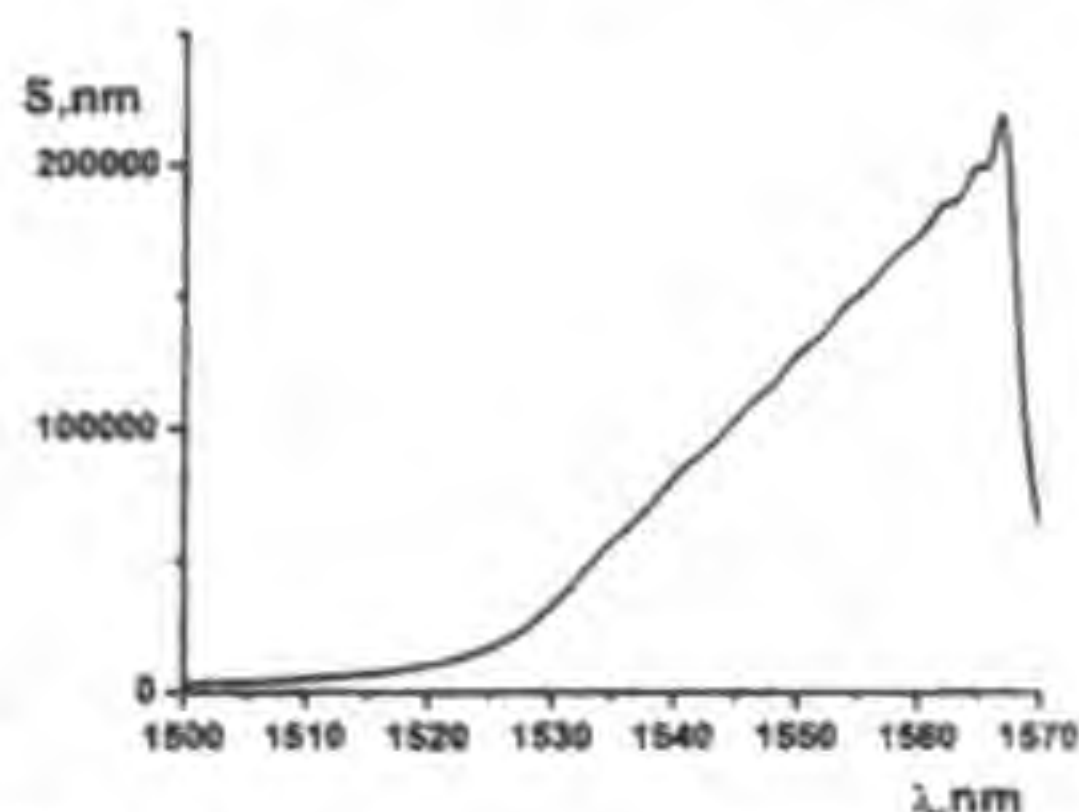


Рис.3. Залежність просторового зміщення від довжини хвилі.

Одним із механізмів є уповільнення і сильна залежність від довжини хвилі групової та фазової швидкості в періодичних структурах (одновимірних фотонних кристалах) на межі забороненої зони (спектрального інтервалу з високим коефіцієнтом відбиття) [11]. Також можливе виникнення високого просторового зміщення за рахунок залежної від довжини хвилі глибини проникнення поля в структуру, а також за рахунок накопичення енергії в структурі, що містить резонатори [8, 9]. Існують структури, в яких висока просторова дисперсія існує за рахунок комбінації вищезгаданих механізмів.

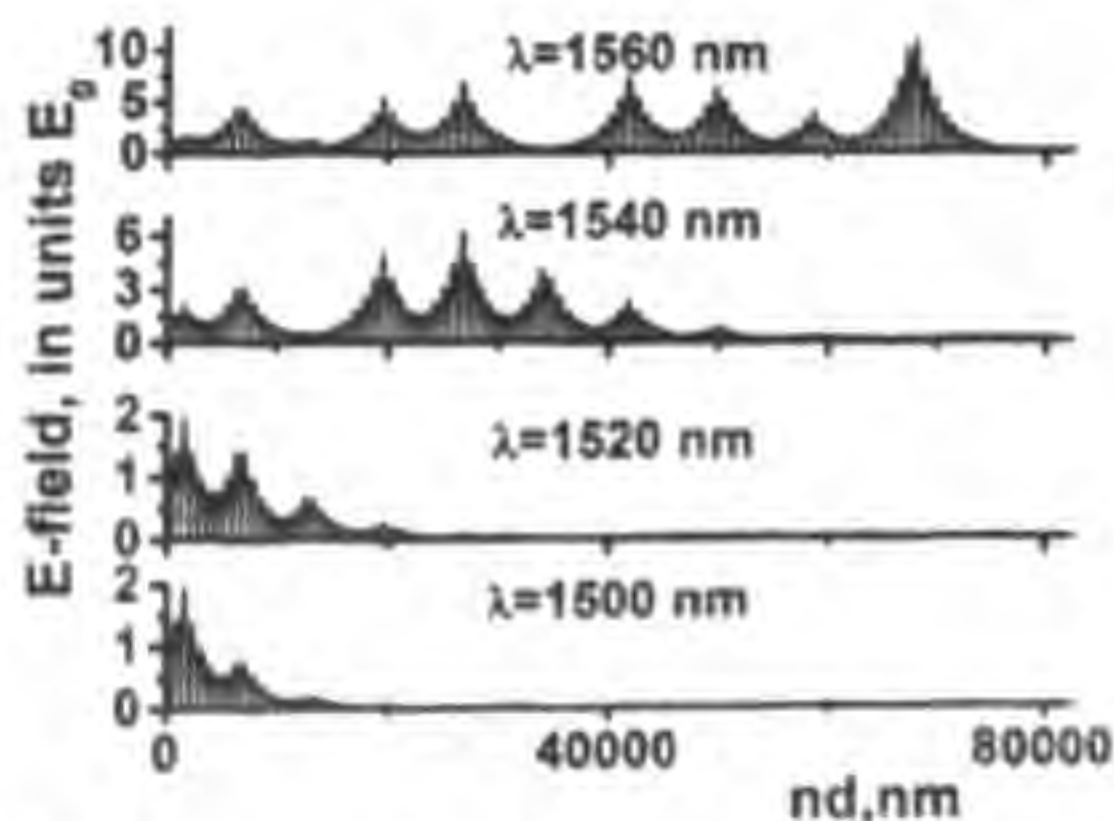


Рис.4. Залежності амплітуди електричного поля від позиції в структурі при різних довжинах хвиль.

Теоретично розрахована залежність амплітуди електричного поля дозволяє визначити, які механізми виникнення ефекту суперпризми задіяні в даній структурі. На рисунку 4 зображено залежності амплітуди електричного поля від глибини проникнення в структуру при чотирьох різних довжинах хвиль в спектральному діапазоні з високою просторовою дисперсією. Амплітуда електричного поля на рисунку вимірюється у відносних одиницях, за одиницю прийнято поле на межі поділу структури із зовнішнім середовищем.

З рисунку 4 видно, що при збільшенні довжини хвилі глибина проникнення поля в структуру збільшується. Це є один із механізмів виникнення дисперсії.

В структурі присутній всього один шар, товщина якого близька до півхвильового (68 шар). Присутність таких шарів в структурі, за рахунок багатократного відбиття хвилі на межах півхвильового шару, призводить до ефекту накопичення енергії електромагнітного поля в них (структури з резонатором). Амплітуда електричного поля в таких резонаторах збільшується і зазвичай перевищує амплітуду поля на межі поділу структури із зовнішнім середовищем. Ефект накопичення енергії

всередині структури призводить до виникнення просторової дисперсії.

Як видно з рисунку 4, амплітуда електричного поля при різних довжинах хвиль збільшується не тільки в шарі з товщиною близькою до півхвильової, але й у шарах які є значно тоншими за чвертьхвильові (рис.1). Ефект накопичення енергії в даному випадку відбувається за рахунок утворення резонаторів, що складаються з групи із трьох шарів з центральним тонким шаром. Характер розподілу поля в областях з тонкими шарами залежить від показника заломлення шарів, які суміжні з тонким шаром. Наявність резонаторів в структурі, які призводять до ефекту залежної від довжини хвилі величини накопиченої енергії, а також наявність ефекту залежної від довжини хвилі глибини проникнення поля в структуру і є причинами виникнення високого просторового зміщення.

Таким чином при подальшій розробці структур з високою просторовою дисперсією, яка виникає за рахунок резонансних ефектів в структурі, важливо враховувати те, що резонатори можуть утворюватись групами шарів, а не лише шарами з товщиною, кратною $\lambda/4$.

Список використаних джерел

1. Born M., Wolf E. Principles of Optics. – Oxford: Pergamon Press, 1984. – P. 173-175.
2. MacLeod H.A. Thin-Film Optical Filters. - Philadelphia: Inst. Phys. Publish., Pa., 2001. – P. 645.
3. Joannopoulos J.D., Meade R.D. and Winn J.N. Photonic Crystals – Princeton: Princeton University Press, 1995. – P. 133-150.
4. Sakoda K. Optical Properties of Photonic Crystals. – Berlin: Springer, Heidelberg, 2001. – P. 75-103.
5. Busch K., Lolkes S., Wehspohn R.B., Foll N. (ed.) Photonic crystals - New York: Willey, 2004. – P. 241-247.
6. Zengerle R. Light propagation in singly and doubly periodic planar waveguides // J. Mod. Opt. – 1987. – 34, P. 1589-1617.
7. Pervak Yu.O., Onishchuk V.M. and Pervak V.Yu. Features of the super prism effect in multilayer dielectric coatings // SPQEO. – 2008. – V.11, № 4. – P. 345-351.
8. Matuschek N., Kärtner F.X., Keller U. Analytical design of double-chirped mirrors with custom-tailored dispersion characteristic. // IEEE J. Quantum Electron. – 1999. – 35, P. 129-137.
9. Gerken M. and Miller D.A.B. Multilayer thin-film structures with high spatial dispersion // Appl. Opt. – 2003. – 42, P.1330-1345.
10. Momeni B., Adibi A. Optimization of photonic crystal demultiplexers based on the superprism effect// Appl. Phys. – 2003. – B77, P. 555-560.
11. Dowling J.P. and Bowden C.M. Anomalous index of refraction in photonic bandgap materials // J. Mod. Opt. – 1994. – 41, P. 345-351.
12. Lin S.-Y., Hietala V.M., Wang L., Jones E.D. Highly dispersive photonic band-gap prism, // Opt. Lett. – 1996. – 21, P. 1771-1773.
13. Matuschek N., Kärtner F.X., Keller U. Exact coupled-mode theories for multilayer interference coatings with arbitrary strong index modulations // IEEE J. Quantum Electron. – 1997. – 33, P. 295-302.
14. Sumetsky M., Eggleton B.J., de Sterke C.M. Theory of Group Delay ripple generated by chirped fiber gratings // Opt. Express. – 2002. – 10, P.332-340.

Надійшла до редколегії 08.09.09

УДК 544.023.26.544.5:546.28

Ткаченко А.В., асистент, Ананьїна О.Ю., канд
ф-м наук, доц., Мікаелян Г.Р. викладач.

Теоретичне дослідження взаємодії атомів фосфору з поверхнею $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$

У даній роботі представлені результати
квантово-хімічного моделювання адсорбції
атомів фосфору на поверхні $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$.
Отримані енергетичні характеристики
адсорбції. Розраховані геометричні та
електронні характеристики поверхні
 $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ з впровадженими атомами
фосфору.

Ключові слова: кластер, МНДП, вакансійний
дефект, SiO_2/Si .

*E-mail: avt@mail.zp.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Вступ

У дослідженні структур SiO_2/Si велику увагу
приділяють шару SiO_2 , безпосередньо
прилягаючому до поверхні кремнію, який є
власне перехідним між кремнієм та SiO_2 .
Великий інтерес до такого перехідного шару
обумовлений важливою роллю, яку він відіграє в
електронних процесах, які протікають у
структурах SiO_2/Si .

Численні дослідження перехідного шару на
границі SiO_2/Si , виконані з допомогою різних
методів [1,2], показали, що шар SiO_2 з
порушеною стехіометрією, яка характеризується
складом SiO_x ($x < 2$), відстоїть в середньому не
більш ніж на декілька нанометрів від поверхні
кремнію.

Границя $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ відіграє важливу роль у
роботі багатьох напівпровідникових приладів, а
фосфор є одним з основних легуючих елементів,
використовуваних у кремнієвих технологіях.
Дані експериментальних [3] і теоретичних
досліджень [4] говорять про те, що типові
легуючі домішки здатні впроваджуватися в
приповерхні шари окисної плівки і заміщувати
атоми кремнію чи кисню в залежності від
навантаження чи відсутності точкових дефектів.

Метою даної роботи є дослідження
електронних та геометричних параметрів станів
вакансійних дефектів та дефектів у вигляді
впроваджених атомів фосфору в окисній плівці
 $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$.

У даній роботі поверхня $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$

A.V. Tkachenko, assist, O.Y. Ananina, Ph.D, as.
prof, G.R. Mikaelyan assist.

Theoretical study of phosphorus atoms adsorption on the $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ surface

Results of quantum-chemical calculations of
phosphorus atoms adsorption on the $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$
surface are presented in the work. The energy
characteristics of adsorption process were
estimated. Geometrical and electronic
characteristics of structures which phosphorus
atoms form during adsorption at the $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$
surface were calculated.

Key Words: cluster, MNDO, vacancy defects,
 SiO_2/Si .

моделювалася за допомогою кластеру $\text{Si}_{41}\text{O}_{31}\text{H}_{50}$,
що містить чотири атомних шари кремнію і
моношар оксиду кремнію, у яких відсутні точкові
дефекти. На рисунку 1 показаний кластер
 $\text{Si}_{41}\text{O}_{31}\text{H}_{50}$, що моделює поверхню $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ зі
„смутистим” порядком розташування місткових
атомів кисню, на якому проводилося
моделювання та дослідження електронної та
геометричної структури поверхні $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$ з
адсорбованим атомом фосфору (P).

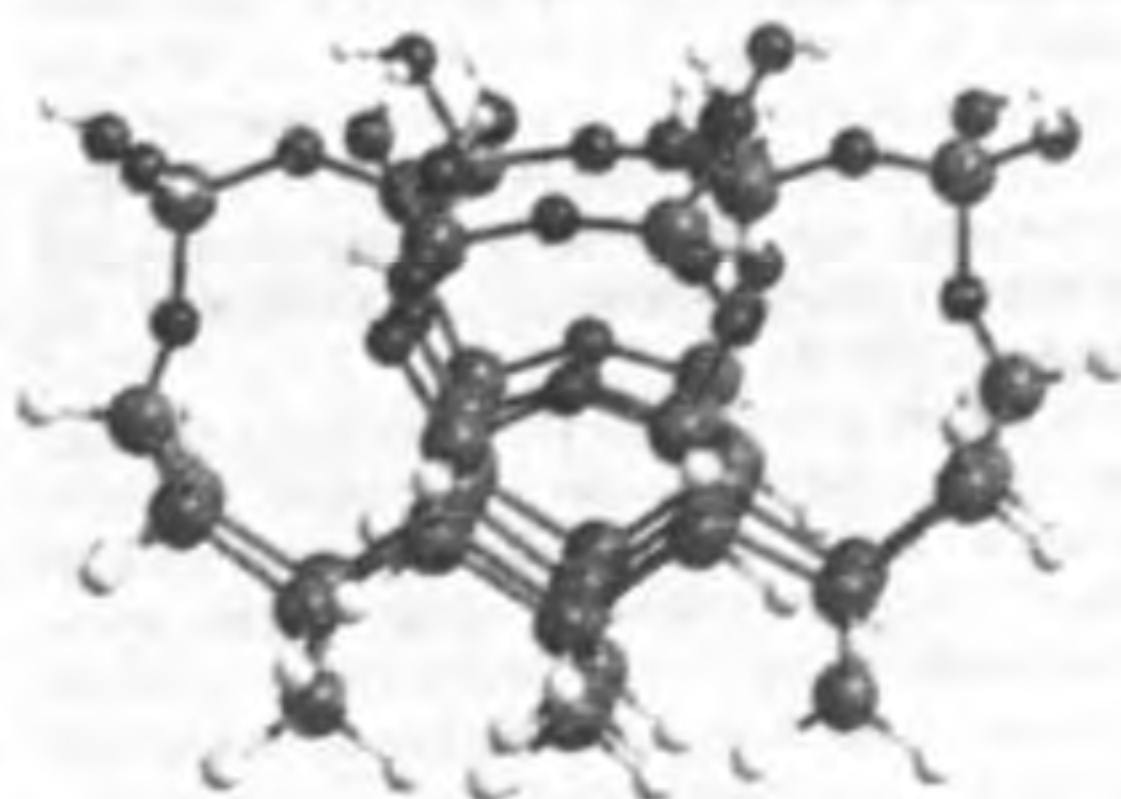


Рис.1 Кластер $\text{Si}_{41}\text{O}_{31}\text{H}_{50}$

● – атоми кисню, ● – атоми кремнію, L – атоми
водню

Кластер, що моделює поверхню $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$
не містить обірваних кремнієвих і кисневих
зв'язків. Обірвані зв'язки атомів кремнію, що

ідуть в об'єм, насичені атомами водню (модель одновалентних псевдоатомів). Так як вільні поверхні оксидів завжди гідратовані, то атоми кисню в кластері, що виходять на поверхню, насичувалися атомами водню.

При проведенні досліджень був використаний напівемпіричний метод квантово-хімічного моделювання МНДП (модифіковане нехтування диференціальним перекриттям, MNDO), в основі якого лежить розв'язання рівняння Шредингера для кластера в наближенні Хартрі-Фока.

Розглянемо структуру Si - O - Si зв'язків, представлених атомами Si72, Si73 і O81 (рис.2).



Рис.2 Фрагмент кластеру $\text{Si}_{41}\text{O}_{31}\text{H}_{50}$

Атом кисню O81 утворює два зв'язки з атомами кремнію Si73 та Si72 і є містковим атомом в кластері. В утворенні цих зв'язків беруть участь його дві низькоенергетичні гібридні орбіталі sp^2 -типу (s -складова 43%, 43%, відповідно). Ще дві незв'язуючі орбіталі (одна sp^2 -типу і одна p -орбіталь) локалізовані на самому атомі O81.

У цілому весь розглянутий кластер є іонним, про що свідчать заряди на атомах кремнію кожного шару. Це обумовлено присутністю атомів кисню, кожен з яких «перетягує» електронну хмару від найближчих атомів кремнію. У такий спосіб моношар атомів кисню поляризує весь кластер. Однак, порівнюючи заряди на атомах кремнію другого й четвертого шарів ($\approx 2e$ та $1,7e$ відповідно), можна припустити, що вплив атомів кисню на зарядову густину і гібридизацію орбіталей атомів кремнію зменшується в міру просування від оксиду в глиб підкладки.

Моделювання вакансійних дефектів в окисній плівці

В роботі було проведено моделювання вакансійних дефектів в окисній плівці. Моделювання вакансій здійснювалося шляхом усунення атому кисню чи кремнію із кластеру. В залежності від положення атому кисню чи кремнію в плівці, були одержані декілька станів системи (кластера) з O та Si-вакансіями.

При утворенні вакансій у кластері, що моделює поверхню SiO_2/Si (100), розрахунок станів системи (знаходження мінімуму повної енергії) проводився із застосуванням обчислень оптимізації геометрії і координати реакції.

При усуненні місткових атомів кисню O81, O87 та O134 (рис. 3 а,б,с), були одержані стани системи з кисневими вакансією, в яких атоми кремнію Si72-Si73, Si72-Si93 та Si93-Si131, утворюють зв'язки між собою.

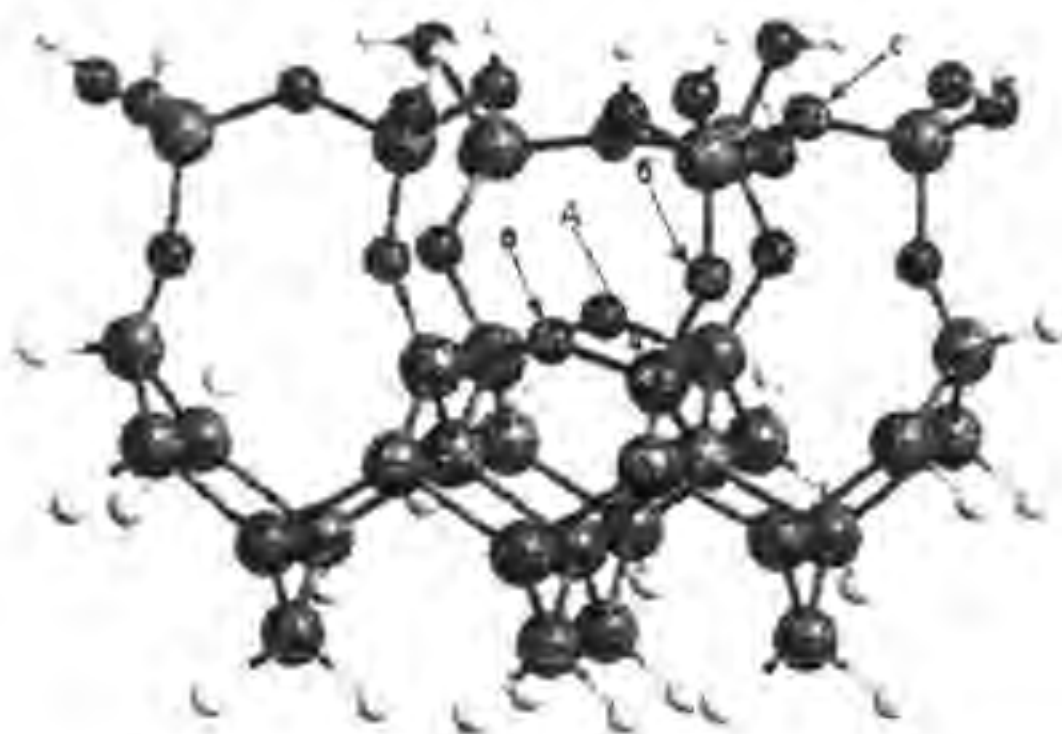


Рис.3 Фрагмент кластеру $\text{Si}_{41}\text{O}_{31}\text{H}_{50}$ в якому моделюється утворення O-вакансій

Усунення атому кремнію Si72 (рис.3д) призвело до стану в якому ніяких зв'язків між атомами кисню та кремнію (O87, O81, Si24, Si25), шару окислу не утворюється. Утворення хімічного зв'язку між даними атомами, які оточуюють Si-вакансію потребує значних змін їх положення, що призвело б до підвищення повної енергії системи, тощо. Відповідно атоми O81, O87, Si24 і Si25 мають ненасичені обірвані зв'язки, їх можна вважати потенційними адсорбційними центрами.

Взаємодія атомів фосфору з поверхнею розділу $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$

Квантово-хімічне дослідження взаємодії атомів фосфору з кластером $\text{Si}_{41}\text{O}_{31}\text{H}_{50}$, що моделює поверхню розділу $\text{SiO}_2/\text{Si}(100)$,

полягало в розрахунках станів системи „кластер - фосфор” з розташуванням фосфору в кисневих та кремнієвих вакансіях.

Розглянемо стан (стан А), в якому фосфор знаходиться в кисневій вакансії, тобто заміщує містковий атом кисню. Утворюється структура Si - P - Si на межі розділу SiO₂/Si(100) (рис. 4.а), де фосфор утворює два хімічні зв'язки з атомами кремнію Si72 та Si73.

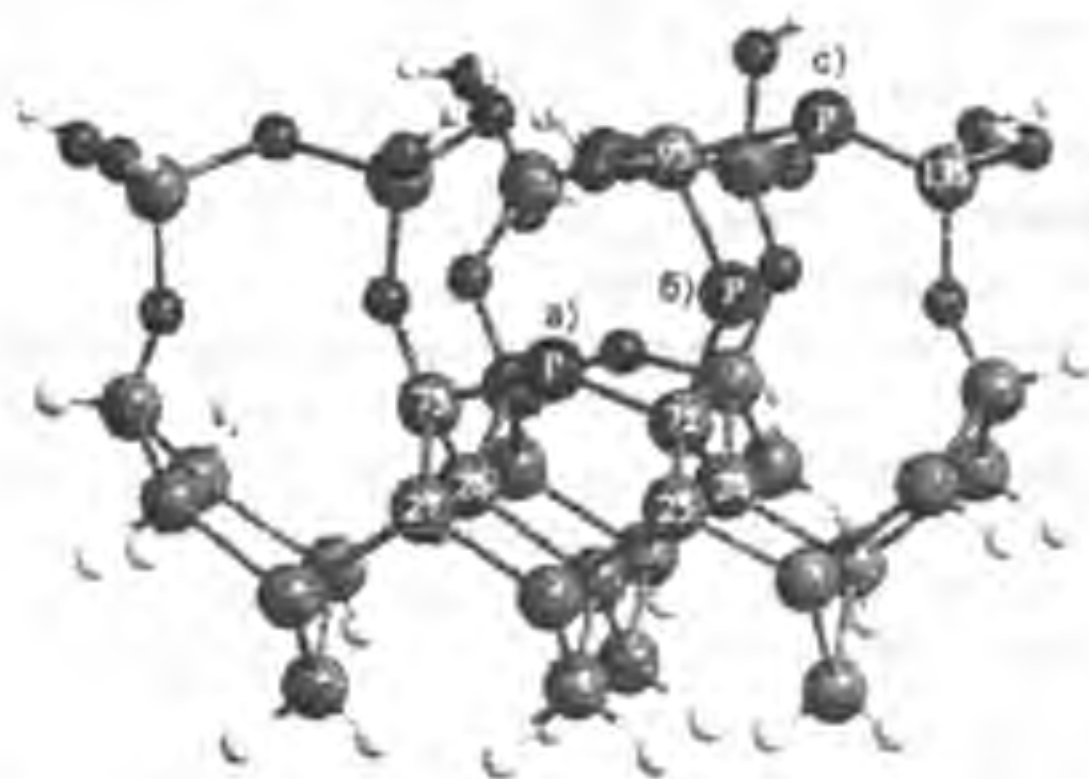


Рис.4 Ділянка кластеру, в якій фосфор знаходиться в кисневих вакансіях (а, б, в)

На фосфорі накопичується значний негативний заряд $-1,45e$. Він проявляє валентність 2,2. На сусідніх атомах Si72 та Si73 накопичується значний позитивний заряд: $+2,24e$ та $+2,30e$. Порядок зв'язків фосфор-кремній становить 0,58 і 0,60, довжина зв'язків дорівнює 1,91 Å. Гібридизація орбіталей атому фосфору, що приймає участь в утворенні зв'язків з атомами кремнію Si73 та Si72, близька до sp^3 -типу. Порівняння розподілу заряду між атомами кремнію першого шару підкладки показують, що атоми кремнію, які зв'язані з фосфором, набувають меншого позитивного заряду в порівнянні з атомами кремнію, що зв'язані з атомами кисню.

При заміщенні фосфором кисню O87 утворюється стан Б, показаний на рис. 4.б. В цьому стані фосфор утворює 2 валентні зв'язки з атомами кремнію (Si93, Si72), на яких накопичується значний позитивний заряд: $+1,94e$, $+2,32e$. На фосфорі накопичується негативний заряд $-1,89e$. Відстань між атомами P-Si72 та P-Si93 становить близько двох ангстрем: 1,90 Å, 1,89 Å. Порядок зв'язку між атомом фосфору та атомами кремнію (P-Si72, P-Si73) – 0,66, і 0,82, відповідно. Це вказує на досить міцні зв'язки між даними атомами. В утворенні зв'язків P із атомами Si93 та Si72

приймали участь гібридні атомні орбіталі, s-складова орбіта лей атому фосфору становить 39%, 50%, а атомів кремнію Si93, Si72 – 64%, 55%, відповідно.

При заміщенні атомом фосфору місткового атому кисню O134 у верхньому шарі окислу можна спостерігати стан С, зображений на рисунку 4.в. В даному стані атом фосфору зв'язує атоми кремнію Si93 та Si131 верхнього шару окислу. На цих атомах накопичується позитивний заряд $+1,88e$, $+1,90e$, відповідно, а на атомі фосфору – негативний заряд $-1,75e$. Порядок зв'язку між атомом фосфору та атомами Si93, Si131 становить 0,74 і 0,88, а міжатомна відстань – 1,91 Å і 1,81 Å, відповідно. Орбіталі атому фосфору, що приймають участь в утворенні зв'язків із атомами Si93, Si131 мають s-складову ~27%, гібридизація цих орбіталей близька до sp^3 -типу.

В кожному з розглянутих станів зосередження негативного заряду на фосфорі пов'язане з тим, що атом P перетягує електронну хмару з атомів Si, так як він являється більш електронегативним (2,1 проти 1,8 у кремнію по Полінгу). Відомо, що атом фосфору має 5 валентних електронів і при впровадженні в кремній поводить себе, як донорна домішка, але при впровадженні його в кисневі вакансії шару окислу SiO₂/Si(100) спостерігається не типовий для фосфору електронний стан. Для розглянутих станів фосфору (рис. 4.а,б,в), впровадженого в кисневі вакансії, на ньому накопичується від'ємний заряд, він утворює тільки 2 зв'язки із атомами кремнію. Саме тим, що фосфор утворює 2 ковалентні зв'язки з атомами кремнію і можна пояснити значний перерозподіл заряду в структурі Si - P - Si. На фосфорі локалізовані ще дві незв'язуючі молекулярні орбіталі, на яких знаходяться 4 електрони (перетягуються від атомів кремнію). Саме цим пояснюється від'ємний заряд фосфору в структурі Si - P - Si на межі розділу SiO₂/Si(100).

При заміщенні кремнієвої вакансії атомом фосфору першого шару підкладки був отриманий стан Д, зображений на рисунку 5.

В даному стані атом фосфору зв'язує два атоми кремнію другого шару підкладки (Si24, Si25) та два атоми кисню шару окислу (O87, O81), один з яких являється містковим атомом (O81). На атомах Si24, Si25 накопичується значний негативний заряд $-2,08e$, $-2,09e$, відповідно, на атомах O81, O87 – від'ємний заряд $-0,82e$, а на атомі P $+1,33e$. В даному випадку вже більш електронегативний кисень перетягує

електронну хмару і з атома Р. Між даними атомами утворюється ковалентний полярний тип хімічного зв'язку «фосфор-кремній-кисень».

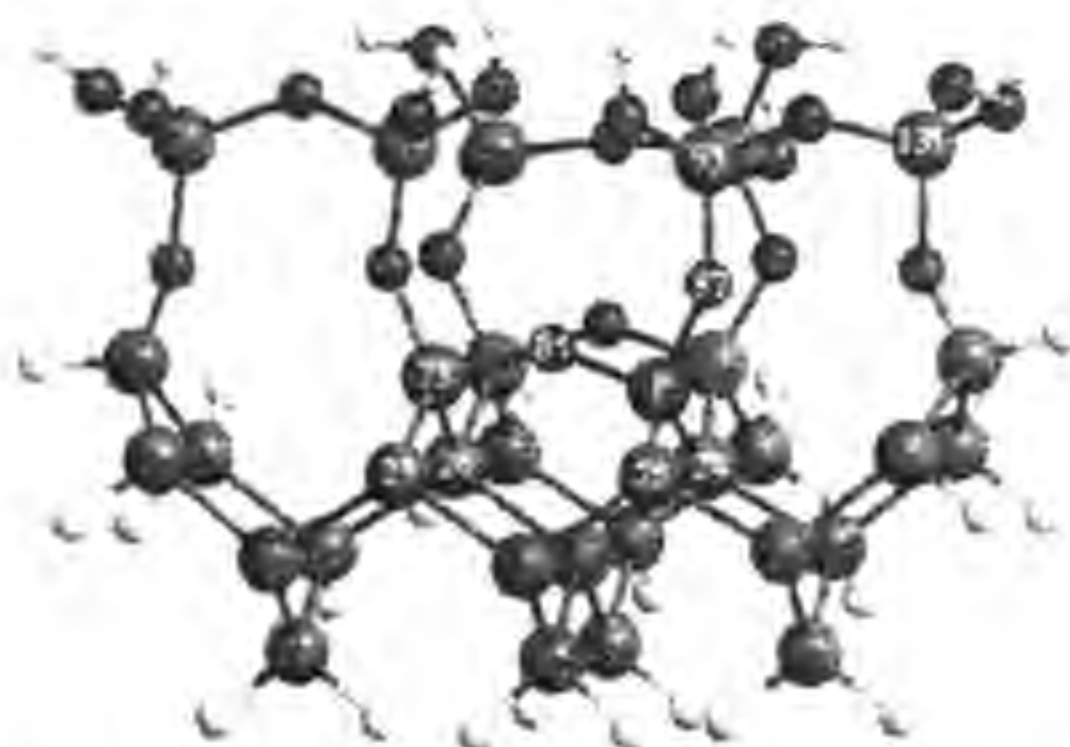


Рис. 5 Фрагмент кластеру із впровадженням атомом фосфору в кремнієву вакансію

Порядок зв'язків між атомами Р та Si24, Si25 становить 0,49, 0,48 відповідно, а між Р та O81, O87 – 0,84. Відстань між атомами Р та Si24, Si25 трохи більше двох ангстрем (2,13 Å, 2,08 Å), а між атомами Р та O81, O87 складає 1,58 Å. Гібридні молекулярні орбіталі атому фосфору, що приймають участь в утворенні зв'язків із атомами Si24, Si25, O81 та O87 мають s-складові 52%, 66% (зв'язки із атомами Si) та 17–18% (зв'язки із атомами кисню).

Після моделювання впровадження атомів фосфору в кластер та проведення розрахунків, оптимізації геометрії була отримана повна енергія кожного стану системи. І для узагальнення результатів побудована діаграма різниць енергій кожного з розглянутих станів, яка представлена на рисунку 6.

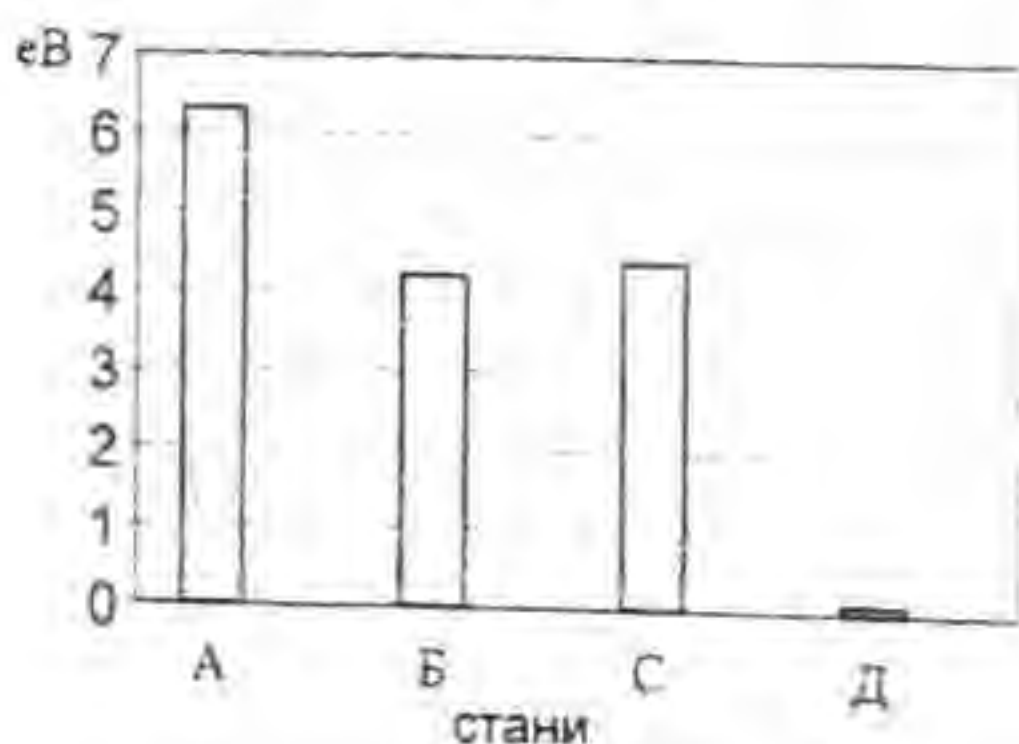


Рис. 6 Діаграма значень різниць повної енергії кластера з впровадженням атомом фосфору

З діаграми видно, що енергія стану Д відповідає мінімуму повної енергії системи, що свідчить про отримання більш стабільного стану системи «поверхня - фосфор».

Висновки

1. Поява кисневих вакансій в шарі окислу може призводити до утворення зв'язків між атомами кремнію, що значно знижує повну енергію системи ($\sim 2,8$ eV).
2. Наявність кремнієвих вакансій в шарі окислу не призводить до утворення зв'язків між атомами оточення, які стають потенційними адсорбційними центрами.
3. Моделювання процесів взаємодії атомів фосфору з кластером показало, що адсорбованому атому фосфору енергетично більш вигідно знаходитись в кремнієвих вакансіях. Різниця повної енергії системи між положенням атому фосфору в О-вакансії та Si-вакансії становить $\sim 4-6$ eV.

Список використаних джерел

1. Sugano T. Physical and chemical properties of SiO_2/Si transition region // Surf. Sci. – 1980. 98, N 1-3.
2. Sugano T., Chen J., Hamano T. Morphology of SiO_2/Si interface // Surf. Sci. – 1980. 98, N 1-3.
3. Morgan A.M., Chen T.-Y.J., Reed D.A., Baker J.E. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1984. 2/3. P. 1266-1271.
4. Furuhashi M., Hirose T., Tsuji H., Tachi M. // IEICE Electronics Express, 2004. 1/6. P. 126-130.

Надійшла до редколегії 18.06.2009

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 532.536

Абдікарімов Б.Ж., кандидат фіз.-мат. наук
Альошин О.Д., доктор фіз.-мат. наук, професор
Неділько С.Г., доктор фіз.-мат. наук, професор
Остапченко С.Г., асистент
Поперенко Л.В., доктор фіз.-мат. наук, професор

**Коефіцієнт дифузії та радіус кореляції
розчину ізомасляна кислота - важка вода у
критичному стані**

В роботі методом кореляційної спектроскопії
проведені експериментальні дослідження
температурної залежності напівширини
центральної спектральної лінії розсіяного світла
поблизу критичної температури розшарування
розчину ізомасляна кислота-важка вода. За цими
даними на основі теорії динамічного скейлінгу
розраховані температурні залежності
коефіцієнту дифузії і радіуса кореляції
дослідженого розчину.

Ключові слова: критична точка, коефіцієнт
дифузії, кореляційна спектроскопія

* E-mail: alekhin@univ.kiev.ua

На даний час дослідження кінетичних
властивостей рідин поблизу критичної точки
(КТ) залишається актуальною задачею фізики
конденсованого стану речовини [1,2]. Згідно
флуктуаційної теорії фазових переходів (ФТФП)
[1] речовина поблизу КТ являє собою дисперсну
нанофлуктуаційну систему, розмір елементів якої
визначається радіусом кореляції системи $R_c = r_0 [(T - T_c)/T_c]^{-\nu}$. (T_c – критична температура
речовини). У флуктуаційній області температур
 $t_c \leq 10^{-2} + 10^{-3}$ [1,2] цей параметр нано
флуктуаційних систем змінюється в межах
величин $R_c(t_c) = (10+100)$ нм. Відповідно до
динамічної теорії критичних явищ [3] ця важлива
характеристика системи поблизу КТ визначає її
кінетичні властивості, зокрема коефіцієнт дифузії
речовини: $D(t) \sim R_c^{-1}(t)$.

Дана робота присвячена дослідженню
кореляційних і кінетичних властивостей
подвійного розчину ізомасляна кислота - важка
вода поблизу критичної температури
розшарування. При дослідженні цих
характеристик даного розчину були використані
природні флуктуаційні процеси, які
відбуваються в рідинах поблизу КТ.

UDK 532.536

Abdikarimov B.Zh., Ph.D.
Alekhin O.D., Dr. of Sci., Prof.
Nedilko S.G., Dr. of Sci., Prof.
Ostapchenko S.G., assistant
Poperenko L.V. Dr. of Sci., Prof.

**Diffusion coefficient and correlation length of
solution isobutric acid - heavy water at the
critical state**

The experimental investigation of the temperature
dependence of the half-width of the central spectral
line of scattered light near the critical temperature of
the stratification for isobutyric acid - heavy water
solution have been carried out in paper by the
method of correlation spectroscopy. The temperature
dependences of the diffusion coefficient and the
correlation length of the investigated solution have
been calculated according to these data on the basis
of the theory of dynamic scaling.

Keywords: critical point, diffusion coefficient,
correlation spectroscopy

Ефективним методом дослідження цих
процесів є молекулярне розсіяння світла [4].
Розширення центральної спектральної лінії $\Gamma(t)$
при розсіюванні монохроматичного світла
однозначно пов'язане з коефіцієнтом дифузії
речовини $D(t) = q^{-2} \Gamma(t) = \left(\frac{4\pi}{\lambda} \cdot \sin \frac{\varphi}{2} \right)^{-2} \Gamma(t)$. При
наближенні до КТ, згідно ФТФП [1] радіус
кореляції $R_c(t) \rightarrow \infty$. Тому коефіцієнт дифузії
 $D(t) \sim R_c(t)^{-1}$ [3] і напівширина
 $\Gamma(t) \sim D(t) \sim R_c(t)^{-1}$ центральної компоненти
розсіяного світла прямують до нуля. У цих
умовах надійним способом вимірювання малих
величин $\Gamma(t)$ є метод кореляційної спектроскопії
[5], що дозволяє визначити коефіцієнт дифузії
речовини поблизу КТ в інтервалі величин
 $D = (10^{-3} + 10^{-9}) \text{ cm}^2/\text{s}$.

Експеримент проводився наступним чином.
Досліджуваний розчин критичної концентрації
 $x_{ac} = 0,393$ заливався в циліндричну оптичну
комірку діаметром $d = 7 \text{ mm}$ і висотою $h = 15 \text{ mm}$, що
знаходилась в рідинному термостаті й
термостатувалась із точністю $0,05 \text{ K}$. Спочатку
розчин на протязі години нагрівався від

кімнатної температури до температури $T=60^{\circ}\text{C}$, що на 11°C перевищувала критичну температуру розчину $T_k=322,2\text{ K}$.

На наступному етапі розчин охолоджувався до температур, які близькі до критичної ($\Delta T=(T-T_k) \leq 1\text{ K}$). Кожний режим при цьому термостатировався доти, поки система не ставала рівноважною. У процесі термостатування через кожні 5-10 хвилин проводилися вимірювання напівширини лінії розсіяного світла $\Gamma(t)$ і, відповідно, коефіцієнта дифузії $D(t)$. За час встановлення рівноваги приймався такий проміжок часу, після якого величина $D(t)$ у межах похибок експерименту не змінювалась.

Результати проведених досліджень $D(t)$ показані на рис. 1.

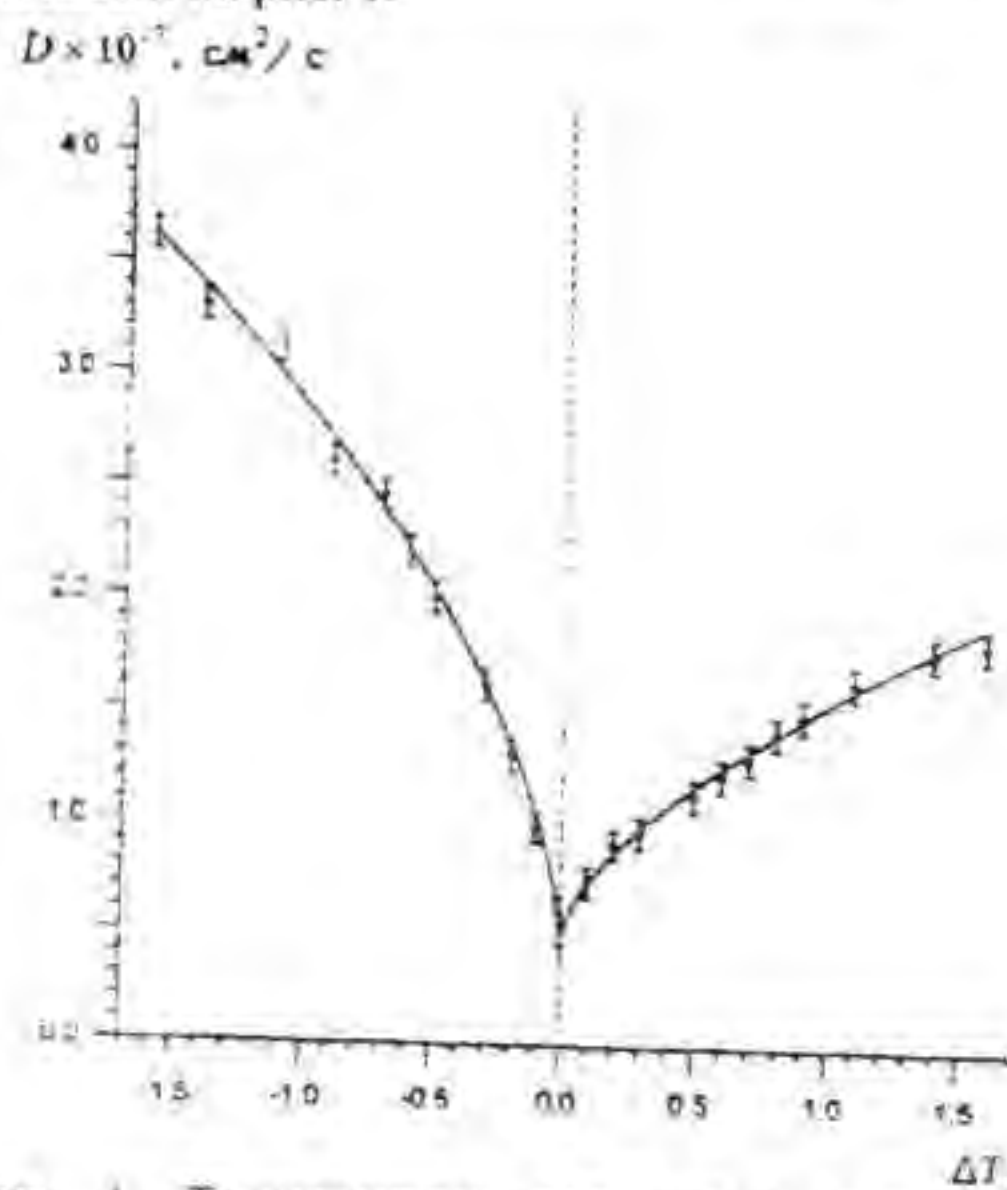


Рис. 1 Температурні залежності коефіцієнта дифузії розчину ізомасляна кислота – важка вода уздовж термодинамічних напрямків: критичної ізохори ($T>T_k$), межі поділу фаз ($T<T_k$).

Із цього рисунка видно, що величина коефіцієнта дифузії при наближенні до критичної температури уздовж термодинамічних напрямків критичної ізохори ($T>T_k$) або уздовж межі поділу фаз ($T<T_k$) зменшується до деякого постійного значення D_k . Цей результат підтверджує формулу Феррелла [5,6], отриману в рамках теорії зв'язаних мод Кавасакі [7].

$$D = \frac{k_B T_k}{16\eta_e \phi} \left(q^2 + R_c^{-2} \right)^{1/2} \quad (1)$$

З (1) слідує, що при $T \rightarrow T_k$ ($R_c^{-1} \rightarrow 0$) коефіцієнт дифузії прямує до скінченної величини

$$D \rightarrow D_k = \frac{k_B T_k}{16\eta_e \phi} q = \text{const.} \quad \text{Тут } \eta_e \phi -$$

ефективна в'язкість системи поблизу КТ.

Виходячи з (1), радіус кореляції речовини [1] можна представити у вигляді

$$R_c = r_0 t^{-\nu} = \frac{k_B T_k}{16\eta_e \phi} (D^2 - D_k^2)^{-1/2} \quad (2)$$

Тоді на підставі (2) і ФТФП [1], знаходимо температурну залежність флуктуаційної частини коефіцієнта дифузії (рис. 1.)

$$(D^2 - D_k^2)^{1/2} = \frac{k_B T_k}{16\eta_e \phi r_0} t^{\nu} = D_0 \cdot t^{\nu} \quad (3)$$

За допомогою отриманих експериментальних даних (рис. 1.) були визначені амплітуди коефіцієнта дифузії D_0 і радіуса кореляції r_0 досліджуваного розчину ізомасляна кислота – важка вода відповідно вздовж критичної ізохори ($T>T_k$) і межі поділу фаз ($T<T_k$): $D_{01}(T>T_k)=4,33 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{c}$; $D_{02}(T<T_k)=10,6 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{c}$; $r_{01}(T>T_k)=(0,62 \pm 0,04) \text{ nm}$; $r_{02}(T<T_k)=(0,29 \pm 0,03) \text{ nm}$.

- [1] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – 2-е изд., перераб. – Москва: Наука, 1982.
- [2] Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. Москва: Наука, 1987.
- [3] L. Kadanoff, J. Swift //Phys. Rev. 1968 . 166. P. 89
- [4] Фабелинский И.Л. Молекулярное рассеяние света. / М. Наука. 1965. – 512.
- [5] Спектроскопия оптического смешения и корреляция фотонов. Под ред. Г. Камминса и Э. Найка-Москва.: Мир, 1978.
- [6] R.A. Fertell, Phys. Rev. Lett. 1970, V 24, P.1169.
- [7] K. Kawasaki //Phys. Rev. 1970 A 1. P. 1750.

Надійшла до редколегії 15.09.2009

УДК 532

Адаменко І.І., доктор фіз.-мат. наук., професор,
Григор'єв А.М., канд. фіз.-мат. наук.,
Кузовков Ю.Г., канд. фіз.-мат. наук., ст. наук. сп.
Мироненко О.К., студент

Вплив форми молекули на теплофізичні властивості рідин. I. Пружні характеристики.

Методом Монте-Карло для модельних систем двохатомних гомоподібних молекул з різними факторами несферичності розраховані адіабатичний та ізотермічний модулі пружності в широкому інтервалі приведених густин та тисків. Встановлено, що несферичність молекул практично не впливає на баричну залежність модулів пружності.

Ключові слова: адіабатичний та ізотермічний модулі пружності, несферичність молекули.

*E-mail: agrigoriev@univ.kiev.ua

Мета роботи – з'ясування впливу форми молекули на теплофізичні властивості рідин. У першій частині статті будуть розглянуті пружні характеристики. Як було показано в публікаціях [1-3], пружні властивості рідин визначаються переважно відштовхувальною частиною потенціалу міжмолекулярної взаємодії. Тому такі дослідження доцільно починати, зосередившись на потенціалі сил відштовхування. В якості фізичної моделі нами була обрана система двохатомних молекул, атоми яких взаємодіють з атомами інших молекул за допомогою потенціалу м'яких сфер.

Методом Монте-Карло були розраховані адіабатичний та ізотермічний модулі пружності, ізохорична та ізобарична теплоємності, коефіцієнт теплового розширення системи двохатомних молекул різного ступеня несферичності в наближенні атом-атомної схеми.

Необхідно звернути увагу на загальну характеристику проведених раніше досліджень теплофізичних властивостей молекулярних рідин методом Монте-Карло. При визначенні пружних властивостей звичай розраховують тиск і фактор стиснення. У той самий час розрахунок таких характеристик, як модулі пружності є скоріш виключенням, ніж правилом. Але ці характеристики, наприклад адіабатичний модуль пружності, експериментально визначаються з високою точністю, і є дуже зручними для

I.I. Adamenko, professor
A.N. Grigoriev,
Yu.I. Kuzovkov
O.K. Myronenko

Molecular shape and thermophysical properties of liquids. I. Elastic properties.

Isothermal and adiabatic elasticity moduli of soft dumb-bell fluids were determined in Monte-Carlo simulations in a wide range of reduced densities and pressures. It was shown that molecular nonsphericity did not affect the pressure dependence of elastic moduli.

Key Words: isothermal and adiabatic elasticity moduli, molecular nonsphericity.

порівняння результатів фізичного та комп'ютерного експерименту, з подальшим уточненням параметрів обраної моделі.

У вибраній системі двохатомних молекул атоми взаємодіють за допомогою потенціалу м'яких сфер з показником $n = 12$:

$$\phi(r) = \epsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12},$$

де σ – діаметр атома, ϵ – енергетичний параметр, r – відстань між взаємодіючими атомами.

Відстань між атомами L однієї молекули була жорстко зафіксована і дорівнювала 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 і 0.6. Параметр ϵ у всіх випадках дорівнював 0.25, так, щоб при переході до сферично-симетричних молекул ($L=0$), потенціал взаємодії між ними (який є сумою чотирьох атомних потенціалів), дорівнював $\epsilon(\sigma/r)^{12}$. Діаметр атома молекули вибирався таким, щоб об'єм двохатомної молекули не змінювався і був рівним об'єму сфери діаметром $\sigma = 1$. Таким вибір параметрів атом-атомного потенціалу взаємодії дозволяє коректно порівнювати теплофізичні характеристики систем з різною формою несферичності молекул (різними відстанями L).

Методом Монте-Карло в канонічному ансамблі для досліджуваних систем із $N=108$ молекул були розраховані енергія, тиск, адіабатичний та ізобаричний модулі пружності, ізохорна та ізобарна теплоємності, коефіцієнт теплового розширення в інтервалі приведених густин $\rho = 0.4-0.9$ при температурах $T=1.0$ і $T=2.0$.

В ході моделювання використовувались два типи генерації нової конфігурації: зміщення молекули як цілого і поворот на випадковий кут навколо центра мас. Максимальне зміщення і максимальний кут повороту вибирались таким чином, щоб відповідна доля прийнятих конфігурацій дорівнювала 30 %. Кількість кроків для встановлення термодинамічної рівноваги дорівнювала 40 000, а кількість кроків для усереднення макроскопічних аналогів досліджуваних теплофізичних величин дорівнювала 100 000 при заданих ρ і T . Радіус обрізання атом-атомного потенціалу вибирався рівним 2.5.

Згенерована за допомогою алгоритму Метрополіса [4] послідовність конфігурацій системи використовувалась для знаходження середніх і середньоквадратичних флуктуацій мікроскопічних аналогів макроскопічних величин. Внутрішня енергія E , тиск P , ізохорна теплоємність C_V , ізотермічний модуль стисливості K_T розраховувались за формулами [4]:

$$E = \frac{3}{2} NT + \langle U \rangle,$$

$$\langle \delta E^2 \rangle = T^2 C_V$$

$$U = \sum_{i < j} u_{ij},$$

$$u_{ij} = \sum_{a,b} \varphi(r_{ab})$$

де U – потенціальна енергія взаємодії частинок системи, u_{ij} – енергія взаємодії i -ої та j -ої молекул, r_{ab} – відстань між a -им атомом i -ої та b -им атомом j -ої молекул;

$$P = \frac{NT + \langle W \rangle}{V},$$

$$W = -\frac{1}{3} \sum_{i < j} \bar{r}_{ij} \cdot (\bar{\nabla}_{ij} U)_{\bar{\Omega}_i, \bar{\Omega}_j},$$

де W – віріал сил, V – об'єм системи, r_{ij} – відстань між центрами i -ої та j -ої молекул, $\bar{\Omega}$ – набір кутів, які характеризують орієнтацію молекули у просторі. Диференціювання здійснювалось за змінною $\bar{r}_{ij}$ при фіксованій орієнтації i -ої та j -ої молекул. У рамках атом-атомної силової схеми попередню формулу можна записати у зручному для обчислення вигляді:

$$W = -\frac{1}{3} \sum_{i < j} \sum_{a,b} \frac{w_{ab}}{r_{ab}^2} (\bar{r}_{ij} \cdot \bar{r}_{ab}),$$

де

$$w_{ab} = r_{ab} \frac{d\varphi}{dr_{ab}};$$

$$\langle \delta W^2 \rangle = T(NT + \langle W \rangle - VK_T + \langle X \rangle),$$

де X – гіпервіріал сил, який визначається як:

$$X = \frac{1}{9} \sum_{i < j} \sum_{k < l} \bar{r}_{ij} \cdot (\bar{\nabla}_{ij}) \bar{r}_{kl} \cdot (\bar{\nabla}_{kl} U)$$

Ця загальна формула є незручною для використання в комп'ютерному експерименті. В рамках атом-атомної силової схеми нами виведений більш зручний її варіант:

$$X = \frac{1}{9} \sum_{i < j} \sum_{a,b} \left\{ w_{ab} \frac{r_{ij}^2}{r_{ab}^2} + \frac{w_{ab}}{r_{ab}^2} (\bar{r}_{ab} \cdot \bar{r}_{ij}) + \right. \\ \left. + \frac{x_{ab}}{r_{ab}^4} (\bar{r}_{ab} \cdot \bar{r}_{ij})^2 - \frac{2w_{ab}}{r_{ab}^4} (\bar{r}_{ab} \cdot \bar{r}_{ij})^2 \right\}$$

де

$$x_{ab} = r_{ab} \frac{dw}{dr_{ab}}.$$

Для сферично-симетричних частинок ця формула збігається з приведеною в роботі [4]:

$$X = \frac{1}{9} \sum_{i < j} r_{ij} \frac{d}{dr_{ij}} \left(r_{ij} \frac{d\varphi}{dr_{ij}} \right)$$

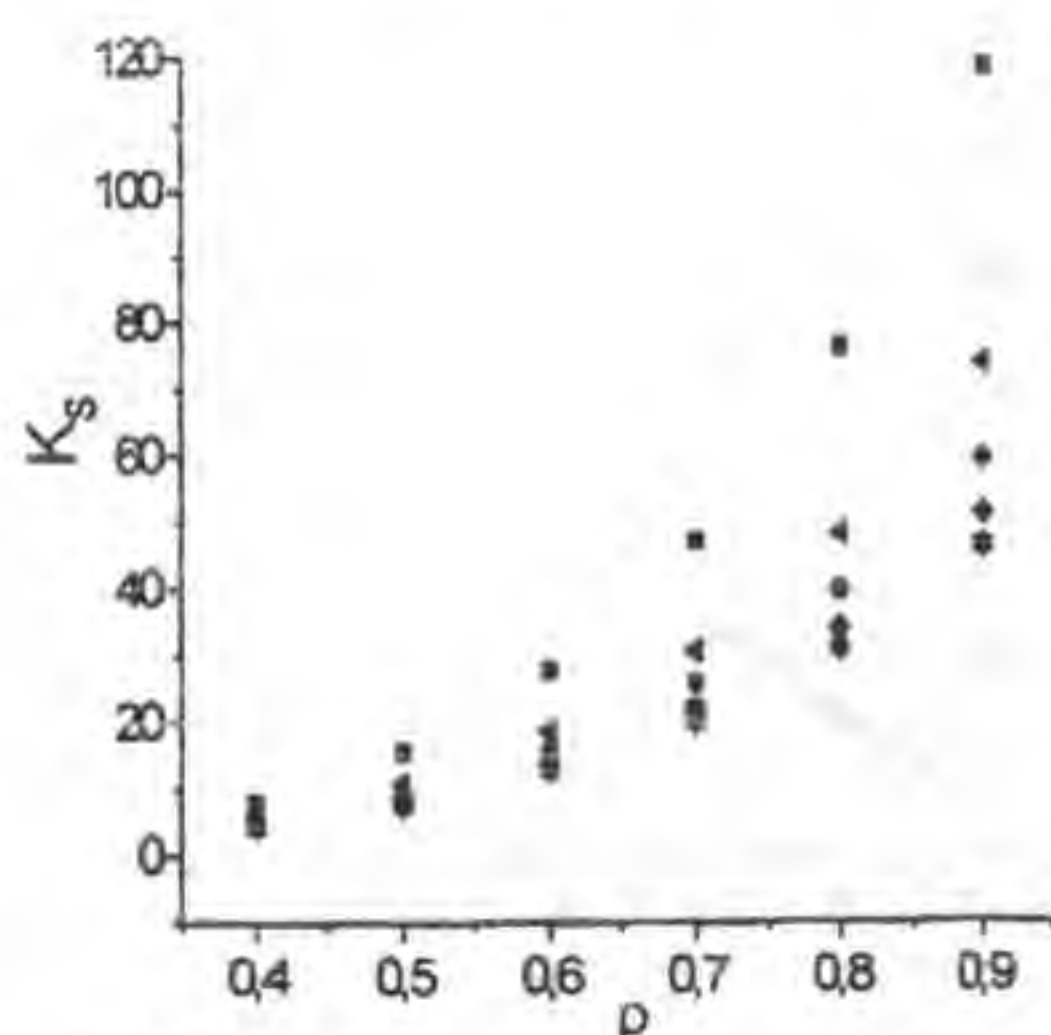


Рис. 1. Залежність адіабатичного модуля пружності від густини ($\blacksquare$ – $L=0.0$, $\bullet$ – $L=0.1$, $\blacktriangle$ – $L=0.2$, $\blacktriangledown$ – $L=0.3$, $\blacklozenge$ – $L=0.4$, $\blacktriangleleft$ – $L=0.6$).

Термічний коефіцієнт γ_V визначали із співвідношення:

$$\langle \delta V \delta W \rangle = T^2 (V \gamma_V - N)$$

Адiabатичний модуль пружності K_S та коефіцієнт ізобарної теплоємності C_P розраховували за формулами:

$$K_S = K_T + \frac{T \gamma_V^2}{\rho C_V},$$

$$C_P = C_V \frac{K_S}{K_T}$$

Отримання комплексу даних по швидкості поширення звуку, модулям пружності і густині дозволяє „зв'язати” комп'ютерний і фізичний експерименти. Наприклад, якщо розрахувати швидкість поширення звуку з даних по адіабатичному модулю пружності і густині, можна провести безпосереднє порівняння цього параметра з відповідним акустичним параметром, отриманим шляхом вимірювань. Слід відмітити як позитивний фактор те, що швидкість поширення звуку визначають експериментально з високою точністю.

На Рис. 1 і 2 зображено графіки залежностей відповідно адіабатичного та ізотермічного модулів пружності від густини для шести модельних рідин при $T=2.0$. Як видно з графіків,

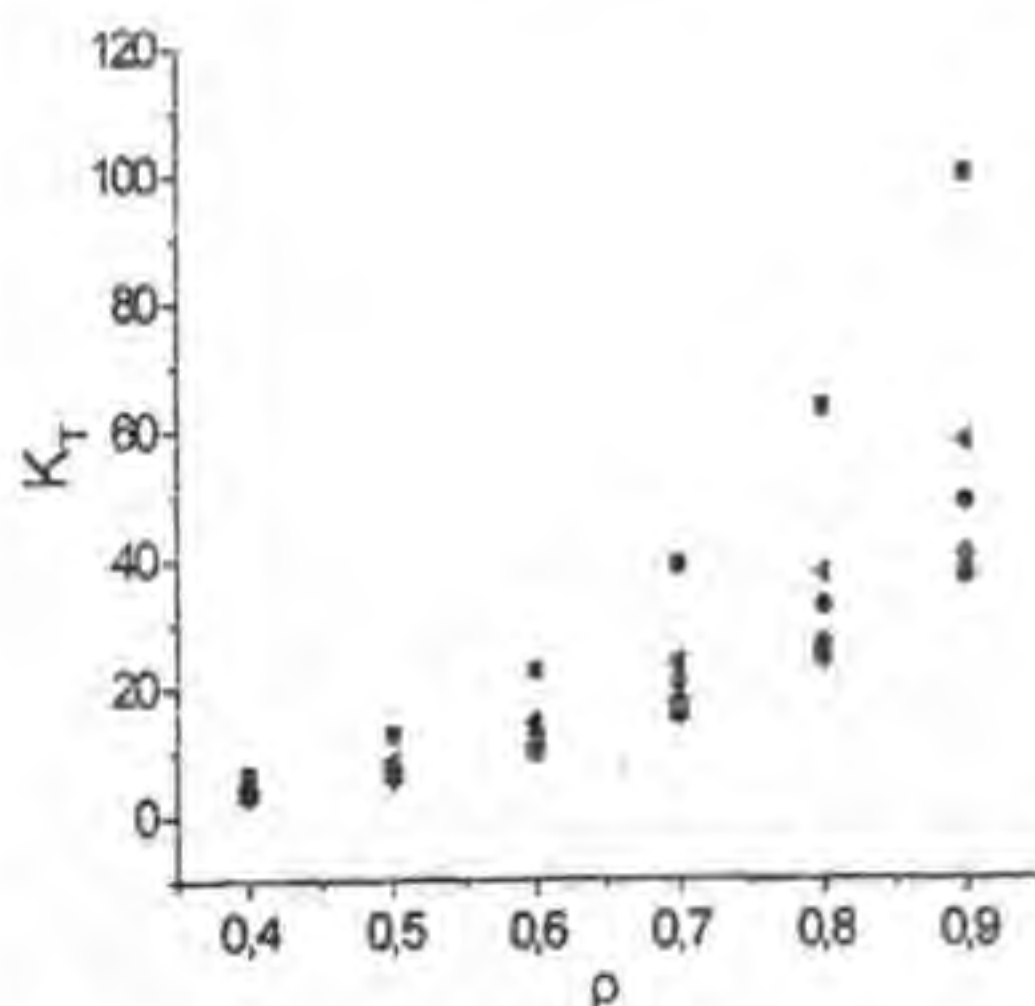


Рис. 2. Залежність ізотермічного модуля пружності від густини ($\blacksquare$ – $L=0.0$, $\bullet$ – $L=0.1$, $\blacktriangle$ – $L=0.2$, $\blacktriangledown$ – $L=0.3$, $\blacklozenge$ – $L=0.4$, $\blacktriangleleft$ – $L=0.6$).

залежність модулів пружності від густини є зростаючою і нелінійною. Модулі пружності сильно залежать від несферичності молекули при фіксованій густині. Так, при густині $\rho=0.8$, значення модулів зменшуються майже втричі при переході від сферичних частинок ($L=0.0$) до несферичних ($L=0.3$). Отже, не дивно, що термодинамічна теорія збурень нашоюхується на значні труднощі, пов'язані зі збіжністю ряду розкладу теплофізичних величин по параметру несферичності молекул.

Експериментальні дослідження теплофізичних властивостей молекулярних рідин показують, що їх пружні властивості адекватно описуються рівнянням стану Тейта [1]:

$$K_T = \frac{P+B}{A} \left(1 - A \ln \left(\frac{B+P}{B+P_0} \right) \right),$$

де P_0 – тиск на лінії рівновага рідина-пара, A – стала, B – функція лише температури.

Особливістю цього рівняння є проста і універсальна барична залежність ізотермічної похідної тиску від об'єму. З урахуванням цього факту ми побудували залежності модулів пружності від тиску, які представлені на Рис. 3 і 4. Як видно з рисунків, барична залежність K_S і K_T є зростаючою і майже лінійною. Ця залежність передбачається також рівнянням стану Марнегхена [1]:

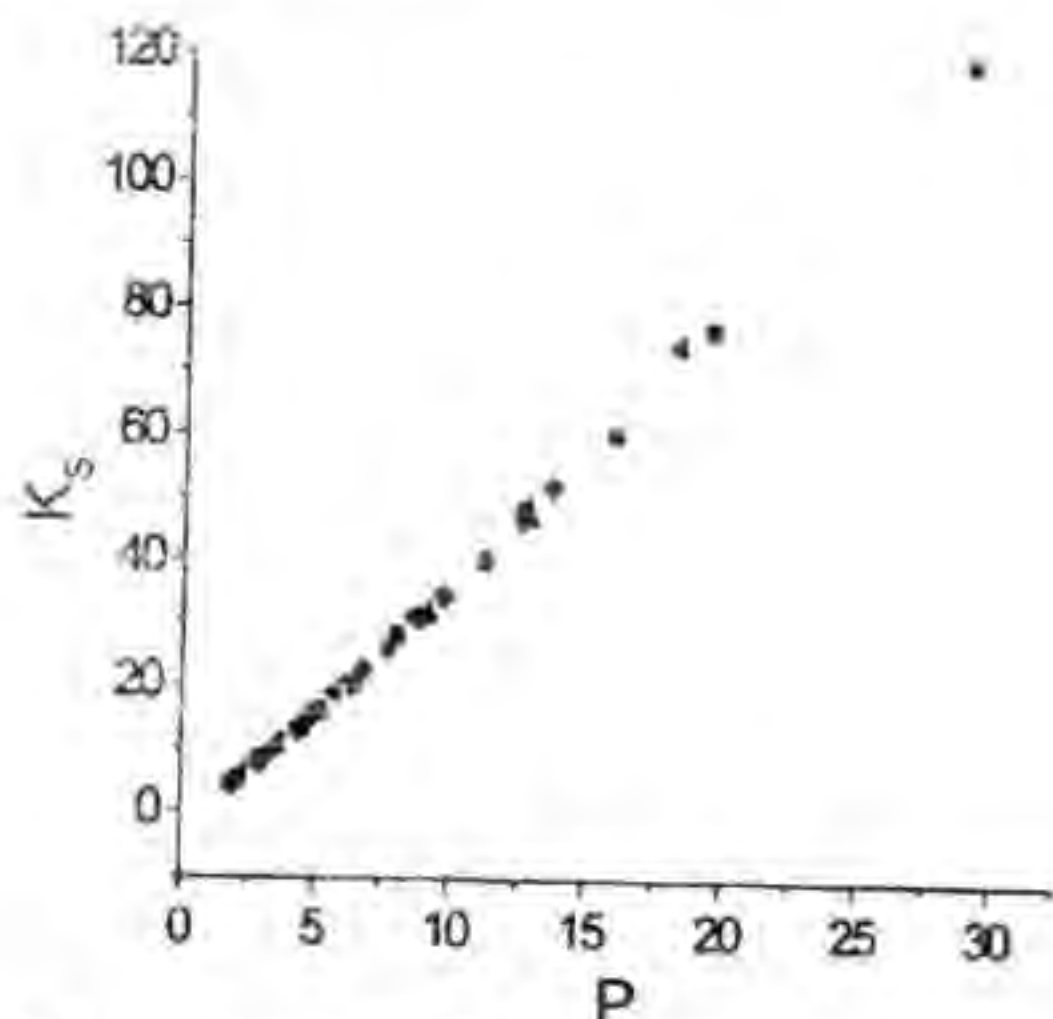


Рис. 3. Залежність адіабатичного модуля пружності від тиску ($\blacksquare$ – $L=0.0$, $\bullet$ – $L=0.1$, $\blacktriangle$ – $L=0.2$, $\blacktriangledown$ – $L=0.3$, $\blacklozenge$ – $L=0.4$, $\blacktriangleleft$ – $L=0.6$).

$$K_T = \frac{P + B'}{A'}$$

де A' – стала, B' – функція лише температури.

Це рівняння, як і рівняння Тейта, непогано описує P - V - T дані молекулярних рідин в області тисків до 100 МПа. Найцікавішою, на наш погляд, особливістю наведених графіків є те, що форма молекули майже не впливає на баричну залежність модулів пружності. Отже, при фіксованому тиску збіжність ряду розкладу модулів пружності по параметру несферичності молекул повинна бути досить швидкою. Це означає, що при застосуванні термодинамічної теорії збурень для розрахунку модулів пружності молекулярних рідин та їх розчинів доцільно використовувати ізотермічно-ізобаричний ансамбль. Той факт, що несферичність молекули майже не впливає на баричну залежність модулів пружності може пояснити ефективність застосування ізотермічних рівнянь стану типу Тейта або Марнегхена при описі P - V - T даних молекулярних рідин.

Незалежність K_s і K_T від не сферичності молекули при сталому тиску має ще одне цікаве застосування. Як показано в роботах [1,2], на величину модулів пружності суттєво впливає крутизна відштовхувальної частини потенціалу міжмолекулярної взаємодії. Така залежність була теоретично обґрунтована в роботах [3] для системи частинок, які взаємодіють за допомогою центрального потенціалу. Проте, при визначенні показника сил відштовхування

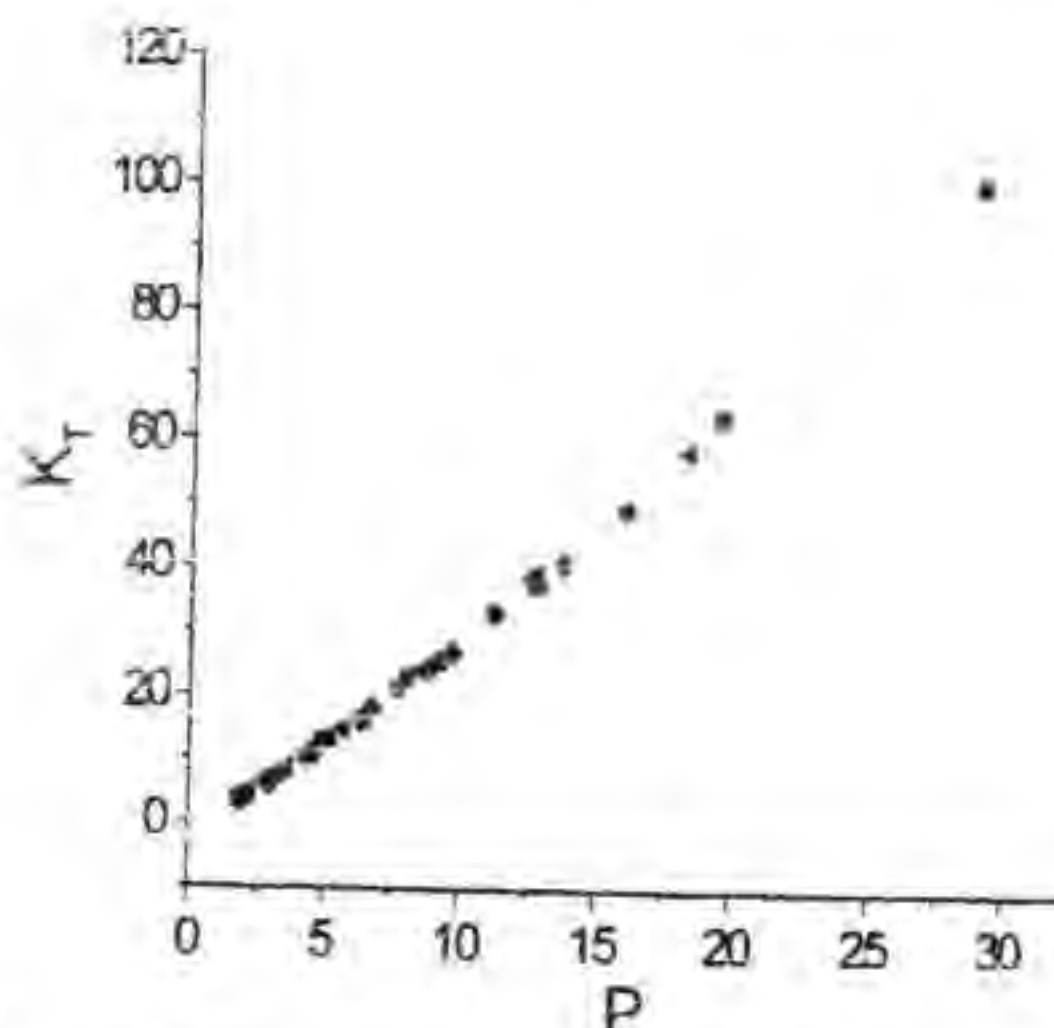


Рис. 4. Залежність ізотермічного модуля пружності від тиску ($\blacksquare$ – $L=0.0$, $\bullet$ – $L=0.1$, $\blacktriangle$ – $L=0.2$, $\blacktriangledown$ – $L=0.3$, $\blacklozenge$ – $L=0.4$, $\blacktriangleleft$ – $L=0.6$).

експериментальних даних по баричній залежності K_T і K_s , залишався нез'ясованим вплив форми молекули на точність отриманих даних. Оскільки, як видно з Рис. 3 і 4, форма молекули практично не впливає на баричну залежність модулів пружності, то використання їх для аналізу особливостей потенціалу сил відштовхування між молекулами є цілком коректним навіть у випадку молекулярних рідин та їх розчинів.

Список використаних джерел

1. Адаменко І.І., Булавін Л.А. Фізика рідин та рідинних систем. – К.: АСМІ, 2006. – 660 с.
2. Адаменко І.І., Самойленко Л.П. Об уравнении состояния Тейта // Физика жидкого состояния. – 1987. – Вып. 15. – С. 117-120.
3. Атамась А.А., Бардик В.Ю., Сисоєв В.М. Корекція параметрів потенціалу міжмолекулярної взаємодії сил відштовхування // УФЖ. – 2000. – Т. 45, № 10. – С. 1184-1187.
4. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. – Oxford, Clarendon Press, 1986. – 385 p.

Надійшла до редколегії 19.09.09

УДК 532.536

Атамась Н.О., канд. ф.-м. н.

Дослідження зміни будови утворень з молекул води та структура системи вода-пропиловий спирт при $T=300\text{K}$ за даними по енергії міжмолекулярної взаємодії

Метод Монте Карло використано для дослідження змін структури водного розчину пропилового спирту в залежності від вмісту пропанолу при $T=300\text{K}$. Визначено межі областей концентрацій, які характеризуються певною локальною структурою та визначено характеристики цих структур. Встановлено, що за концентрацій менших ніж $x_{pr}\sim 0.04$ молекули пропанолу не впливають на фізико-хімічні властивості досліджуваної системи. Одержано, що при $x_{pr}\sim 0.2$ молекули пропанолу утворюють кластери, які в області концентрацій $x_{pr}\sim (0.3-0.38)$ перетворюються на міцели, які оточені молекулами води.

Ключові слова: середня енергія міжмолекулярної взаємодії у розчині, вода, пропанол, область концентрацій, локальна структура.

*E-mail: atamasphys@univ.kiev.ua

При вивченні особливостей концентраційної поведінки водних розчинів пропилового спирту існує можливість дослідити на молекулярному рівні вплив зміни будови кластерів з молекул води на структурні властивості досліджуваної системи при сталій температурі $T=300\text{K}$.

Проаналізуємо вплив чисельності молекул пропанолу на зміну сітки водневих зв'язків між молекулами води в залежності від зміни значень середніх енергій взаємодії між молекулами води в розчині. Одержані нами методом Монте Карло результати для значень середніх енергій міжмолекулярних взаємодій в системі вода-пропиловий спирт при $T=300\text{K}$ приведені на рис.1. Згідно з даними роботи [1] перебудова форми об'ємного кластеру з 6 молекул води відбувається при значенні енергії взаємодії між молекулами води $E_{\text{вода-вода}}\sim 9.1\text{ ккал/моль}$, що відповідає значенню концентрації пропанолу $x_{pr}\sim 0.04\text{ м.д.}$

В цьому випадку зміна форми водного кластеру проходить через проміжну форму «клітина» при $x_{pr}\sim 0.03\text{ м.д.}$ Так як в цій області концентрацій не відбувається зміна числа молекул води, які утворюють кластер, то в цьому випадку перебудова локальної сітки водневих

N.A.Atamas, PhD

Water Clusters and Local Structure of Water-propanol Solution at $T=300\text{K}$ from Energetics of the Solutions.

Monte Carlo simulations of water solution of propanol were performed at different concentrations. From the analysis of interaction energies, radial distribution functions, and the nearest neighbors numbers it was found that at the concentrations lower than $x_{pr}\sim 0.04$ propanol molecules do not influence on the physical-chemical properties of water in water-propanol solution. The region of concentrations where propanol micelles are formed was found. The role of fluctuations in the process of the formation of propanol clusters at concentration near $x_{pr}\sim 0.2$ was determined. It was found that in the concentration range $x_{pr}\sim (0.3-0.38)$ process of the formation of micelles from propanol molecules takes place.

Key Words: Carlo simulation, water-propanol solution, concentrations, radial distribution functions.

зв'язків між молекулами води відбувається у декілька етапів а саме, утворення дірки у сітці водневих зв'язків води, заповнення її молекулою іншого сорту, перебудова сітки водневих зв'язків навколо введеної молекули. Моделі [2] перебудови сітки водневих зв'язків навколо введеної молекули базуються на уявленнях кватратної структури води.

Але адекватність цього уявлення для розчинення у воді молекул спиртів в області малих концентрацій не було доведено нейтронним експериментом та рентгенівським експериментом [3]. Так як в цій області концентрацій не відбувається зміни числа молекул води у водних кластерах, то доцільно припустити, що молекули пропанолу лише спотворюють навколо себе сітку водневих зв'язків між молекулами води, і можуть розглядатись як своєрідні дефекти у локальній структурі води. При концентраціях більших $x_{pr}\sim 0.04\text{ м.д.}$ відбуваються більш суттєві зміни водних кластерів, а саме, спостерігається зміна числа молекул, які утворюють кластер. Водні кластери в цьому випадку складаються з 5 молекул води, що утворюють пентаметр.

В цьому випадку шоста молекула могла прийняти участь у взаємодії з молекулою пропанолу. Подальша трансформація водного

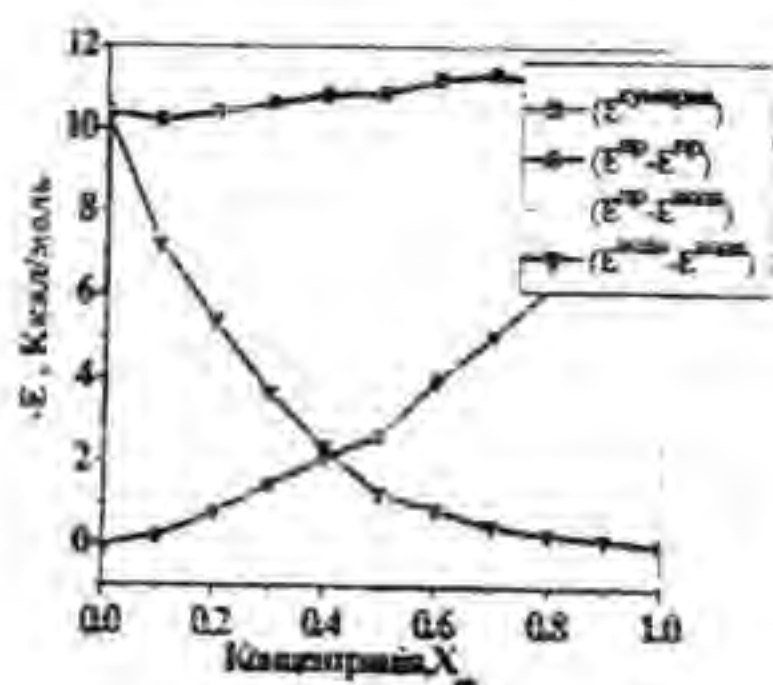


Рис. 1. Залежність середньої міжмолекулярної енергії взаємодії в розчині $E_{\text{сум}}$ та її компонент – середньої енергії взаємодії між молекулами пропанолу $E_{\text{пр-пр}}$, середньої енергії взаємодії між молекулами води $E_{\text{вода-вода}}$, середньої енергії взаємодії між молекулами води та пропанолу $E_{\text{вода-пр}}$ у розчині при $T=300\text{ K}$

кластеру спостерігається при концентраціях $x_{\text{пр}} \sim 0.1$ м.д. – відбувається перехід до об'ємного кластеру з симетрією C_3 ($E_{\text{вода-вода}} \sim 7.0$ ккал/моль). Зменшення до 4 числа молекул, які формують кластер у формі паралелограма із симетрією S_4 фіксується при $x_{\text{пр}} \sim 0.15$ м.д. ($E_{\text{вода-вода}} \sim 6.2$ ккал/моль). Тобто при цій концентрації вже починається формування утворень з молекул води та пропанолу до яких щонайменше входить 2 молекули пропанолу. Перехід до водних кластерів з 3 молекул води ($E_{\text{вода-вода}} \sim 2.5$ ккал/моль) відбувається при $x_{\text{пр}} \sim 0.38$ м.д. Поряд з цією областю концентрацій, при $x_{\text{пр}} \sim 0.41$ м.д. знаходиться точка перетину кривих $E_{\text{вода-вода}}$ та $E_{\text{пр-пр}}$ тобто спостерігається енергетична рівновага взаємодії молекул пропанолу між собою та молекул води між собою і розчин вода-пропанол може вважатись ідеальним.

Таким чином, на основі аналізу концентраційної залежності енергії взаємодії між молекулами води у водному розчині пропилового спирту, встановлено, що в області концентрацій менших ніж $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. спостерігається як багаторазова перебудова форми водних кластерів так і числа молекул, які їх утворюють. Найбільш інтенсивно ці процеси без зміни числа молекул, які утворюють водний кластер відбуваються в області сильно розведених розчинів при концентраціях менших ніж $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. що є

свідомством того, що в сильно розведених розчинах домінуючою є взаємодія між молекулами води, а молекули розчинника майже не впливають на цю взаємодію.

На основі одержаних залежностей енергій міжмолекулярних взаємодій від концентрації видно, що для водного розчину пропилового спирту відбуваються зміни локальної структури розчину у наступних областях концентрацій:

1. Область нескінченно розведених розчинів при концентраціях менших $x_{\text{пр}} < 0.04$ м.д.
2. Область розведених розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.04 \div 0.1)$ м.д.
3. Область розведених розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.1 \div 0.15)$ м.д.
4. Область розведених розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.14 \div 0.25)$ м.д.
5. Область розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.25 \div 0.38)$ м.д.
6. Область концентрованих розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.38 \div 0.6)$ м.д.
7. Область сильно концентрованих розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.6 \div 0.8)$ м.д.
8. Область сильно концентрованих розчинів $x_{\text{пр}} \sim (0.8 \div 1.0)$ м.д.

Розглянемо окремо кожен область розведених розчинів у межах виділених концентрацій:

В першій області в околі концентрації $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. спостерігається максимум значень нормованих значень парціальних молярних об'ємів молярних ентродії та ентальпії впродовж флуктуацій пропанолу у воді. Також при цій концентрації мають максимальне значення ентальпії та ентродії, що розраховані для взаємодій між молекулами пропанолу. Існування максимумів термодинамічних функцій свідчить про перебудову локальної структури ріднини. Літературні дані [4] підтверджують надані вище припущення про існування переходу від однієї локальної структури розчину до іншої в околі концентрації $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. для водного розчину пропилового спирту. Таким чином, властивості сильно розведеного розчину вода-пропанол до $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. не відрізняються від властивостей води, яка складається з кластерів, що сформовані з 6 молекул води.

З метою детального визначення числа молекул води, які приймають участь у взаємодії з молекулою пропанолу, та їх розташування було розглянуто з використанням методу Монте Карло систему, яка складалась з 1 молекули пропанолу та 215 молекул води. На основі аналізу одержаних РФР (рис.2) та аналізу числа найближчих сусідів встановлено, що в області концентрацій нескінченно розведених розчинів

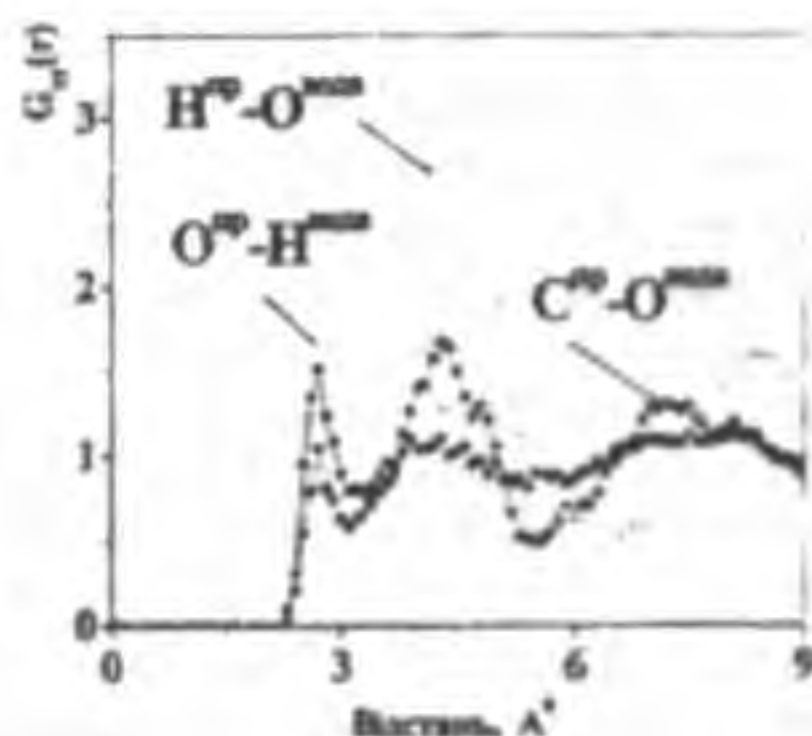


Рис. 2. РФР для взаємодії між атомами молекул води атомами молекули пропанолу при $T=300$ K

при $x_{\text{пр}} \leq 0.04$ м.д. навколо введеної у воду молекули пропанолу знаходиться (7+8) молекул води. Причому 4 молекули води знаходяться в околі атому кисню молекули пропанолу, 2 – в околі алкільного ланцюжка молекули пропанолу, 1 – в околі гідроксильної групи молекули пропанолу.

За рахунок взаємодії молекул води з молекулою пропанолу встановлюється водневий зв'язок між атомом кисню молекули води та «одиночним» атомом (рис.2), з яким у використаній моделі ототожнено алкільний ланцюжок молекули пропанолу. Між атомом водню гідроксильної групи молекули пропанолу, між атомом кисню молекули пропанолу та оточуючими молекулу пропанолу молекулами води утворюється вільний об'єм, який чисельно дорівнює 2 об'ємам молекули води, тобто розмір дірки, яка утворюється на першому етапі розчинення пропанолу у воді дорівнює об'єму 2 молекул води. Така ситуація існує в околі концентрацій нижчих ніж $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д., в випадку, коли не існує взаємодії молекул пропанолу між собою. Тільки починаючи з концентрацій більших $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. система вода-пропанол молекули пропанолу починають приймати участь у формуванні структури рідини. Одержаний результат корелює з даними малокутового розсіювання нейтронів [5] та спектральними дослідженнями [6]. Авторами, за даними малокутового розсіювання нейтронів, встановлено існування мінімуму концентраційної залежності коефіцієнту самодифузії у водному розчині пропильового спирту при $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д., причиною якого можуть бути процеси утворення кластерів з молекул води та пропанолу. В результаті комп'ютерного

моделювання встановлено, що в околі $x_{\text{пр}} \sim 0.04$ м.д. відбувається зміна форми та числа молекул, які утворюють кластер з молекул води та відбувається утворення систем, які складаються з молекул води та пропанолу.

При подальшому збільшенні числа молекул пропанолу у воді в області концентрацій $x_{\text{пр}} \sim (0.04 + 0.1)$ м.д. поступово буде досягнуто такий стан, коли вже не буде існувати вільного місця для молекул пропанолу у сітці водневих зв'язків між молекулами води і почнеться процес перебудови локальної структури розчину. Цей стан, згідно проведеного аналізу середньої енергії міжатомної взаємодії між молекулами води у водному розчині пропильового спирту, відбувається в околі $x_{\text{пр}} \sim 0.1$ м.д. Введення великої кількості молекул пропанолу приведе до утворення утворень, які складаються з молекул пропанолу та молекул води. Коли концентрація молекул пропанолу у розчині досягне критичного значення і буде перейдено поріг перколяції, тоді реалізується локальна структура розчину, яка характеризується існуванням двох типів кластерів. Більшість молекул у кластерах першого сорту складають молекули води, а в кластерах другого сорту більшість складають молекули пропанолу. Починаючи з $x_{\text{пр}} \sim 0.1$ м.д. в розчині можуть існувати утворення з 2 молекул води та декількох молекул пропанолу. Зазначимо, що також при $x_{\text{пр}} \sim 0.1$ м.д. спостерігається зміна поведінки нормованих функцій флуктуації ентальпії та ентропії, розраховані для взаємодій між молекулами пропанолу. Таким чином, можна вважати, що в області концентрацій $x_{\text{пр}} \sim (0.04 + 0.1)$ м.д. відбувається кількіска перебудова локальної структури розчину. В межах цієї області концентрацій спостерігається взаємодія та утворення кластерів як мінімум з 2 молекул води та 1 молекули пропанолу та існують кластери з молекул води, які переважно складаються з 6 молекул води. Така структура розчину також продовжує існувати в діапазоні концентрацій $x_{\text{пр}} \sim (0.1 + 0.15)$ м.д. В цьому околі концентрацій при додаванні молекул пропанолу у воду відбувається, за рахунок їх взаємодії з молекулами води, зміна форми водного кластера, а саме, зменшення до 5 молекул води, які його утворюють.

При $x_{\text{пр}} \sim 0.15$ м.д. ($E_{\text{вод}} \sim 6.2$ ккал/моль) молекули води починають утворювати кластери з 4 молекулами, тобто структуру води складають кластери, до складу яких входять 4 молекули води. Одержані нами дані корелюють з даними, одержаними з використанням методу

діелектричної релаксацийної спектроскопії наданими авторами роботи [7], якими зафіксовано існування перебудови локальної структури системи вода-пропиловий спирт при $x_{\text{пр}} \sim 0.14$ м.д. Ними встановлено, що при $x_{\text{пр}} \sim 0.14$ м.д. існує точка перегину концентраційної залежності логарифму часу релаксації. При збільшенні концентрації спирту в воді час релаксації системи збільшується, що авторами зв'язується зі зменшенням густини водневих зв'язків в околі атому кисню та гідроксильної групи молекули пропанолу, а також з підвищенням густини водневих зв'язків в околі алкільного ланцюжка молекули спирту. Ці зміни густини приводять до зменшення ймовірності того, що молекули води утворюють водневі зв'язки з полярними групами молекули пропанолу. Якщо ж молекули води безпосередньо контактують з групою алкільного ланцюжка молекули спирту, то вони можуть утворювати водневі зв'язки лише з однієї сторони, а саме, з атомами неполярного алкільного ланцюжка молекули спирту. Автори стверджують, що при $x_{\text{пр}} \leq 0.14$ м.д. не існує можливості взаємодії молекул спирту між собою, що і підтверджує одержані нами дані відносно локальної структури рідини в цій області концентрацій. Відомо [8,9], що в околі $x_{\text{пр}} \sim 0.2$ м.д. спостерігається максимум флуктуацій концентрацій пропанолу у розчині та аномальна поведінка теплоємності водного розчину пропанолу [10]. Така поведінка молекул пропанолу, згідно з даними, одержаними нами для водних розчинів етилового спирту [11], може бути пов'язана зі збільшенням ролі гідрофобних взаємодій між молекулами пропанолу та утворенням відносно великих кластерів з молекул пропанолу. При $x_{\text{пр}} \sim 0.3$ м.д. співпадають значення середніх енергій міжмолекулярних взаємодій вода-вода та вода – пропанол. При цій же концентрації відбувається зміна форми водного кластера - перехід від плоского до об'ємного без зміни числа молекул води. Зміна числа молекул, які складають кластер, спостерігається також і при $x_{\text{пр}} \sim 0.4$ м.д. В околі цієї концентрації співпадають значення енергій міжмолекулярної взаємодії вода-вода та пропанол-пропанол. Таким чином, розчин при $x_{\text{пр}} \sim 0.4$ м.д. може розглядатись як гетерогенна система, яка складається з відносно великих кластерів з молекул пропанолу, які за формою можуть нагадувати міцели, та кластерів з молекул води. Молекули пропанолу у міцеллоподібних утвореннях можуть розташовуватись гідроксильною групою зовні і взаємодіють з

кластерами з молекул води, як з однією молекулою.

Список використаних джерел

- 1 Xanthopoulos S.S. Cooperativity and Hydrogen Bonding Network in Water Clusters // Chemical Physics. – 2000. – Vol. 258. – P.225-231.
- 2 Kiselev M. Preferential solvation and elasticity of the hydrogen bonds network in ternary butyl alcohol water mixture // Chem.Phys.Lett. – 2003. – Vol.359. – P.581-587.
- 3 Takamuku T. X-ray diffraction studies on methanol, ethanol-water and 2-propanol-water mixtures at low temperatures // J.Mol.Liq. – 2005. – Vol.119. – P.133-146.
- 4 Yano Y. Correlation between surface and bulk structures of alcohol-water mixtures // Journal of Colloid and Interface Science. – 2005. – Vol.284. – P. 255 - 259.
- 5 L.A.Bulavin, V.I.Slisenko. Concentration Features of Dynamics of molecules of a water-propanol solutions // In book "4th International conference-Physics of Liquid Matter, Modern problems, 2008. – P.11.
6. Погорелов В.Є. Асоційованість молекул метанолу: квантово-хімічні розрахунки структури та коливальні спектри // УФЖ. – 2004. – Т.49, №6. – С. 540-544.
- 7 Sato T. The cooperative dynamics of the H-bonded system in 2-propanol/water mixture: Steric hindrance effects of non-polar head group // J.Chem.Phys. – 2003. – Vol.119, №20. – P.10789-10800.
- 8 Mashimo S. Structure and primary alcohol studies by microwave dielectric analyses // J.Chem.Phys. – 1999. – Vol.95, №1. – P.6257-6260.
- 9 Sato T. Cooperative and molecular dynamics of alcohol/water mixtures: the view of dielectric spectroscopy // J.Mol.Liquids. – 2005. – Vol. 117. – P.23-31.
- 10 Khalfaelouli B. Thermodynamics properties of water-normal alcohols and vapor equilibria for binary system of methanol or 2-propanol with water // Fluid Phase Equilibria. – 1997. – Vol.127. – P.181-190.
- 11 Атамась Н.А. Дослідження структурних ефектів в концентрованих водних розчинах етилового спирту // Укр. фіз. журн. – 2004. – Т.49, № 6. – С.552-555.

Надійшла до редакції 29.10.2009

УДК 535.3

Л.М. Білокриницька, канд. фіз.-мат. наук,
О.Ю. Гришук, аспірант,
В.Є.Клименко, канд. фіз.-мат. наук,
С.В. Шостак, канд. фіз.-мат. наук,
Л.Г.Гречко, докт. фіз.-мат. наук, проф.*

Поглинання електромагнітного випромінювання (ЕМВ) матричними дисперсними системами з багатошаровими кульовими включеннями

В електростатичному наближенні досліджено поглинання електромагнітного випромінювання (ЕМВ) кульовими багатошаровими малими частинками (БМЧ) та матричними дисперсними системами (МДС) на їх основі. Для БМЧ розроблено процедуру розрахунку її поляризованості та ефективності поглинання ЕМВ. Для МДС з включеннями типу БМЧ розвинуто теорію розрахунку її ефективної діелектричної проникності ($\bar{\epsilon}$) з врахуванням мультипольної взаємодії між включеннями. У випадку лише дипольної взаємодії між включеннями знайдено конкретні вирази для розрахунку ($\bar{\epsilon}$) МДС.

Ключові слова: електромагнітне випромінювання, малі частинки, діелектрична проникність, поглинання

*E-mail: lgrechko@isc.gov.ua

Вступ

При взаємодії електромагнітного випромінювання (ЕМВ) з матрично-дисперсними системами (МДС) із структурно-неоднорідними включеннями (багатошарові включення, включення з просторово-залежною діелектричною проникністю, включення, що несуть поверхневі заряди, тощо) має місце ускладнення структури спектрів поглинання ЕМВ поблизу частот поверхневих мод включень, число яких в порівнянні з однорідними включеннями зростає [1-3]. Одним з поширених методів розрахунку процесів взаємодії електромагнітного випромінювання з такими системами є метод ефективного середовища. Суть цього методу полягає у тому, що неоднорідна немагнітна МДС замінюється однорідним середовищем з деякою ефективною діелектричною проникністю (ДП) $\bar{\epsilon}$, величина

Bilokrynyts'ka L.M., Ph. D.,
Grishuk O.Yu., Post Graduate St.,
Klymenko V.Ye., Ph. D.,
Shostak S.V., Ph. D.,
Grechko L.G., Dr. Sc., prof.*

Absorption of electromagnetic irradiation (EMI) by matrix disperse systems with multilayer spheroid inclusions

Absorption of electromagnetic irradiation (EMI) by multilayer little particles (MLP) and matrix disperse systems (MDS) on this base were investigated in electrostatic approximation. The computation procedure was developed for MLP polarization and absorption efficiency of EMI. For MDS with inclusions of MLP type, the theory of calculation of its efficient dielectric permeability taking into account the multipole interaction between inclusions was developed. In the case of dipole interaction between inclusions the formulae were obtained for calculation of (ϵ) for MLP.

Key Words: electromagnetic irradiation, little particles, dielectric permeability, absorption

якої залежить від ДП включень та матриці, концентрації включень та їх форми [4-6]. Тоді після знаходження $\bar{\epsilon}$ коефіцієнт поглинання (κ) може бути обчислений за формулою [2]:

$$\kappa = \frac{\omega}{c} \operatorname{Im} \sqrt{\bar{\epsilon}} = \frac{2\pi}{\lambda} \operatorname{Im} \sqrt{\bar{\epsilon}} \quad (1)$$

де ω - частота, c - швидкість світла, λ - довжина хвилі.

Для окремої частинки ефективність поглинання виражається через поляризованість частинки α формулою [3]:

$$Q_{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\lambda a^2} \operatorname{Im} \alpha, \quad (2)$$

де a - зовнішній радіус кулі.

Найбільш відомим і обґрунтованим наближенням для розрахунку $\bar{\epsilon}$ МДС з кульовими включеннями є співвідношення Максвелл-Гарнетта [3,9], яке має місце при ступенях заповнення $f = V_0/V < 0,1$, (V_0 -

об'єм, зайнятий включеннями, V - загальний об'єм системи) [3,4]. Наприклад, для суцільних кульових включень ця формула може бути записана у вигляді

$$\frac{\tilde{\epsilon} - \epsilon_m}{\tilde{\epsilon} + 2\epsilon_m} = f \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}$$

або

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_m \left[1 + 3f \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m - f(\epsilon - \epsilon_m)} \right], \quad (3)$$

де ϵ , ϵ_m - діелектричні проникності включень і матриці відповідно.

Якщо в (3) ввести поляризованість α , то для кульових включень отримаємо формулу

$$\frac{\tilde{\epsilon} - \epsilon_m}{\tilde{\epsilon} + 2\epsilon_m} = f\alpha / \alpha^*,$$

$$\tilde{\epsilon} = \frac{1 + 2f\alpha^*}{1 - f\alpha^*} \epsilon_m, \quad \alpha^* = \alpha / \alpha^1, \quad (4)$$

яка має назву формули Лоренц - Лорентца [3] чи Клаузіуса - Москотті.

При одержанні цих співвідношень припускається, що ДП матриці залишається незмінною при збільшенні f . Але при $f > 0,1$ таке наближення дає результати, які погано узгоджуються з експериментом. Це, головним чином, зобумовлено тим, що відстань між включеннями у МДС зменшується, і стає суттєвою взаємодія між ними, яка може сильно змінити характер частотних залежностей спектрів розсіяння та поглинання ЕМВ такими МДС [4,6].

В роботі для визначення поглинання як для окремих структурно-неоднорідних включень, так і для МДС на їх основі, розраховано поляризованість БМЧ. Зокрема визначена ефективна діелектрична проникність МДС з двошаровими кульовими включеннями.

1. Поглинання ЕМВ багатошаровою кулею

Розглянемо кульову частинку (рис. 1), яка складається з n концентричних шарів з діелектричними комплексними проникностями ϵ_j і зовнішніми радіусами шарів r_j ($j = 1, 2, \dots, n$ - номер шару). Куля знаходиться у зовнішньому електричному полі E_0 . Для зовнішнього радіусу шару покладемо $r_n = a$.

Нумерацію шарів починаємо з центру, тобто для ядра кулі буде $j = 1$, а для зовнішнього середовища - $j = n + 1$. Діелектричну проникність зовнішнього середовища позначимо через $\epsilon_{n+1} = \epsilon_m$. Задачу будемо розв'язувати в сферичних координатах r, θ, ϕ , пов'язаних з центром кулі. Потенціали електростатичного поля в шарах позначимо через $\varphi_j = \varphi_j(r, \theta, \phi)$, потенціал зовнішнього поля - через $\varphi_0 = \varphi_0(r, \theta, \phi)$, а збурний потенціал, який вносить куля, через $\varphi_p = \varphi_p(r, \theta, \phi)$.



Рис. 1. Розрахункова схема багатошарової кулі

Всі потенціали є розв'язками рівняння Лапласа

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \right] + \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \varphi_j}{\partial \theta} \right) \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial \phi^2} = 0. \quad (5)$$

а при $r = r_j$ повинні справджуватися умови спряження ($j = 1, 2, \dots, n - 1$)

$$\varphi_j = \varphi_{j+1}, \quad \epsilon_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} = \epsilon_{j+1} \frac{\partial \varphi_{j+1}}{\partial r}. \quad (6)$$

На поверхні кулі, тобто у випадку $j = n$, буде

$$\varphi_{n+1} = \varphi_0 + \varphi_p, \quad \epsilon_n \frac{\partial \varphi_n}{\partial r} = \epsilon_m \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial r} + \frac{\partial \varphi_p}{\partial r} \right). \quad (7)$$

До умов (6), (7) додаються умови обмеженості розв'язків в початку координат і на нескінченності, тобто

$$\varphi_j < \infty \text{ при } r \rightarrow 0 \text{ і } \varphi_p \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (8)$$

Деталі розв'язку крайової задачі (5) - (8) наведено в роботі [7]. В результаті цих розрахунків було отримано вираз для поляризованості α багатошарової кулі:

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon_n [t_{11} + 2t_{21}] - \epsilon_m [t_{11} + t_{21}]}{2\epsilon_m [t_{11} + t_{21}] + \epsilon_n [t_{11} - 2t_{21}]} \quad (9)$$

У формулі (9) вирази для t_{ij} , ($i, j = 1, 2$) — елементи тангенційної матриці переходу від першого шару кулі до n -того. Деталі розрахунку t_{ij} розглянуто в [7]. Також слід відмітити, що t_{ij} залежать від діелектричних функцій шарів ϵ_j ($j = 1, \dots, n$), їх товщин d_j ($j = 1, n$), діелектричної функції оточення та довжини хвилі падаючого випромінювання.

Для суцільної кулі ($n = 1$) з (9) випливає, що $t_{11} = 1$, $t_{21} = 0$, і тоді отримаємо відомий вираз [3] $\alpha = 4\pi a^3(\epsilon_1 - \epsilon_\infty)/(\epsilon_1 + 2\epsilon_\infty)$. Для кулі в оболонці ($n = 2$) після деяких перетворень матимемо:

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_\infty)(\epsilon_1 + 2\epsilon_\infty) + (\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_\infty + 2\epsilon_2)v}{(\epsilon_2 + 2\epsilon_\infty)(\epsilon_1 + 2\epsilon_2) + 2(\epsilon_2 - \epsilon_\infty)(\epsilon_1 - \epsilon_2)v}, \quad (10)$$

де параметр $v = r_2^3/r_1^3$ визначає об'ємну долю ядра в суцільній кулі. Цей вираз співпадає з формулою, яка наведена в [3].

Після знаходження поляризованості частинки, поглинання та ефективна діелектрична проникність ($\bar{\epsilon}$) МДС (в наближенні Максвелл-Гарнетта) з такими включеннями можуть бути розраховані за допомогою формул (1)-(4).

Наведемо деякі результати чисельних розрахунків. Розглянемо окрему біметалеву кульову частинку, яка складається із срібного ядра і золотої оболонки. Для опису діелектричної проникності срібла і золота використовуємо модель Друде

$$\epsilon = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (11)$$

де ω_p — плазмова частота для суцільного матеріалу, γ — частота поглинання. В розрахунках прийнято, що для срібла $\epsilon_\infty = 4,5$, $\gamma_p = 0,24 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, а для золота $\epsilon_\infty = 10,0$, $\gamma_p = 0,34 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$ (i — уявна одиниця) [1-3]. На рис.2 показана спектральна залежність уявної частинки безрозмірної поляризованості $\alpha^* = \alpha/(4\pi a^3)$ кульової частинки із срібним ядром та золотою оболонкою при деяких значеннях об'ємного заповнення $f = (r_1/r_2)^3$ (зовнішній радіус частинки $a = r_2$ зберігався незмінним). Для оточуючого середовища

прийнято значення діелектричної проникності $\epsilon_\infty = 1,7$.

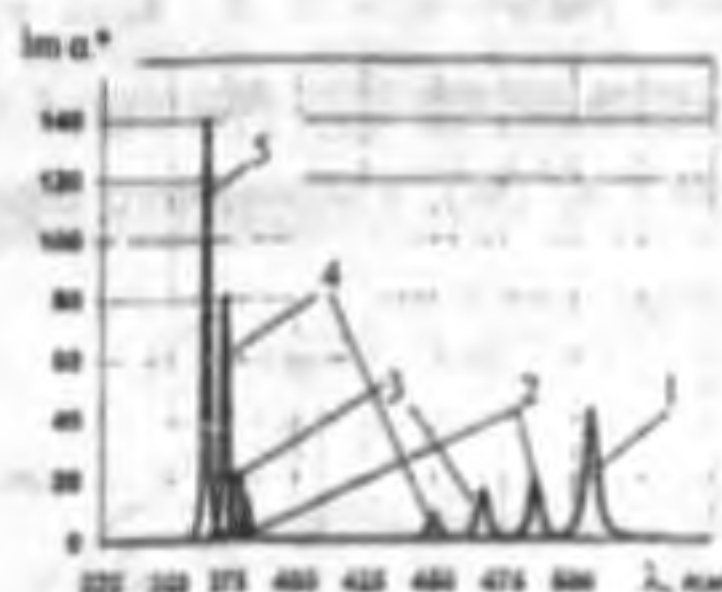


Рис.2. Спектральна залежність уявної частинки безрозмірної поляризованості $\alpha^* = \alpha/(4\pi a^3)$ кульової частинки із срібним ядром та золотою оболонкою при різних значеннях об'ємного заповнення $f = (r_1/r_2)^3$: 1 — $f = 0$ (суцільна золота частинка); 2 — $f = 0,25$; 3 — $f = 0,5$; 4 — $f = 0,75$; 5 — $f = 1$ (суцільна срібна частинка)

З наведеного графіку випливає, що наявність оболонки призводить до розщеплення величини довжин хвиль поверхневих плазмонів. Так в проміжку довжин хвиль між $\lambda_{Au} = 366 \text{ нм}$ (довжина хвилі поверхневого плазмону суцільної срібної частинки) і $\lambda_{Ag} = 506 \text{ нм}$ (довжина хвилі поверхневого плазмону суцільної золотої частинки) спостерігаються два максимума, розташованих між вказаними граничними значеннями. При цьому абсолютні значення максимумів суттєво зменшуються. Оскільки поглинання в електростатичному наближенні пропорційно $\text{Im } \alpha$, то максимуми поглинання на окремій частинці будуть повторювати залежності, які наведені на рис.2.

2. Ефективна діелектрична проникність матричних дисперсних систем з двошаровими кульовими включеннями

Розглянемо МДС, що складається з N — частинок, які розміщені в об'ємі V і знаходяться в зовнішньому однорідному електричному полі $E_0(r, t) = E_0(\omega)e^{-i\omega t}$ (рис. 3). В цьому розділі потенціали в шарах будемо позначати через ϕ і використовувати векторну символіку. В електростатичному наближенні поле $E(r)$ в довільній точці знаходиться із співвідношення $E(r) = -\text{grad}\phi(r)$, де $\phi(r)$ задовольняє

рівнянню Лапласа. Самі частинки системи є двошаровими кулями з наступними параметрами: зовнішній радіус кулі є b_i , ядра кулі - a_i , діелектрична проникність ядра кулі є $\epsilon_i^{(i)}(\omega)$, її оболонки - $\epsilon_i^{(o)}(\omega)$, а оточуючого середовища - ϵ_0 .

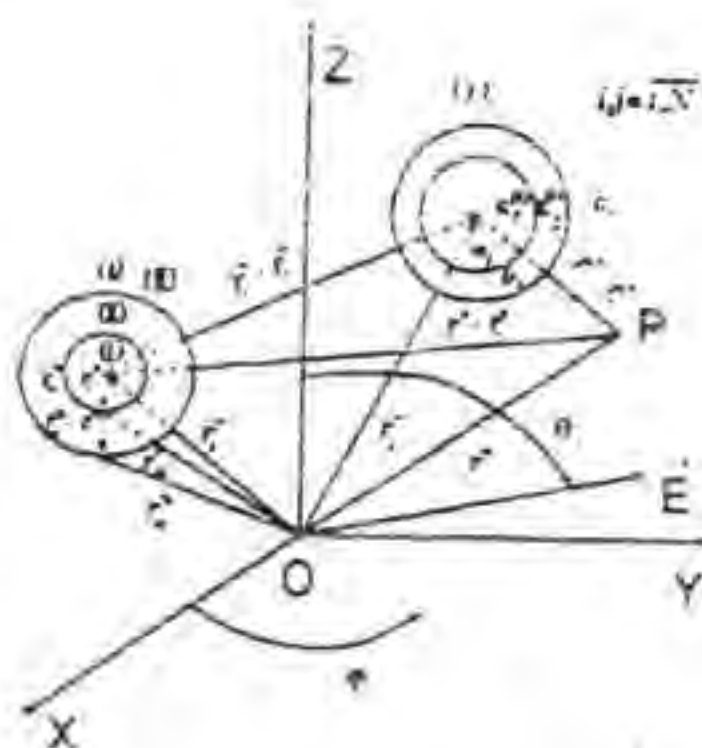


Рис. 3. Просторове розміщення двошарових куль

Виходячи із симетрії задачі, розв'язок рівняння Лапласа з центром на частинці з номером i можна записати у вигляді [5,6]:

для ядра частинки

$$\varphi_i^{(i)} = -E_0 \sum_{lm} A_{lm}^{(i)} |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{lm}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i), \quad (12)$$

для оболонки частинки

$$\varphi_i^{(o)} = -E_0 \sum_{lm} \left[C_{lm}^{(o)} |\vec{r} - \vec{r}_i|^l + \frac{D_{lm}^{(o)}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^{l+1}} \right] Y_{lm}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i), \quad (13)$$

для зовнішнього середовища

$$\varphi_i^{(m)}(\vec{r}) = -E_0 \sum_{lm} \alpha_{lm}^{(i)} |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{lm}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i) - \bar{E}_0 \sum_{lm} \frac{B_{lm}^{(i)}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^{l+1}} Y_{lm}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i) - \bar{E}_0 \sum_{lm} \frac{B_{lm}^{(i)}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^{l+1}} Y_{lm}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i), \quad (14)$$

де $Y_{lm}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i)$ сферичні функції,

$$\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i = \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|}.$$

В рівнянні (14) перший член є потенціал зовнішнього поля (розкладений за сферичними гармоніками з центром $\vec{r}_i$) в точці спостереження P ; другий член є потенціал, який створює i -та частинка внаслідок її поляризації в точці P ; а третій - сума потенціалів, які створюють $N-1$ інших частинок в тій же точці. Відмітимо, що

при написанні (12) - (14) було враховано регулярність потенціалу $\varphi_i^{(i)}$ в центрі i -ї кулі та потенціалу $\varphi_i^{(m)}(\vec{r})$ на нескінченності. Для знаходження сталих $A_{lm}^{(i)}, B_{lm}^{(i)}, C_{lm}^{(i)}, D_{lm}^{(i)}$ розв'язки повинні задовольняти граничним умовам [3]:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(i)}|_{r=a_i} &= \varphi_i^{(o)}|_{r=a_i}; \quad \epsilon_i^{(i)}(\vec{n}_i, \text{grad} \varphi_i^{(i)})|_{r=a_i} = \epsilon_i^{(o)}(\vec{n}_i, \text{grad} \varphi_i^{(o)})|_{r=a_i}, \\ \varphi_i^{(o)}|_{r=b_i} &= \varphi_i^{(m)}|_{r=b_i}; \quad \epsilon_i^{(o)}(\vec{n}_i, \text{grad} \varphi_i^{(o)})|_{r=b_i} = \epsilon_0(\vec{n}_i, \text{grad} \varphi_i^{(m)})|_{r=b_i}, \end{aligned} \quad (15)$$

де вектори $\vec{r}_{Si}$ і $\vec{r}_{Si}'$ показані на рис. 3, причому вектори $\vec{r}_{Si} - \vec{r}_i$ та $\vec{r}_{Si}' - \vec{r}_i$ паралельні зовнішній нормалі $\vec{n}_i$; $|\vec{r}_{Si} - \vec{r}_i| = a_i$, $|\vec{r}_{Si}' - \vec{r}_i| = b_i$.

Оскільки сферичні гармоніки в третьому доданку (14) центровані на j -му центрі, то безпосередньо задовольнити умовам (15) неможливо - потрібно здійснити перехід на i -й центр. Для цього скористаємося теоремами додавання для сферичних гармонік, одна з яких при $|\vec{r} - \vec{r}_i| < |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$ дає [6, 8]:

$$\frac{Y_{lm}(\vec{r} - \vec{r}_j)}{|\vec{r} - \vec{r}_j|^{l+1}} = \sum_{l'm'} \alpha_{l'm'}^{lm} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \vec{r} - \vec{r}_i' Y_{l'm'}(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}_i), \quad (16)$$

де

$$\alpha_{l'm'}^{lm}(\vec{r}_j - \vec{r}_i) = \frac{Y_{l'm'}(\hat{\vec{r}}_j - \hat{\vec{r}}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^{l+1}} (-1)^{l-m} \left[\frac{4\pi(2l+1)}{(2l+1)(2l+2l+1)} \right] K_{l'm'}^{lm}, \quad (17)$$

$$K_{l'm'}^{lm} = K_{l'm'}^{lm} = \left[\frac{(l+l'+m-m')! (l+l'+m-m')!}{(l+m)! (l-m)! (l+m)! (l-m)!} \right]^{1/2}. \quad (18)$$

Підставляючи розв'язки (12)-(14) в граничні умови (15) та використовуючи співвідношення (16), після деяких перетворень [8], отримуємо систему алгебраїчних рівнянь для невідомих коефіцієнтів $B_{lm}^{(i)}$ (а з ними і $A_{lm}^{(i)}, C_{lm}^{(i)}, D_{lm}^{(i)}$):

$$\frac{B_{lm}^{(i)}}{\alpha_l^{(i)}} + \sum_{j=1}^N \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} B_{l'm'}^{(j)} \alpha_{l'm'}^{(i)}(\vec{r}_j - \vec{r}_i) = -d_{lm}^{(i)}. \quad (19)$$

Тут $d_{lm}^{(i)}$ - коефіцієнти розкладу зовнішнього поля за сферичними функціями, центрованих на i -включенні, а

$$\alpha_l^{(i)} = \frac{B_0^{(i)} \left[\epsilon_i^{(i)}(l+1) + \epsilon_i^{(o)} \right] \left[\epsilon_i^{(o)} - \epsilon_0 \right] + \left(\epsilon_i^{(o)} - \epsilon_i^{(i)} \right) \left[(l+1) \epsilon_i^{(i)} + l \epsilon_0 \right] q_i^{2l+1}}{\left[\epsilon_i^{(o)}(l+1) + \epsilon_i^{(i)} \right] \left[(l+1) \epsilon_0 + l \epsilon_i^{(o)} \right] + l(l+1) \left(\epsilon_i^{(i)} - \epsilon_i^{(o)} \right) \left(\epsilon_i^{(o)} - \epsilon_0 \right) q_i^{2l+1}}, \quad (20)$$

де $q_i = \frac{a_i}{b_i}$, $\alpha_{l'm'}^{lm}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)$ дається формулою (17).

Відмітимо, що після знаходження $B_{lm}^{(i)}$, інші коефіцієнти $A_{lm}^{(i)}, C_{lm}^{(i)}, D_{lm}^{(i)}$ легко знаходяться із граничних умов.

У електростатичному наближенні співвідношення (12)–(14) та (19)–(20) повністю розв'язують задачу знаходження електричного поля в довільній точці простору системи N двошарових куль в зовнішньому полі E_0 з врахуванням прямої мультипольної взаємодії між частинками. Якщо обмежитись в (20) членами порядку $l = l' = 1$, то враховуємо лише дипольну взаємодію між ними, обмежуючись членами $l = l' = 2$ – квадрупольну і т.д.

Відмітимо, що $\alpha_i^{(l)}$ є поляризованість i -ї частинки порядку l в полі E_0 . При $l=1$ (дипольна поляризованість) формула (31) переходить в формулу (5.36) монографії [3] при $q_i = 0$. Порівнюючи співвідношення (19) та (20) з відповідними співвідношеннями робіт [5,6] можна помітити, що відмінність системи рівнянь (19) для знаходження $B_{lm}^{(i)}$ у випадку МДС з двошаровими включеннями відрізняються від подібних співвідношень для МДС з одношаровими кульовими включеннями лише значенням l -польної поляризованості ($\alpha_i^{(l)}$). Іншими словами, для знаходження $\tilde{\epsilon}$ такої МДС ми можемо відразу скористатися формулами робіт [5,6], замінивши в них $\alpha_i^{(l)}$ на вираз (20). Тоді можна відразу знайти $\tilde{\epsilon}$ для МДС з двошаровими сферичними включеннями з врахуваннями лише парної диполь-дипольної взаємодії між ними та їх розподілу за розмірами (сумування по k, p)

$$\frac{\tilde{\epsilon} + 2\epsilon_0}{\tilde{\epsilon} - \epsilon_0} = \frac{1}{\frac{4}{3} \sum_k n_k \alpha_k^{(1)}} \frac{1}{\left(\sum_k n_k \alpha_k^{(1)} \right)^2} \quad (21)$$

$$\sum_{k,p} n_k n_p \int_0^{\infty} R_{kp}^2 \phi(R_{kp}) \cdot dR_{kp} \left[\beta_{kp}^{(1)}(R_{kp}) + 2\beta_{kp}^{(2)}(R_{kp}) \right]$$

В (21) $\alpha_i^{(l)}$ дається формулою (20) при $l=1$, $R_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, де $n_k = \frac{N_k}{V}$ є концентрація частинок k -сорту, $\phi(R_{kp})$ – двохчастинкова функція розподілу включень в матриці, яка вибиралась у наступному вигляді [1,2]:

$$\phi(R_{kp}) = \begin{cases} 0, & \text{коли } R_{kp} < b_k + b_p; \\ 1, & \text{коли } R_{kp} \geq b_k + b_p, \end{cases} \quad (22)$$

При врахуванні лише парної дипольної взаємодії ($l = l' = 1$) між включеннями, $\beta_{ij}^{(1)}$ і $\beta_{ij}^{(2)}$ мають вигляд [5,6]:

$$\beta_{ij}^{(1)} = \chi_{10}^{(1)}(R_{ij}) - \alpha_i^{(1)} - 2 \frac{\alpha_i^{(1)} \alpha_j^{(1)}}{R_{ij}^3}; \quad (23)$$

$$\beta_{ij}^{(2)} = \chi_{11}^{(1)}(R_{ij}) - \alpha_i^{(1)} + \frac{\alpha_i^{(1)} \alpha_j^{(1)}}{R_{ij}^3}, \quad (24)$$

де $\chi_{10}^{(1)}(R_{ij})$ та $\chi_{11}^{(1)}(R_{ij})$ (при $l = l' = 1$) легко знаходять із (19) [5,6]:

$$\chi_{10}^{(1)}(R_{ij}) = \frac{1}{2} b_i' \left[\frac{\left(\frac{B_i}{B_j} \right)^{1/2} + \Delta_{ij}^{1/2}}{\left(\frac{1}{B_i B_j} \right)^{1/2} - 2\Delta_{ij}^{1/2} \delta_i'} + \frac{\left(\frac{B_i}{B_j} \right)^{1/2} - \Delta_{ij}^{1/2}}{\left(\frac{1}{B_i B_j} \right)^{1/2} + 2\Delta_{ij}^{1/2} \delta_i'} \right]; \quad (25)$$

$$\chi_{11}^{(1)}(R_{ij}) = \frac{1}{2} b_i' \left[\frac{\left(\frac{B_i}{B_j} \right)^{1/2} + \Delta_{ij}^{1/2}}{\left(\frac{1}{B_i B_j} \right)^{1/2} - \Delta_{ij}^{1/2} \delta_i'} + \frac{\left(\frac{B_i}{B_j} \right)^{1/2} - \Delta_{ij}^{1/2}}{\left(\frac{1}{B_i B_j} \right)^{1/2} + \Delta_{ij}^{1/2} \delta_i'} \right],$$

де $\Delta_{ij} = b_j / b_i$, $\delta_i = b_i / R_{ij}$ і $B_i = \alpha_i^{(1)} / b_i^3$.

З врахуванням вигляду функції $\phi(R_{ij})$ (22) та співвідношень (23)–(24), із (21) отримуємо формулу ефективної діелектричної проникності $\tilde{\epsilon}$ для МДС з двошаровими кульовими включеннями в наближенні парної дипольної взаємодії між ними:

$$\frac{\tilde{\epsilon} + 2\epsilon_0}{\tilde{\epsilon} - \epsilon_0} = \frac{1}{\frac{4\pi}{3} \sum_k n_k \alpha_k^{(1)}} \frac{1}{3 \left(\sum_k n_k \alpha_k^{(1)} \right)^2} \sum_{k,p} n_k n_p \alpha_k^{(1)} \alpha_p^{(1)} \cdot \quad (26)$$

$$\times \left[\left[1 + \frac{b_k^3}{b_p^3} \left(\frac{\alpha_k^{(1)}}{\alpha_p^{(1)}} \right)^{1/2} \right] \ln \frac{(b_k + b_p)^3 + (\alpha_k^{(1)} \alpha_p^{(1)})^{1/2}}{(b_k + b_p)^3 - 2(\alpha_k^{(1)} \alpha_p^{(1)})^{1/2}} + \right. \\ \left. + \left[1 - \frac{b_k^3}{b_p^3} \left(\frac{\alpha_k^{(1)}}{\alpha_p^{(1)}} \right)^{1/2} \right] \ln \frac{(b_k + b_p)^3 - (\alpha_k^{(1)} \alpha_p^{(1)})^{1/2}}{(b_k + b_p)^3 + 2(\alpha_k^{(1)} \alpha_p^{(1)})^{1/2}} \right]$$

Якщо знехтувати в правій частині (26) другим доданком, то одержимо співвідношення Максвелл-Гарнетта для МДС з двошаровими включеннями, що складають собою суміш частинок з гістограмою розподілу як за розмірами, так і за різними електродинамічними характеристиками частинок (різні $\epsilon_{1,2}^{(i)}$). У випадку однакових частинок, із (26) маємо:

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_0 \left[1 + \frac{3fB}{1 - fB - \frac{2}{3}fB \ln \frac{8+B}{8-2B}} \right] \quad (27)$$

$$\begin{aligned} & \text{де } a_1 = a_2 = a, \quad b_1 = b_2 = b; \\ & \varepsilon_1^{(j)} = \varepsilon_1^{(j)} = \varepsilon_1; \quad \varepsilon_2^{(j)} = \varepsilon_2^{(j)} = \varepsilon_2, \quad q = \frac{a}{b}; \\ & B = \frac{a_1}{b^3} = \frac{(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_0) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_0)q^2}{(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(2\varepsilon_0 - \varepsilon_2) + 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_0)q^2} \\ & f = (4/3)\pi b^3 n, \quad n - \text{концентрація включень.} \end{aligned}$$

При $fB \ll 1$, з (27) випливає, що:

$$\frac{\varepsilon_0}{\tilde{\varepsilon}} = 1 - 3fB - 2(fB)^2 \left[\ln \frac{8+B}{8-2B} - 3 \right] + \dots \quad (28)$$

або

$$\frac{\tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_0} = 1 + 3fB + f^2 B^2 \left[3 + 2 \ln \frac{8+B}{8-2B} \right] + \dots \quad (29)$$

З одержаних результатів можна зробити ряд важливих висновків. З вигляду системи рівнянь (19) – (20) випливає, що задача знаходження коефіцієнтів $B_{cm}^{(j)}$, а потім $\tilde{\varepsilon}$ для МДС із складними кульовими включеннями (багат шарові кулі з неоднорідною діелектричною проникністю тощо) повністю еквівалентна задачі знаходження цих коефіцієнтів та $\tilde{\varepsilon}$ для МДС з суцільними кульовими включеннями, але із новим значенням мультипольної поляризованості окремого включення $\alpha_j^{(i)}$. Цей результат випливає з граничних умов (18), оскільки доданки внаслідок мультипольної взаємодії додаються до коефіцієнтів взаємодії включень із зовнішнім полем $d_{lm}^{(i)}$. Аналогічна картина буде спостерігатись і для МДС з більш складною внутрішньою структурою включень. Так для МДС із багат шаровими включеннями для знаходження $\tilde{\varepsilon}$, слід в формулу (26) підставити поляризованість, знайдену в дипольному наближенні за формулою (9).

Слід також відмітити, що розвинений вище метод розрахунку $\tilde{\varepsilon}$ подібних МДС дозволяє враховувати і вищі члени мультипольної взаємодії між включеннями, але при цьому потрібно знати статистичні багаточастинкові (трьох, чотирьох, і т.д.) функції розподілу куль в матриці. На жаль, ці функції на сьогодні точно не відомі, на відміну від точного виразу для двохчастинкової функції [2].

Висновки

Проведено узагальнення теорії Максвелл-Гарнетта розрахунку $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ для МДС з двошаровими кульовими включеннями з врахуванням

парної мультипольної взаємодії між включеннями та розподілу їх за розмірами. Показано, що формула для знаходження $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ у даному випадку має вигляд, аналогічний до випадку МДС з однорідними кульовими включеннями із заміною поляризованості суцільної кулі на поляризованість двошарової кулі. З урахуванням лише диполь-дипольної взаємодії цей висновок має місце і для МДС з багат шаровими кульовими включеннями. Показано, що для МДС з двошаровими включеннями з металевим ядром внаслідок міжчастинкової взаємодії частота поверхневого плазмону розщеплюється на два піки.

Слід відмітити, що ці висновки одержано при використанні електростатичного наближення та при величині ступеня заповнення $f < 0,1$. Крім того, розглянуті спектри поглинання ЕМВ (в основному у видимому діапазоні) металевими включеннями МДС відсутні у відповідних зразках суцільних металів і вони несуть цінну інформацію як про структуру МДС, так і про внутрішню структуру самих включень.

Список використаних джерел

1. Kreibig U. and Vollmer M. Optical Properties of Metal Clusters. - Berlin: Springer, 1995. - 532p.
2. Бенгер У.Ф., Гончаренко А.В., Дмитрук М.Л. Оптика малих частинок дисперсних середовищ. - Київ: Наук.думка, 1999. - 348с.
3. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. - М.: Мир, 1986. - 664 с.
4. Felderhof B.U., Ford G.W., Cohen E.G.D. Two-particle cluster integral in the expansion of the dielectric constant // J. Stat. Phys. - 1982. - 28, № 4. - P. 649-672.
5. Grechko L.G., Levandovskii V.G., Ogenko V.M., Pinchuk A.N. Effective dielectric function of metallic particles aggregates // Proc. SPIE. - 1996. - 3055. - P.111-117.
6. Grechko L.G., Pustovit V.N., Whites K.W. // Appl. Phys. Lett. - 2000. - 76, №14. - P.1854-1856.
7. Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Водоп'янов Д.Л., Шостак С.В. Поляризованість структурно-неоднорідних кульових частинок // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. - 2007. - № 1. - С. 416 - 425.
8. Cruzan O.R. Translational addition theorems for spherical vector wave functions // Quart. Appl. Math. - 1962. - Vol.20. - P.33-40.
9. Гречко Л.Г., Школа Н.Г., Шостак С.В. Ефективна діелектрична проникність матричних дисперсних систем з двошаровими кульовими включеннями // Український фізичний журнал. - 2002. - Т.47, №7. - С.694-698.

Надійшла до редколегії 15.09.2009р

УДК 519.9

Булавін Л.А. д.ф.м.н., проф., Вербінська Г.М.,
к.ф.м.н., Загородня О.А. к.ф.м.н.,
Перепелиця С.М. к.ф.м.н., Вареня О.Г.,
Кравцова Т.А. студ.

Визначення енергії взаємодії між водою та молекулами ДНК методом випаровування

Був розвинений метод для вивчення зовнішньої гідратної оболонки ДНК за допомогою вимірювання швидкості випаровування краплин системи вода - ДНК і порівняння її з результатами для краплин чистої води. Результати показали, що швидкість випаровування краплин системи вода - ДНК менша у порівнянні з краплинами чистої води. Було встановлено, що енергія взаємодії між поверхневими молекулами води і молекулами ДНК збільшується зі збільшенням концентрації молекул ДНК в системі та становить від 10 до $60 \cdot 10^{-23}$ Дж.

Ключові слова: швидкість випаровування молекули, ДНК, краплі води, взаємодія ДНК з молекулами води.

1. Introduction

Starting with the early works of Franklin [1] the water and counterions are known to be very important in the formation of the DNA double helix. Water molecules with counterions form the ion-hydrate shell around DNA macromolecule stabilizing the structure of the double helix. The amount of water in the hydrate shell determines the double helix conformation and dynamical properties. The investigation of interaction between water and DNA molecules is very important for both determination of the mechanisms of DNA biological functioning [2,3] and technical applications [4,5].

It has been showed that there are, at least, 3 hydrated shells near the DNA molecule [2,3]. The first hydrated shell consists of about 20 water molecules per nucleotide directly interacting with the atomic groups of the double helix. The number of water molecules depends on counterions that neutralize the negatively charged atomic groups of the double helix [3]. The strongest connection both for water molecules and counterions is observed with free oxygen atoms of phosphate groups of DNA backbone, oxygen atoms of deoxyribose and nitrogenous bases. The second hydrated shell

L.A. Bulavin Dr. Sci., Prof., G.M. Verbinska Ph.D.,
O.A. Zagorodnia Ph.D., S.M. Perepelytsia Ph.D.,
O.G. Varenia, T.A. Kravtsova stud.

Determination of the interaction energy between water and DNA molecules based on the evaporation method

The method has been developed for studying the external hydrated shell of DNA through measuring the evaporation rate of droplets of DNA water solution and comparing it with the results for pure water droplets. The results have showed a decrease in evaporation rate of DNA water solution drops as compared with that of pure water drops. Energy of interaction between surface water molecules and DNA molecules has been established to increase as DNA concentration grows and has been estimated to be within the range from 10 to $60 \cdot 10^{-23}$ J.

Key Words: evaporation rate, DNA molecules, water drops, interaction of DNA and water molecules.

consists of water molecules connected with the DNA double helix through water molecules from the first shell. The third hydrated shell is treated as the intermediate layer between the bulk water and the ion-hydrated shell of macromolecules.

The properties of the water molecules of ion-hydrate shell are strongly different from the properties of bulk water. Hydrated water is structured, but under the temperature lower than 0 °C the water of both first and second shells does not freeze. The relaxation time of water molecules near DNA surface ($\sim 10^{-9}$ s) is much lower than in the bulk state ($\sim 10^{-11}$ s) that is due to the interaction of the water molecules with DNA macromolecule [6]. The information about interaction energy between water and DNA is necessary for determination of the dynamics of water molecules near the surface of the double helix.

In this paper we present new experimental method for the determination of interaction energy between water and DNA molecules. This method is based on study of evaporation of the DNA water solution drops. Using obtained experimental values of velocities of drop evaporation the interaction energy is estimated for different concentrations of DNA.

2. Experiment

The experimental method is based on measuring the evaporation rate of droplets of DNA water solution and comparing it with the results for pure water droplets. The samples of DNA water solutions are prepared according to the methodology develop in [7]. The DNA sodium salt from calf thymus with molecular weight of 10^7 a. u. m. has been used. The dry DNA is dissolved in distilled water to concentration of 0,3 % (by weight) and then is treated by ultrasound with the frequency of 22 kHz during one minute. The obtained solution is dissolved to the concentrations 0.001%, 0.01, 0.03, 0.075, 0.1, 0.125 and 0.15% of DNA mass in the solution.

The drop is fixed on the hanger with the help of sterile syringe and is pictured with video camera every 30 second (Fig.1). Then, with the use of special program the pictures are processed to obtain the rate of decrease in the drop's surface area. The measurements are made under the identical external conditions (constant temperature, humidity and pressure of environment).

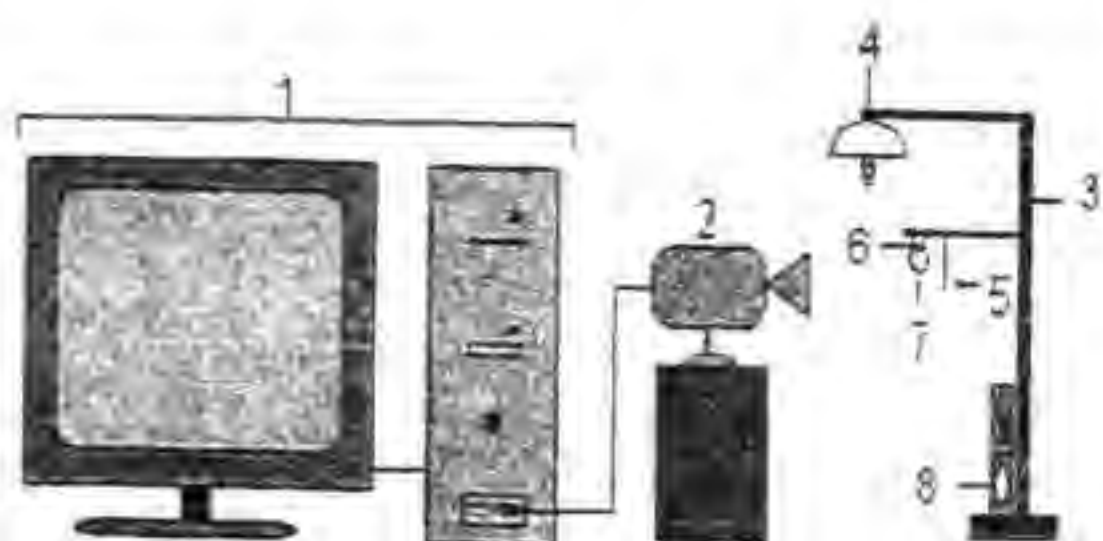


Fig. 1 The experimental arrangement: 1-PC; 2-video camera; 3-rack; 4-lamp; 5-reference bar ($d=0.9\text{mm}$); 6-hanger; 7-droplet; 8-thermometer and humidity meter.

3. Results

Using the described experimental technique we measure the dependence of the surface area of drop on time. The first we measure pure water drop (Fig.2). The obtained dependence of drop area of on

time is linear that correspond to existing experimental data for pure water.

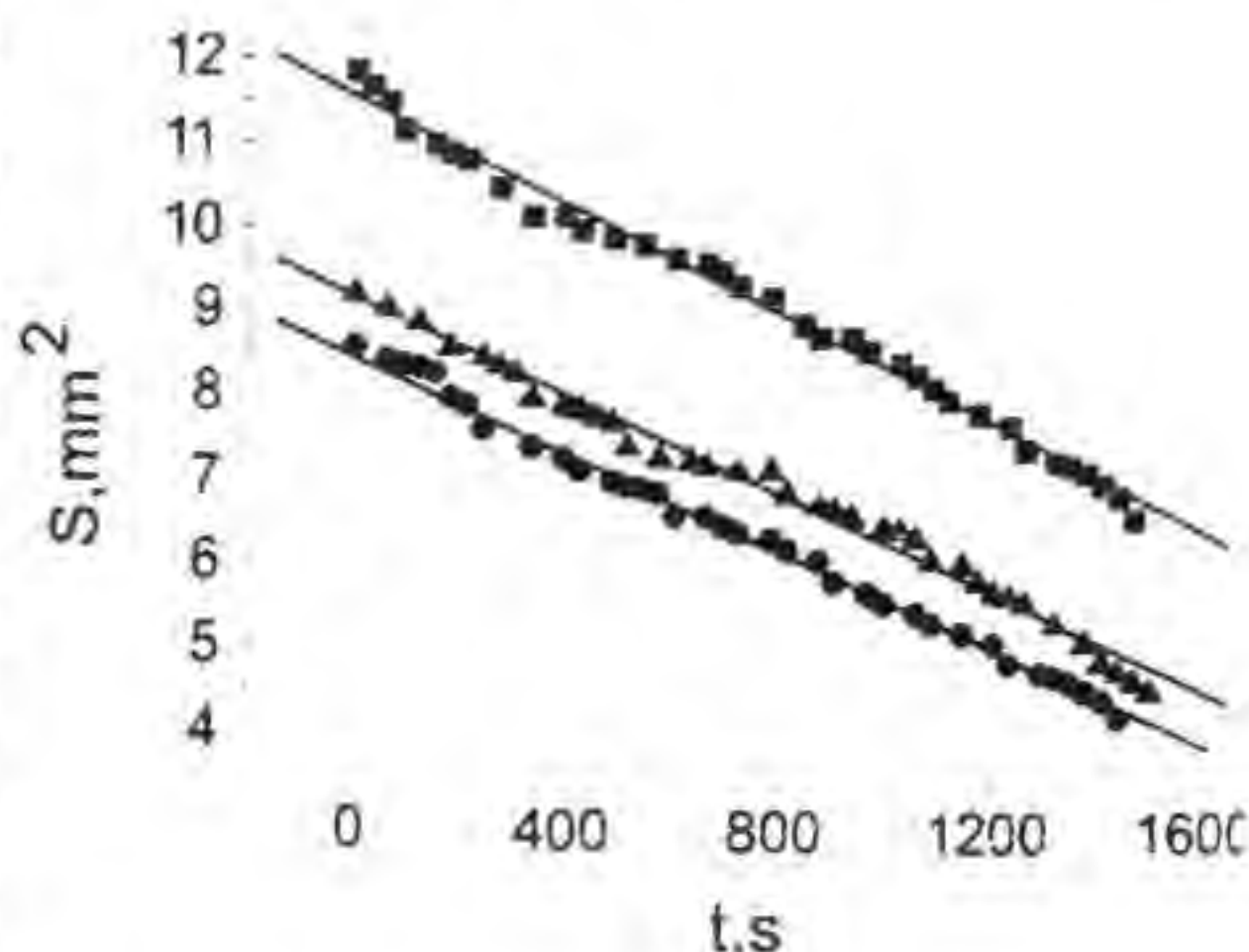


Fig.2. Time dependence of surface area of pure water drops (three measurements).

Than we have made similar measurements for solution drops with different DNA concentration. The obtained time dependences for DNA drops are also linear, but the slope angles are different that indicate to the difference in velocities of drop evaporation. In the figure 3 we show time dependence of drop area only for one concentration of DNA, since dependences have the similar character.

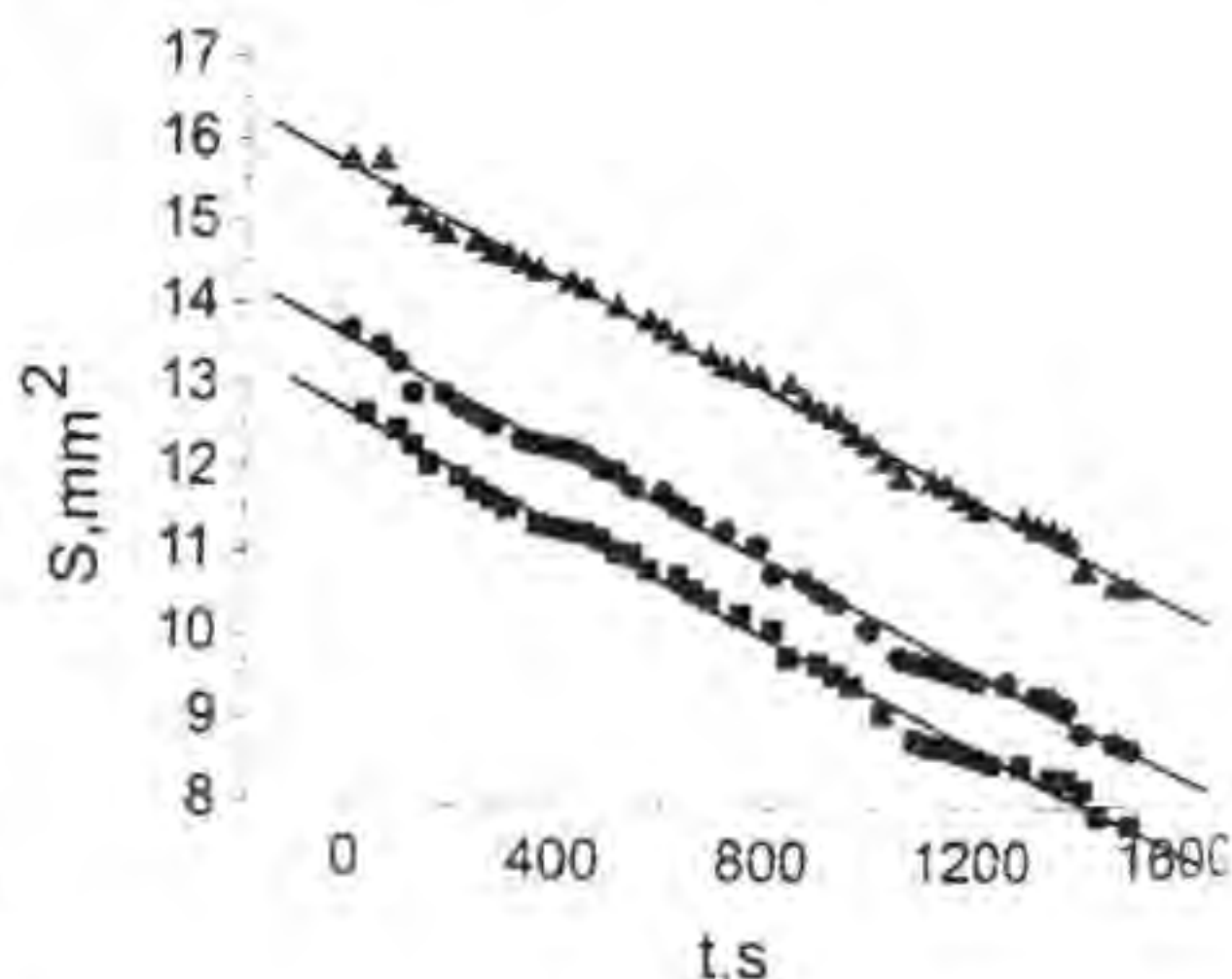


Fig.3. Time dependence of surface area of DNA-water drops (DNA concentration is 0.075%).

Having analyzed the obtained experimental data we determine the dependence of evaporation rates of DNA-water drops on concentration of DNA in the solution (Fig.4).

As seen from the figure 4 that the evaporation rates of DNA-water drops decreases as the concentration of DNA increases. This means that the energy of interaction between water and DNA macromolecules increases as the concentration of DNA increases.

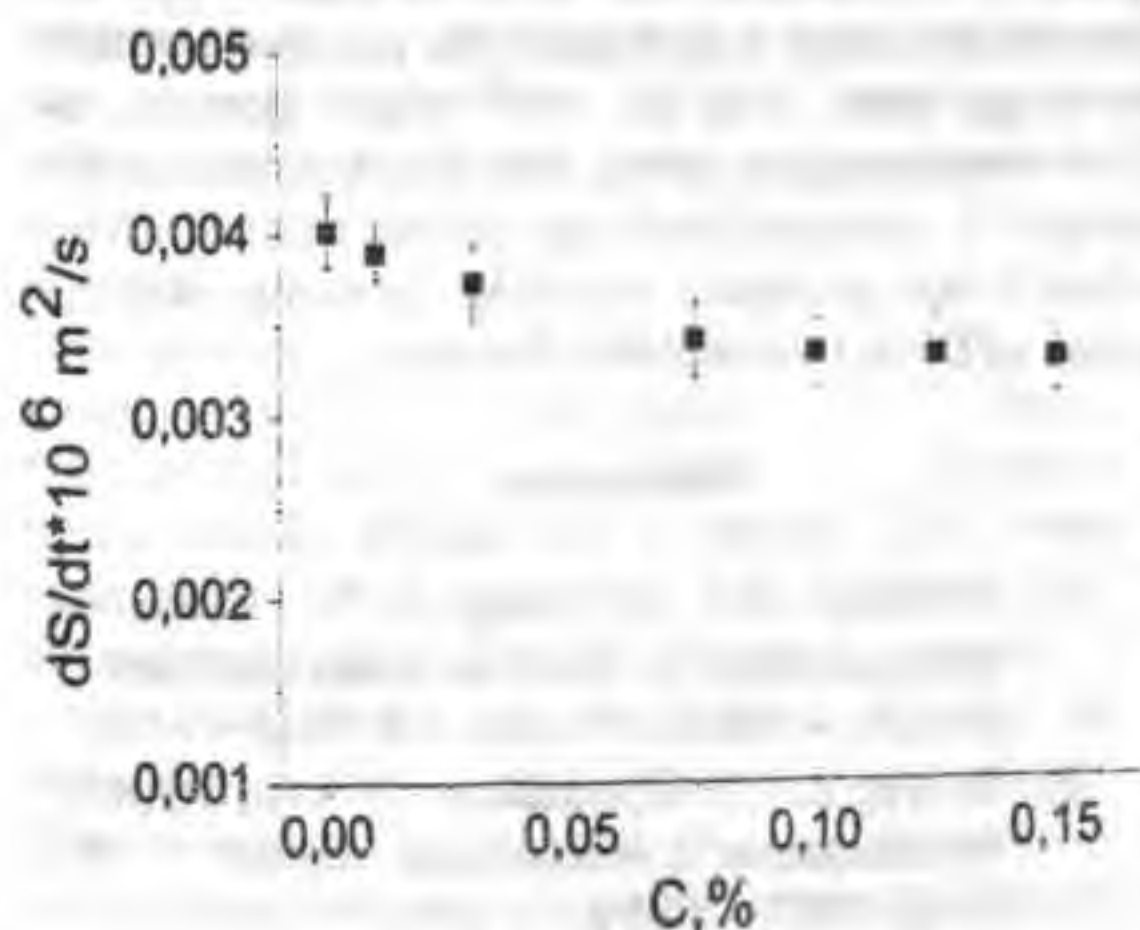


Fig.4. Evaporation rates of DNA-water drops of various concentrations

4. Interaction energy between water and DNA molecules

To determine the interaction energy between water and DNA molecules let us consider the evaporation processes. The number of water molecules leaving the surface of pure water drop may be described by Boltzmann distribution function. For pure water drop it may be written as follows:

$$N = N_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (1)$$

where N_0 is a number of water molecules in the surface of the water drop, E is the energy of interaction of some water molecule with the other

molecules in drop, k is the Boltzmann constant, and T is a temperature.

The distribution of water molecules in the surface of DNA-water drop may be written analogically:

$$N_D = N_0 \exp\left(-\frac{E + E_D}{kT}\right), \quad (2)$$

where E_D is the energy of interaction of some water molecule with DNA molecules in drop. Solving the system of equations (1) and (2) with respect to E_D the following formula is obtained:

$$E_D = kT \ln \frac{N}{N_D}. \quad (3)$$

The number of water molecules leaving the surface of drop may be determined with the help of evaporation rates. Taking into consideration that evaporation rate describes the change of drop surface area with time the following formula for N and N_D may written:

$$N = v t / S, \quad N_D = v_D t / S, \quad (4)$$

where v is the evaporation rate of pure water drop; v_D is the evaporation rate of DNA-water drop; S is the characteristic area of water molecule; vt describes the surface area of drop at the moment (Fig.5).

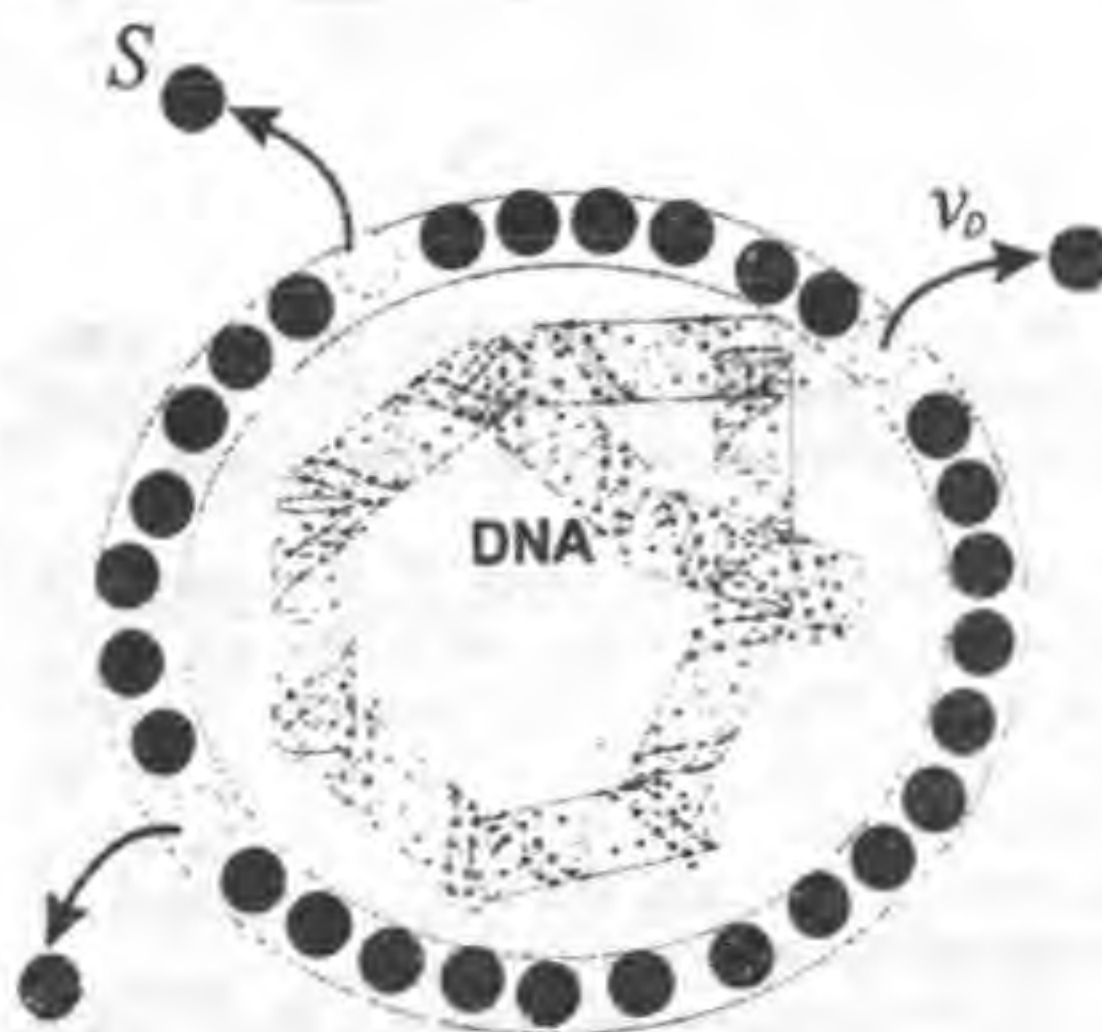


Fig.5. Dynamics of drop evaporation. S is a characteristic area of water molecule. v_D is the evaporation rate.

Substituting the formulae (4) to the formula (3) we obtain the equation for the energy of interaction of some water molecule with DNA molecules in drop in a following form:

$$E_D = kT \ln \frac{v}{v_D} \quad (5)$$

Using the evaporation rates determined experimentally in previous section (Fig. 4) and obtained formula (5) the interaction energy of water with DNA molecules in drop is determined for different DNA concentrations. The results of calculations show that the energy of interaction depends on DNA concentrations and decreases as concentration increases (Fig.6)

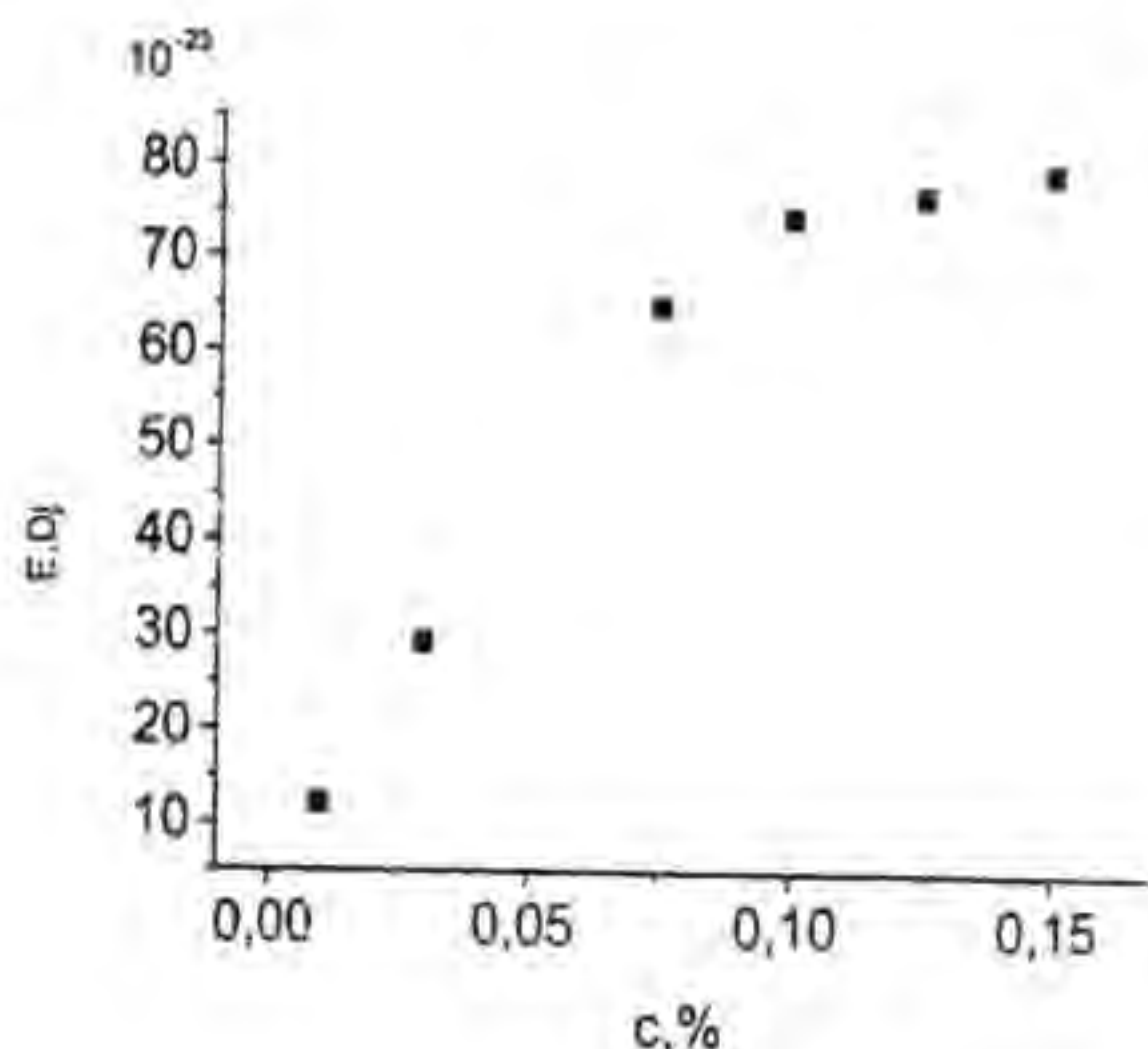


Fig.6. Energy of interaction between water molecules at the drop's surface and DNA molecules for various DNA concentrations in the solution.

As seen from the figure 6 the energy of interaction between water molecules and DNA increases as DNA concentration increases. The order of obtained energy values is the same as for the water molecules of DNA hydration shell [6]. Hence, we may conclude that the DNA coils should be located near the surface of the drop.

The investigation of the location of the DNA coil in water drop [4,5] has been also shown that the DNA macromolecule is located near the surface of the drop. This may be explained taking into consideration that there exists electrostatic repulsion

between DNA molecules. Therefore, the location of DNA near the drop surface is energetically favorable.

6. Conclusions

New experimental method for the determination of interaction energy between water and DNA molecules is developed. This method is based on study of evaporation of the DNA water solution drops.

The results show that the evaporation rate of DNA-water drops decreases as DNA concentration increases in the solution and is lower than that of pure water drops. Using obtained experimental values of evaporation rate of DNA-water drops the interaction energy is estimated. Its values are within the range from 10 to 60 $\cdot 10^{-23}$ J and increases as DNA concentration grows. For dilute solutions the energy is proportional to DNA concentration, whereas for saturated solutions its value slightly grows as DNA concentration increases.

References

1. Franklin R.E, Gosling R.G., Molecular configuration in sodium thymonucleate // *Nature*. – 1953. – V. 171. – P. 7440 – 7441.
2. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – М.: Мир, 1987. – 584 с.
3. Малеев В.Я., Семенов М.А., Гасан А.И., Кашпур В.А. Физические свойства системы ДНК-вода // *Биофизика*. – 1993. – Vol. 38, № 5. – P. 768 - 790.
4. Dugas V., Broutin J., Souteyrand E. Droplet evaporation study applied to DNA ship manufacturing // *Langmuir*. – 2005 №21 (20). – P.9130 - 9136.
5. Xiaohua Fang, Bingquan Li, Petersen Eric et al. Drying of DNA droplets// *Langmuir*. – 2006, - Vol. 22, №14, - P.6308 - 6312.
6. Гасан А.И., Вирник К.М., Шестопалова А.В., Малеев В.Я. Динамические свойства воды, связанной на матрицах природных ДНК и модельных комплексов // *Биофизика*. – 2002. – Т. 47. – С. 245 – 252.
7. Булавін Л.А., Волков С.Н., Кутовий С.Ю., Перепелиця С.Н. Спостереження моди іон-фосфатних коливань макромолекули ДНК // *Доп. НАН України*. – 2007. – № 10. – С. 69-73.

Надійшла до редколегії 1.10.2009р

УДК 535.373.2

Головач Г. П., к.ф.-м.н., доцент
Яшук В.М., д.ф.-м.н., професор
Науменко А.П., к.ф.-м.н.
Васильюк С. В.

G. P. Golovach, PhD in Physics and Mathematics,
Associate Professor,
V. M. Yaschuk, Dr.Sci (Phys.-Math.), Professor
A. P. Naumenko, PhD. in (Phys.-Math.),
S.V. Vasylyuk

Розрахунок проходження електронного збудження через макромолекулу.

The calculations of the electronic excitation passing through a macromolecule.

Розглянуто модель функціональної макромолекули, що має властивість направлено перенесення триплетних електронних збуджень. Така властивість забезпечується заданою ієрархією електронних рівнів ланок макромолекули, що в даному випадку являє собою блок -кополімер, побудований на фрагментах ДНК - послідовність чотирьох триад (CCCGGGTTTAAA). Після генерації триплетного збудження в триаді CCC воно поступово «скочується» в бік триади AAA, здійснюючи випадкові блукання в кожній із триад. Побудовано алгоритм цього процесу та здійснено його комп'ютерну симуляцію. Представлено програму розрахунку екситонного струму на «виході» молекулярного ланцюжка.

The model of the functional macromolecule that possesses the properties of the unidirectional transfer of the triplet electronic excitations was examined. This property based on determined order of the energy levels system of the macromolecular cells. The macromolecule is the block-copolymer built from the DNA-fragments – CCCGGGTTTAAA. Being generated in CCC sequences the triplet excitations gradually «fall down» to AAA sequence, it realize random walks in every triad of the DNA fragments. The algorithm of these processes was designed and correspondent computer simulations were realized.

Key Words: nanoelectronics, electronic excitations transfer, functional macromolecules, excitonic current, computer simulations.

Ключові слова: наноелектроніка, перенесення електронних збуджень, функціональні макромолекули, екситонний струм, комп'ютерна симуляція.

*E-mail: vmvashchuk@univ.kiev.ua

1 Вступ

Одною з основних проблем наноелектроніки є розробка (дизайн), синтез та тестування базових елементів. Такими елементами можуть бути спеціально сконструйовані функціональні молекули, нанокластери, макромолекули або ж функціональні молекулярні ансамблі.

Співавтором даної роботи Яшуком В. М. як базовий елемент наноелектроніки була запропонована модель функціональної макромолекули [1,2], ієрархія енергетичних рівнів ланок якої забезпечує переважно односторонній рух електронних збуджень (триплетних екситонів) вздовж макромолекули.

Синтез такої макромолекули виявився надзвичайно складним. Над ним працювала

кафедра хімії високомолекулярних сполук під керівництвом Сиромятнікова В. Г. (Савченко І. О., Колендо О. Ю., Вретік Л. М.). Їм вдалося отримати декілька дволанкових сполук з необхідним розташуванням синглетних та триплетних рівнів [3,4]. Успішне спектральне тестування їх функціональності було здійснено на кафедрі експериментальної фізики Огульчанським Т. Ю. та Кудрею В. Ю. [2]

Наступним кроком був синтез сполуки з трьома ланками, здійснений в Інституті Молекулярної Біології та Генетики Дубасю І. Я. з трьох фрагментів ДНК [5], та нарешті, поки що неперевершений крок здійснив японський хімік Hiro-Shuga, який синтезував макромолекулу з дванадцятьма ланками.[6]

Оцінки направленого стуму екситонів у вказаних вище макромолекулах досить оптимістичні [1,2,7].

Однак, детальне врахування зворотних струмів, та процесів випадкових блукань в молекулярних структурах, в яких (в дванадцяти ланковій сполуці Hiro-Shuga) реалізована кополімер - блочна структура, виявилось досить складним.

Співавтором даної роботи Головачем Г.П. вперше запропоновано комп'ютерно-чисельний метод розрахунку електронних процесів в таких структурах [8].

Правильність запропонованого методу підтверджено спектральними дослідженнями, що дають можливість здійснювати тестування функціональності молекулярних сполук [8, 9].

У статті докладно описується рух збудження у макромолекулі та наводяться програми для його розрахунку на мовах MAPLE і Mathematica.

1.1 Стенд поширення збуджень

Нехай є кополімерна макромолекула, що містить N ланок з різними значеннями ймовірностей деактивації (α_i) та різними ймовірностями передачі збудження до сусідніх ланок: до ланки праворуч – b_i ; до ланки ліворуч – s_i , причому:

$$s_i = b_i e^{-d_i}, \quad d_i = \left(\frac{\Delta E}{kT} \right)_i, \quad i = \overline{1, N}. \quad (1)$$

На кожній ланці виконується рівність

$$\alpha_i + \beta_i + s = 1. \quad (2)$$

При русі збудження зліва направо працюють коефіцієнти b_i , а при русі у зворотному напрямку – s_i . Оскільки $s_i \leq b_i$, то у підсумку виявляється, що саме коефіцієнти d_i , пов'язані з домінуючим рухом збудження до правого кінця макромолекули. Крім цього, слід звернути увагу ще на те, що перша ланка не пропускає збудження ліворуч і при відбитті від себе лише частково гасить його з коефіцієнтом $b_1 = 1 - \alpha_1$.

Таким чином, якщо навіть всі $d_i = 0$, то завдяки першій ланці збудження все таки буде рухатися до правого кінця макромолекули.

Тепер прослідкуємо за рухом збудження. Нехай в першій ланці (крайня ланка макромолекули з лівого боку) виникає збудження (наприклад, за рахунок поглинання фотону)

Тоді ймовірність передачі його на другу ланку (праворуч) буде дорівнювати:

$$u(1) = b_1 = 1 - \alpha_1.$$

Ймовірність передачі збудження в другій ланці:

$$u(2) = b_1 b_2, \quad b_2 = (1 - \alpha_2) / (1 + e^{-d_2}).$$

Аналогічно знаходимо

$$u(3) = b_1 b_2 b_3, \quad b_3 = (1 - \alpha_3) / (1 + e^{-d_3})$$

і т. д.,

$$u(N-1) = b_1 \dots b_{N-1}. \quad (3)$$

Через N ланок збудження пройде з ймовірністю:

$$b_N u(N-1) = b_1 \dots b_N \quad (4)$$

а сигнал величини

$$u(N) = s_N u(N-1) \quad (5)$$

відіб'ється від N -ї ланки і піде назад.

При переході через ланку номер $N-1$ ймовірність проходження збудження набуде значення

$$u(N+1) = s_{N-1}(u(N) + u(N-2)); \quad (6)$$

причому частина збуджень (6) $s_{N-1}u(N)$ зумовлена їх проходженням $u(N)$ зліва направо, а частина збуджень $s_{N-1}u(N-2)$ зумовлена їх відбиттям $u(N-2)$ від $N-1$ -ї ланки.

При проходженні основного потоку збуджень в бік правого кінця макромолекули на кожній ланці виникає зворотній потік збуджень.

Аналогічно можемо дістати

$$u(N+2) = s_{N-2}(u(N+1) + u(N-3))$$

і т. д.

Ймовірність підходу збудження до першої ланки дістає значення

$$u(2N-2) = s_2(u(2N-3) + u(1)).$$

«Відбиття» збудження від першої ланки («сигнал» після відбиття) відбудеться з ймовірністю:

$$u(2N-1) = b_1 u(2N-2).$$

Далі збудження рухатиметься до правого кінця і ймовірність його досягнення N -ї ланки описується формулою

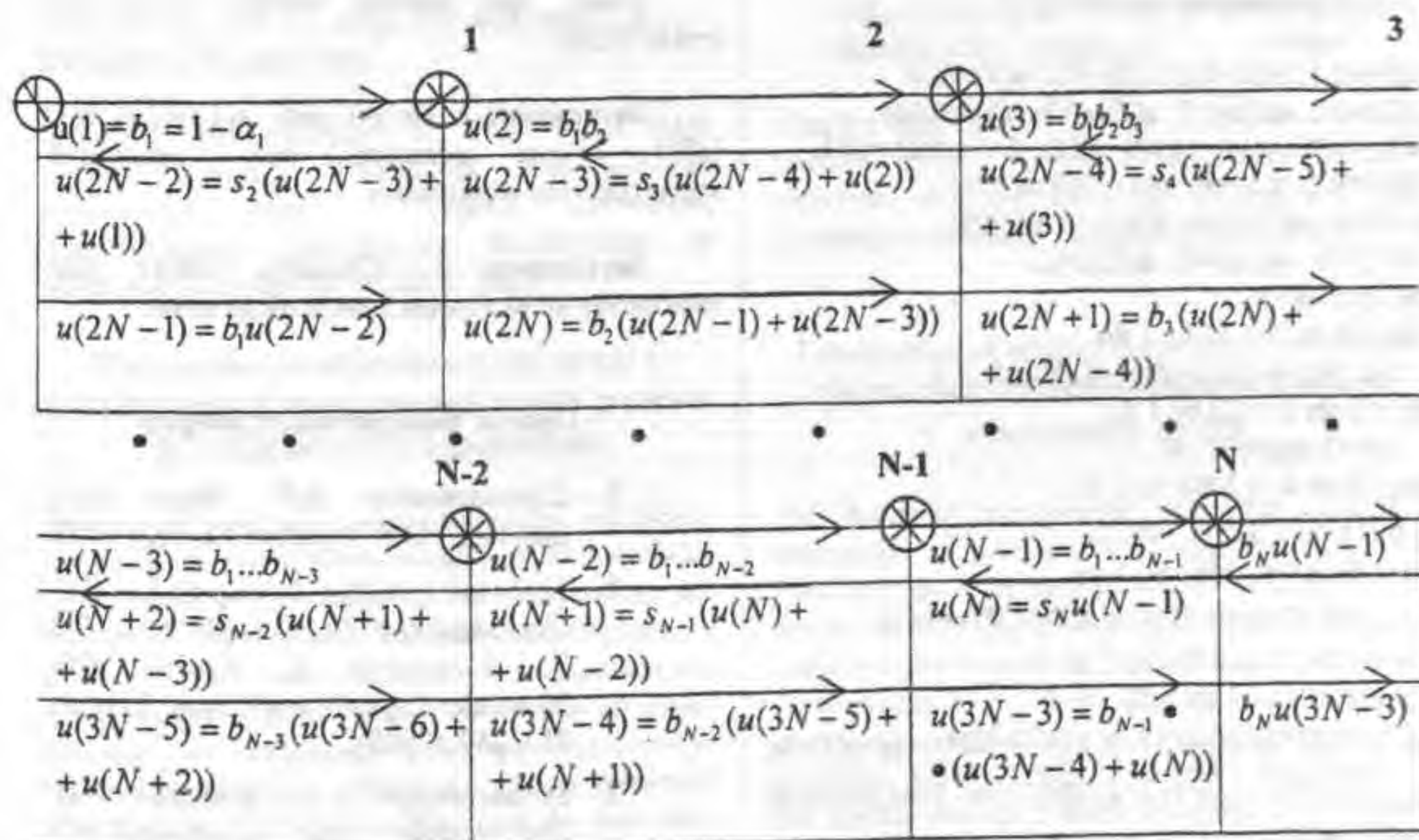
$$u(3N-3) = b_{N-1}(u(3N-4) + u(N)).$$

Нарешті, на виході з макромолекули порція збудження матиме значення $b_N u(3N-3)$.

Процес блукання збуджень по макромолекулі нескінченний.

Підсумовуючи, на виході з макромолекули отримуємо повну ймовірність проходження збудження через макромолекулу.

Процес блукання збудження схематично зображено на стенді [2]



У кожній комірці стенду міститься вираз - певна частка ймовірності проходження збудження. Стрілками показано напрямок руху збудження.

На виході дано тільки ймовірності проходження збудження перших двох «порцій»: $b_N u(N-1)$ і $b_N u(3N-3)$.

1.2. Обчислювальні з формули

Ймовірність виходу збудження з макромолекули можна обчислити за формулою

$$c = b_N \sum_{p=0}^{\infty} U((N-1)(1+2p)).$$

Загальний член ряду буде розв'язком рекурентного рівняння (7)

$$u(n) = q_1(n)u(n-1) + q_2(n)u(2N-1+2(N-1)k-n),$$

де n змінюється від $(N-1)k + N$ та $(N-1)k + 2N - 2$ ($k = \overline{0, \infty}$).

Коефіцієнти рівняння обчислюються за формулами

$$q_1(N+2(N-1)l) = s_N,$$

$$q_1(2N-1+(2N-2)l) = b_1,$$

$$q_2(N+(N-1)j) = 0 \quad (j, l = \overline{0, \infty});$$

$$q_1(N+1+2(N-1)m+i) = q_2(N+1+2(N-1)m+i) = s_{N+i},$$

$$q_1(2N+2(N-1)m+i) = q_2(2N+2(N-1)m+i) = b_{2+i},$$

$$\text{де } (i = \overline{0, N-3}, m = \overline{0, \infty})$$

Початкові умови для рівняння (7) мають вигляд $u(1) = b_1$, $u(r) = b_r u(r-1)$, $r = \overline{2, N-1}$.

Величини α_i та d_i задаються окремо для кожної молекули.

1.3. Приклад

Нехай $N=12$, $d_2 = d_3 = 0$; $d_4 = 5.79$; $d_5 = d_6 = 0$, $d_7 = 2.99$; $d_8 = d_9 = 0$, $d_{10} = 3.92$; $d_{11} = d_{12} = 0$.

Величини α_i вважаються рівними і набувають значень 0.1; 0.01; 0.001; 0.0001; 0.00001.

Запропоновані на MAPLE формули п.1.2 дали відповідні значення сигналів на виході з макромолекули:

0.04392; 0.694549; 0.96344; 0.996274; 0.999626.

1.4. Програма для проведення розрахунків ($N = 12$).

Програма на мові MAPLE.

```
restart;
a(1):=0.1; a(2):=0.1; a(3):=0.1; a(4):=0.4;
a(5):=0.2; a(6):=0.1; a(7):=0.3; a(8):=0.001;
a(9):=0.001; a(10):=0.001; a(11):=0.01; a(12):=0.01;
d(2):=0.1; d(3):=0.; d(4):=0.5; d(5):=1.;
d(6):=5.; d(7):=20.; d(8):=1.; d(9):=3.;
d(10):=0.; d(11):=2.; d(12):=3.;
b(1):=1.-a(1);
for q from 2 to 12 by 1 do
  b(q):=(1-a(q))/(1+exp(-d(q))) od;
for t from 2 to 12 by 1 do
  s(t):=1-a(t)-b(t) od;
for j from 0 to 3003 by 1 do
  q2(12+11*j):=0. od;
for l from 0 to 2002 by 1 do
  q1(12+22*l):=s(12); q1(23+22*l):=b(1) od;
for m from 0 to 2001 by 1 do
for i from 0 to 9 by 1 do
  q1(13+22*m+i):=s(11-i); q2(13+22*m+i):=s(11-i);
  q1(24+22*m+i):=b(2+i); q2(24+22*m+i):=b(2+i) od od;
u(1):=b(1);
for r from 2 to 11 by 1 do u(r):=b(r)*u(r-1) od;
for k from 0 to 3000 by 1 do
for n from 11*k+12 to 11*k+22 by 1 do
  u(n):= q1(n)*u(n-1)+ q2(n)*u(23+22*k-n) od od;
  c:=b(12)*sum(u(11+22*p), p=0..1500);
c;
```

Отже, для даного набору $a(i)$, $d(i)$
 $c=0.07395965$.

Програма на мові Mathematica

```
a[1]:=0.1; a[2]:=0.1; a[3]:=0.1; a[4]:=0.4;
a[5]:=0.2; a[6]:=0.1; a[7]:=0.3; a[8]:=0.001;
a[9]:=0.001; a[10]:=0.001; a[11]:=0.01; a[12]:=0.01;
d[2]:=0.1; d[3]:=0.; d[4]:=0.5; d[5]:=1.;
d[6]:=5.; d[7]:=20.; d[8]:=1.; d[9]:=3.;
d[10]:=0.; d[11]:=2.; d[12]:=3.;
b[1]:=1.-a[1];
Do[b[q]=(1-a[q])/(1+Exp[-d[q]]), {q, 2, 12}];
Do[s[t]=1.-a[t]-b[t], {t, 2, 12}];
Do[q2[12+11*j]=0., {j, 0, 3003}];
Do[{q1[12+22*l]=s[12], q1[23+22*l]=b[1]}, {l, 0, 2002}];
Do[{Do[{q1[13+22*m+i]=s[11-i], q2[13+22*m+i]=s[11-i],
  q1[24+22*m+i]=b[2+i], q2[24+22*m+i]=b[2+i], {i, 0, 9}},
  {m, 0, 2001}];
u[1]:=b[1];
Do[u[r]=b[r]*u[r-1], {r, 2, 11}];
Do[Do[u[n]=q1[n]*u[n-1]+q2[n]*u[23+22*k-n],
  {n, 11*k+12, 11*k+22}], {k, 0, 3000}];
```

Отже, для даного набору $a(i)$, $d(i)$
 $c=0.0739597$.

Зауваження 1. Вхідні дані $a(i)$ ($a[i]$), $d(i)$ ($d[i]$) можна кожного разу змінювати, користуючись терміналом.

Зауваження 2. Кількість членів ряду забезпечує вісім точних знаків після коми.

Список використаних джерел

1. Сиром'ятников В.Г., Яцук В.М., Доповіді НАН України, 12, 56, (1995).
2. Yashchuk V.M.(N.), Syromyatnikov V.G., Ogul'chansky T.Yu., Kolendo A.Yu., Prot T., Blazejowski J., Kudrya V.Yu. Molecular Crystals and Liquid Crystals, 353, 287, (2000).
3. Syromyatnikov V.G., Yashchuk V.M., Ogul'chansky T.Yu., Savchenko I.O., Kolendo O.Yu. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 283, 293, (1996).
4. Ogul'chansky T.Yu., Vretik L.O., Yashchuk V.M.(N.), Syromyatnikov V.G., Kolendo O.Yu. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 324, 223, (1998).
5. Кудря В.Ю., Яцук В.М., Дубей І.Я. Вісник Київського Університету, 4, 39, (2002).
6. Yashchuk V.M.(N.), Kudrya V.Yu., Losytskyi M., Suga N., Ogul'chansky T.Yu. J. Mol. Liq., 127(1-3), 79, (2006).
7. Yashchuk V.M.(N.) Polimery, 44, 475, (1999).
8. Головач Г. П., Яцук В. М. Наукові записки НАУКМА. Сер. фіз.-мат. наук, 21, 56, (2003).
9. V.M.Yashchuk, V.Yu.Kudrya, I.V.Savchenko, G.P.Golovach, I.Ya.Dubey, R.D.Fedorovich, H.Suga, J.V.Grazulevicius Mol. Cryst. Liq. Cryst, 468, 275, (2007).

Надійшла до редколегії 10.10.2009р

УДК УДК 535:537:539:546

Гречко Л.Г., докт. фіз.-мат. наук, проф¹,
Семчук О.Ю., канд. фіз.-мат. наук, ст.н.с.^{1*},
Білокриницька Л.М., канд. фіз.-мат. наук, с.н.с.²,
Стеценко С.В., асистент³.

¹Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, Київ; ²Київський національний університет імені Тараса Шевченка, ³Національний університет біоресурсів та природокористування України, Київ

Взаємодія електромагнітної хвилі з флуктуаціями поверхневих хвиль Релея в фотопружному середовищі

Побудовано теорію некогерентного розсіяння, викликаного взаємодією падаючої електромагнітної хвилі з частотою ω_0 з флуктуаціями поверхневих хвиль Релея на границі ізотропного фотопружного середовища, як за рахунок неоднорідності діелектричної проникності середовища, так і за рахунок фотопружних властивостей середовища. Показано, що в тілесний кут (θ, φ) відбувається відбивання на двох частотах з практично однаковими інтенсивностями. При нормальному падінні зсув по частоті для стоксової та антистоксової компонент не залежить від азимутального кута φ . Крім того, якщо падаюча хвиля природно поляризована, то й коефіцієнт некогерентного відбивання не залежить від цього кута.

Ключові слова: некогерентне розсіювання, електромагнітна хвиля, поверхневі хвилі флуктуації, фотопружне середовище, стоксова та антистоксова компоненти

*E-mail: aleksandr1950@meta.ua

Вступ

Поряд з традиційними методами дослідження поверхні, такими як, наприклад, рентгено-електронна спектроскопія, мас-спектрометрія вторинних іонів, все більш інтенсивно в практику впроваджуються оптичні методи дослідження поверхні. Цей новий напрямок надзвичайно цікавий та перспективний, оскільки він дозволяє встановити зв'язок між оптикою і наукою про поверхню, що зараз інтенсивно розвивається. Оптичні методи мають цілий ряд переваг над іншими методами.

Grechko L.G., Dr.Sc., prof¹,
Semchuk O.Yu., Ph.D., Senior Researcher¹,
Bilokrynitska L.M., Ph.D., Senior Researcher²,
Stetsenko S.V., assistant³.

¹Chuiiko Institute of Surface Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv; ²Taras Shevchenko National University of Kyiv, ³Ukrainian National University of biological resources and use of nature, Kyiv

Interaction of electromagnetic waves with fluctuations of Releya surface waves in photoelastic media

The theory of non-coherent scattering, caused by interaction of falling electromagnetic wave with frequency ω_0 with fluctuations of Releya surface waves on isotropic photoelastic media, both due to dielectric permittivity of media and due to photoelastic properties of media. It is shown that in a cor-poral angle (θ, φ) there is a reflection on two frequencies with practically identical intensities. At the normal falling is there a change on frequency for Stokes and anti-Stokes component not depend from a azimuthally angle φ . In addition, if a falling wave is naturally polarized, the coefficients of non-coherent reflection not depend from this angle.

Key Words: non-coherent scattering, electromagnetic waves, surface waves, fluctuations, photoelastic media, Stokes and anti-Stokes component

По-перше, вони високочутливі та безінерційні; по-друге, вони дають можливість досліджувати швидкопротікаючі процеси і, по третє, оптичні методи стають зовсім незамінними при дослідженні процесів перетворення енергії.

В цьому ряду оптичних методів дослідження поверхні слід відзначити Мандельштам-Бриллюєнівське розсіяння – прекрасний засіб дослідження пружних та фотопружних властивостей матеріалів. Порівняно недавно в цій області було досягнуто значного успіху: Мандельштам-Бриллюєнівське розсіяння спо-

стерігалось в магнетиках [1] непрозорих твердих тілах та тонких плівках [2].

Після експериментальної роботи Мішри та Брея [3], які показали, що розсіяння світла на флуктуаціях поверхні може бути основним механізмом розсіяння світла в напівпровідниках, з'явилася низка теоретичних робіт [4-9], в яких цей ефект був детально розрахований. В цих роботах передбачалось, що флуктуації поверхні виникають із-за збурення поверхневих фононів. Були розраховані амплітуда та спектр флуктуацій, отримано вираз для диференційної потужності, що розсіюється на об'ємних фононах та хвилях Релея та Лемба.

В даній роботі, на відміну від робіт [4-9], розглянуто некогерентне розсіяння електромагнітних хвиль, викликане взаємодією падаючої електромагнітної хвилі з частотою ω_0 з флуктуаціями поверхневих хвиль Релея на границі ізотропного фотопружного середовища, що займає напівпростір $z > 0$. Враховується два механізми взаємодії:

1. Взаємодія електромагнітної хвилі з поверхневою акустичною хвилею за рахунок неоднорідності діелектричної проникності, яка змінюється стрибком від $\epsilon = 1$ при $z < 0$ до $\epsilon = \epsilon_a$ при $z > 0$.

2. Взаємодія електромагнітної хвилі з поверхневою за рахунок фотопружного механізму.

Показано, що в тілесний кут (θ, φ) відбувається відбивання на двох частотах з практично однаковими інтенсивностями. При нормальному падінні зсув по частоті для стоксової та антистоксової компонент не залежить від азимутального кута φ . Крім того, якщо падаюча хвиля природно поляризована, то й коефіцієнт некогерентного відбивання не залежить від цього кута.

1. Розрахунок коефіцієнту нелінійного відбивання електромагнітної хвилі

Розглянемо некогерентне розсіяння падаючої електромагнітної хвилі з частотою ω_0 , викликане її взаємодією з флуктуаціями поверхневих хвиль Релея на границі ізотропного фотопружного середовища, що займає напівпростір $z > 0$. Врахуємо два механізми взаємодії:

1. Взаємодію електромагнітної хвилі з поверхневою акустичною хвилею за рахунок неоднорідності діелектричної проникності, яка

змінюється стрибком від $\epsilon = 1$ при $z < 0$ до $\epsilon = \epsilon_a$ при $z \geq 0$, що позначається на граничних умовах;

2. Взаємодію електромагнітної хвилі з поверхневою за рахунок фотопружного механізму, суть якого зводиться до того, що для ізотропного фотопружного середовища тензор діелектричної проникності може бути записаний у вигляді

$$\epsilon_{ij}(\vec{r}, t) = \epsilon_a \delta_{ij} + a_1 u_{ij}(\vec{r}, t) + a_2 \text{div} \vec{u}(\vec{r}, t) \delta_{ij}, \quad (1)$$

де

$$u_i = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (i = 1, 2, 3) - \text{компоненти ве-}$$

ктора зміщень точок середовища. $\vec{u}(\vec{r}, t)$

a_1, a_2 фотопружні константи речовини.

Тепер займемося знаходженням поля розсіяної хвилі. Нехай на ізотропне фотопружне середовище, що займає напівпростір $z > 0$ падає монохроматична електромагнітна хвиля

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} \left[\vec{E}^{(0)} \exp \{ i(\omega_0 t - \vec{k}_0 \vec{r}) \} + \text{к.с.} \right] \\ [\vec{N}(\vec{E}_1 - \vec{E}_2)] &= 0, [\vec{N}(\vec{H}_1 - \vec{H}_2)] = 0, \\ (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \vec{N} &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

де $\vec{k}_0 = \left(\frac{\omega_0}{c} \sin \theta_0, 0, \frac{\omega_0}{c} \cos \theta_0 \right)$, θ_0 - кут падіння хвилі на середовище.

Вихідна система рівнянь - це система рівнянь Максвела з граничними умовами

$$\begin{aligned} [\vec{N}(\vec{E}_1 - \vec{E}_2)] &= 0, [\vec{N}(\vec{H}_1 - \vec{H}_2)] = 0, \\ (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \vec{N} &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

де $\vec{N}$, вектор нормалі до поверхні $z = u_z$ що виникає в результаті теплових флуктуацій, а $(\vec{E}_1, \vec{H}_1) i (\vec{E}_2, \vec{H}_2)$ - напруженості полів в середовищах $z < 0$ та $z > 0$, відповідно. Вражаючи відхилення площини $z = u_z$ від площини $z = 0$ малим збуренням, будемо шукати розв'язок рівнянь Максвела в вигляді:

$$\begin{aligned}\bar{E}_1 &= \bar{E}^{(0)} + \bar{E}^{(R)}, \bar{E}_2 = \bar{E}^{(s)} + \bar{E}^{(T)}, \\ \bar{H}_1 &= \bar{H}^{(0)} + \bar{H}^{(R)}, \bar{H}_2 = \bar{H}^{(s)} + \bar{H}^{(T)}.\end{aligned}$$

Тут $\bar{E}^{(R)}, \bar{H}^{(R)}, \bar{E}^{(T)}, \bar{H}^{(T)}$ напруженості полів розсіяних хвиль, які є малими добавками до $\bar{E}^{(0)}, \bar{H}^{(0)}, \bar{E}^{(s)}, \bar{H}^{(s)}$. Ці величини визначаються з наступної системи рівнянь

$$\begin{aligned}\text{rot} \bar{H}^{(R)} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \bar{E}^{(R)}}{\partial t}, \quad \text{rot} \bar{H}^{(T)} = \frac{\epsilon_0}{c} \frac{\partial \bar{E}^{(T)}}{\partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial \bar{D}}{\partial t}, \\ \text{rot} \bar{E}^{(R)} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \bar{H}^{(R)}}{\partial t}, \quad \text{rot} \bar{E}^{(T)} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \bar{H}^{(T)}}{\partial t},\end{aligned}\quad (4)$$

$$\delta D_i = \left[a_1 u_y(\bar{r}, t) + a_2 \text{div} \bar{u}(\bar{r}, t) \delta_{ij} \right] E_j^{(s)}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned}\left[\bar{n}(\bar{E}^{(R)} - \bar{E}^{(T)}) \right] &= \frac{1 - \epsilon_0}{\epsilon_0} \left[\bar{n} \bar{\nabla}_\perp (E_z^{(0)} u_z) \right], \\ \left[\bar{n}(\bar{H}^{(R)} - \bar{H}^{(T)}) \right] &= \frac{i\omega_0}{c} \bar{E}_\perp u_z.\end{aligned}\quad (6)$$

Тут $\bar{n} = [0, 0, 1]$, індекс $\perp$ означає проекцію вектора на площину. Неоднорідність граничних умов (6) виступає як перший "модуляційний" механізм взаємодії, в той час як співвідношення (5) - суть другий механізм, який не враховувався при розв'язанні подібних задач раніше в роботах [4-9]. Зауважимо, що врахування модуляційного механізму зроблено нами не повно, ми врахували лише шерехуватість поверхні, що описується залежністю вектора $\bar{n}$ від u_z . Залежністю $\bar{E}$ та $\bar{H}$ від u_z нехтується.

Для розв'язку системи (4) - (6) застосуємо перетворення Фур'є по змінним x, y та t , а по змінній z - перетворення Лапласа. Тоді одержимо:

$$\begin{aligned}\bar{E}^{(R)}(\bar{r}, t) &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int \bar{E}^{(R)}(\bar{q}, \omega) e^{i(\omega t - \bar{q} \cdot \bar{r} + \pi z)} d\omega d\bar{q}, \\ \bar{H}^{(R)}(\bar{r}, t) &= \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int \frac{c}{\omega} \left\{ \frac{\bar{q} \bar{E}^{(R)}}{s_0 [\bar{n} \bar{E}_\perp^{(R)}]} \right\} e^{i(\omega t - \bar{q} \cdot \bar{r} + \pi z)} d\omega d\bar{q}, \\ E_1^{(R)}(\bar{q}, \omega) &= -i \frac{\omega^2}{c^2} \Pi_{ij} \left[\frac{\delta D_j(\omega, \bar{q}, k_z = -s)}{+ \delta D_j^{(n)}(\omega, \bar{q})} \right],\end{aligned}\quad (7)$$

$$\delta D_j = \epsilon_0 E_j^{(s)},$$

$$\delta D_j^{(n)} = \frac{(\epsilon_0 - 1)}{2} u_z \left\{ \frac{a_1}{\omega} (\delta_{ij} - n_i n_j) + n_i n_j \right\} E_j^{(s)}$$

Тут ми ввели тензор

$$\Pi_{ij} = \frac{\delta_{ij} - n_i n_j}{s + s_0} + \frac{c^2}{\omega^2 (s_0 \epsilon_0 + s)} \begin{pmatrix} -q_i q_j + q^2 n_i n_j \\ + s n_i q_j + s_0 n_j q_i \end{pmatrix},$$

де

$$\begin{aligned}s &= \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 - q^2}, \quad s_0 = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - q^2}, \\ \bar{q} &= (q_x, q_y, 0), \quad \bar{n} = (0, 0, 1)\end{aligned}$$

який має наступні основні властивості

- $Sp \Pi_{ij} = \frac{1}{s + s_0}.$
- $\Pi_{ij} n_j = \frac{c^2}{\omega^2 (s_0 \epsilon_0 + s)} (q^2 n_i + s q_i) \dots$
- $\Pi_{ij} n_i n_j = \frac{c^2}{\omega^2 (\epsilon_0 s_0 + s)}; \quad \Pi_{ij} n_i q_j = s \Pi_{ij} n_i n_j.$
- $\Pi_{ij} q_i = s \Pi_{ij} n_j, \quad \Pi_{ij} q_i q_j = s s_0 \Pi_{ij} n_i n_j \dots$
- $\Pi_{ij} \Pi_{jk} = \frac{1}{(s + s_0)^2} + \frac{\epsilon_0}{(\epsilon_0 s_0 + s)^2}.$
- $\Pi_{ij} \Pi_{ik} = \frac{\Pi_{ik}}{s + s_0} + \frac{c^4 (s - s_0)}{\omega^4 (\epsilon_0 s_0 + s)^2} \begin{pmatrix} q^2 n_j + \\ s q_j \end{pmatrix} (q_k - s_0 n_k).$
- $\Pi_{ij} \Pi_{ik} n_k = \left(\frac{c}{\omega} \right)^2 \frac{q^2}{(\epsilon_0 s_0 + s)^2}.$
- $\Pi_{ij} \Pi_{ik} q_j n_k = s \Pi_{ij} \Pi_{ik} n_j n_k.$

Згортка цього тензора з вектором $\bar{Q}(Q_x, Q_y, 0)$ ($\bar{Q} \neq \bar{q}$) може бути визначена аналогічно:

$$1. \quad \Pi_y \Pi_y Q_j n_k = \frac{(\bar{Q}\bar{q})}{q^2} s \Pi_y \Pi_k n_j n_y,$$

$$\Pi_y \Pi_k Q_j Q_k = \frac{Q^2 q^2 - (\bar{Q}\bar{q})^2}{q^2 (s + s_0)^2} +$$

$$2. \quad \frac{(\bar{Q}\bar{q})^2}{q^4} s^2 \Pi_y \Pi_k n_j n_k.$$

Останні формули дозволяють знаходити інтенсивність некогерентного відбивання в тому випадку, коли первинне випромінювання падає на середовище під довільним кутом.

Використовуючи (7), можна визначити інтенсивність розсіяного випромінювання в елемент тілесного кута $d\Omega$ та в інтервал частот $d\omega$

$$I_{\Omega, \omega} = \frac{c}{2\pi} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \frac{\omega^2}{c^2} \cos \theta \langle \bar{E}_i^{(N)} \bar{E}_j^* \rangle$$

$$= \frac{c}{2\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\omega^6}{c^6} \cos \theta \times$$

$$\Pi_y \Pi_k \left[\begin{aligned} &\langle \delta D_j^{(N)} \delta D_k^{(N)*} \rangle + \\ &\langle \delta D_j \delta D_k^{(N)*} \rangle + \\ &\langle \delta D_k^* \delta D_j^{(N)} \rangle + \\ &\langle \delta D_j \delta D_k^{(N)} \rangle \end{aligned} \right] =$$

$$= I_{\omega, \Omega}^{(1)} + I_{\omega, \Omega}^{(2)} + I_{\omega, \Omega}^{(3)}$$

(8)

Гут $I_{\omega, \Omega}^{(1)}$ - інтенсивність некогерентного випромінювання, обумовлена неоднорідністю діелектричної проникності, $I_{\omega, \Omega}^{(2)}$ - "інтерференційний" член, $I_{\omega, \Omega}^{(3)}$ - інтенсивність випромінювання, обумовлена фотопружним зв'язком $\delta \epsilon_y$ з u_y , а дужки $\langle \dots \rangle$ означають статистичне усереднення.

Перш ніж переходити до розрахунку цих інтенсивностей, визначимо

$\delta D(\bar{q}, \omega, k_z = -s)$ та $\delta D^{(N)}(\bar{q}, \omega)$. Використовуючи (5), знаходимо

$$\delta D_j(\omega, \bar{q}, k_z = -s) =$$

$$\iint d\vec{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt \delta \epsilon_y(\vec{r}, t) E_j^{(s)}(\vec{r}, t) \times$$

$$\exp(-i(\omega t - \bar{q}\vec{r} + sz)) =$$

$$= \frac{1}{4} a_{1z}(\Delta \bar{q}, \Delta \omega) \left\{ \frac{\alpha_1 \eta_{jj'}^{(1)}(\Delta \bar{Q}, \Delta \omega)}{\chi_1 + ik_z^{(s)} + is} + \frac{\alpha_1 \eta_{jj'}^{(1)}(\Delta \bar{q}, \omega)}{\chi_1 + ik_z^{(s)} + is} + \frac{\alpha_2 \eta_{jj'}(\Delta \bar{q}, \Delta \omega)}{\chi_1 + ik_z^{(s)} + is} \right\}, \quad (9)$$

де

$$\eta_{jj'}^{(1)}(\omega, \bar{q}), \eta_{jj'}^{(1)}(\bar{q}, \omega), \eta_{ij}(\omega, q).$$

Для знаходження корелятора $\langle \langle a_{1z} a_{1z}^* \rangle \rangle_{\bar{q}, \omega}$ використовується звичайна теорія флуктуацій, що базується на введенні в рівняння руху (в даному випадку в рівняння руху для пружного середовища) сторонніх сил. Використовуючи вираз для тензора сторонніх напружень з [10], з рівняння руху для пружно деформованого середовища одержуємо наступний вираз для компонент вектора зміщень

$$u_i^0 = -i \frac{G_0 k_s}{\rho \omega^2} \left[(k_z^2 - s_1^2)(k_z^2 - s_2^2) \right]^{-1} \times$$

$$\left[\begin{aligned} &(s_1^2 + q^2)(k_z^2 - s_2^2) \delta_{ij} - \\ &(s_1^2 + s_2^2) k_i k_j \end{aligned} \right], \quad (10)$$

де

$$s_1 = \frac{\omega^2}{v_l^2} \sqrt{\frac{1}{1+i\omega \frac{n}{\mu}} - q^2},$$

$$s_2 = \frac{\omega^2}{v_l^2} \sqrt{\frac{1}{1+i\omega \frac{2+\xi}{\lambda+2\mu}} - q^2},$$

$$v_l = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}; v_t = \sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho}},$$

$$k = \{\bar{q}, k_z\}, \text{Im } s_n < 0,$$

$G_{ij}(\vec{r}, t)$ – фур'є-компонента вектора
сторонніх напружень S_{ij} .

Вводячи величини $\bar{A}$ та $\bar{B}$ за
допомогою співвідношень

$$\bar{A} = -\frac{1}{2\pi} \int dk_z (k_z u_l^0 + q u_z^0), \quad \sigma = 1 - 2\gamma^2,$$

$$\bar{B} = -\frac{1}{2\pi} \int dk_z (k_z u_z^0 + \sigma \bar{q} u_l^0), \quad \gamma = \frac{v_t}{v_l}$$

можна виразити пружні константи
 $\bar{a}_1, \bar{a}_2$ через них у вигляді

$$a_{1z} = \frac{1}{\gamma^2 D(\omega, \bar{q})} [-\gamma^2 (s_1^2 - q^2) (\bar{q} \bar{A}) + 2s_2 q^2 \bar{B}], \quad (11)$$

$$a_{2z} = \frac{s_2}{\gamma^2 D(\omega, \bar{q})} [2\gamma^2 s_1 (\bar{q} \bar{A}) + (s_1^2 - q^2) \bar{B}]$$

$$a_{11} = -\frac{q}{s_1} (a_{12} + 2a_{22}) + \frac{1}{s_1} \bar{A}, \quad a_{21} = \frac{a_{22}}{s_2} q, \quad (12)$$

де

$$D(\omega, \bar{q}) = (s_1^2 - q^2)^2 + 4s_1 s_2 q^2.$$

Обмежуючись розглядом лише
поверхневих хвиль, після нескладних але
громіздких обчислень, з (10) та (11),
одержуємо для корелятора $\langle\langle a_{1z} a_{1z}^* \rangle\rangle_{\omega, \bar{q}}$
наступний вираз

$$\langle\langle a_{1z} a_{1z}^* \rangle\rangle = (2\pi)^4 \hbar \omega \frac{\delta(q^2 - q_0^2)}{2\rho v_l^3} \times \Psi(\gamma) \text{cth} \frac{\hbar \omega}{2T}, \quad (13)$$

$$\Psi(\gamma) = 4(1 - \gamma^2 \alpha^2) \sqrt{1 - \alpha^2} \left[\frac{6\alpha^2 - 6\alpha^2 - \alpha^4 + 6\gamma^2 - 4\gamma^2 \alpha^2}{\alpha^4 + 6\gamma^2 - 4\gamma^2 \alpha^2} \right]^{-1},$$

$$q_0 = \frac{\omega}{\alpha v_l}, \quad \gamma = \frac{v_t}{v_l},$$

а α дійсний корінь рівняння

$$\alpha^6 - 8\alpha^4 + 8\alpha^2(3 - 2\gamma^2) - 16(1 - \gamma^2) = 0. \quad (14)$$

На рис. 1 наведено графічну
залежність функції $\Psi(\gamma)$ та графічний
розв'язок рівняння (14). Зауважимо, що при
одержанні (14) ми знехтували кінцевою
шириною лінії комбінаційного розсіяння.

Вираз для $\delta D_j^{(n)}$ має вигляд

$$\mathcal{E} D_j^{(n)} = \frac{1}{2} (\varepsilon_0 - 1) \frac{q^2 - \chi_l^2}{2q^2} a_{1z} (\Delta \omega, \Delta \bar{q}) \times$$

$$\left[\frac{\omega_0}{\omega} \delta_{ff'} + \left(1 - \frac{\omega_0}{\omega} \right) \eta_f \eta_{f'} \right] E_f^{(0)}. \quad (15)$$

Формули (8)–(15) повністю розв'язують
задачу про спектральний склад випромінюван-
ня, відбитого від фотопружного середовища.

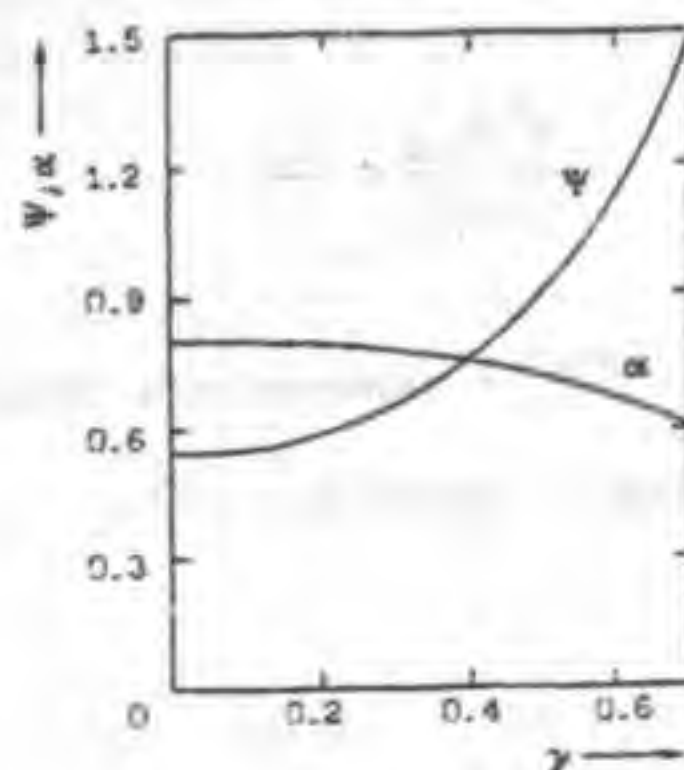


Рис. 1. Графік функції $\Psi(\gamma)$ та графічний
розв'язок рівняння (14) для параметру α .

3. Результати та їх обговорення.

Ми не будемо аналізувати загальний випадок, а розглянемо випадок нормального падіння ($\theta_0 = 0$) на фотопружне середовище природньо-поляризованого світла. В цьому випадку:

$$\begin{aligned}\Delta \vec{q} &= \vec{q}, \quad q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \sin^2 \theta, \quad E_i^{(s)} E_i^{*(s)} = \\ &= \frac{2}{(1 + \sqrt{\varepsilon_0})^2} (\delta_{ij} - n_i n_j) |\vec{E}^{(0)}|^2, \\ E_i^{(0)} E_i^{*(0)} &= \frac{1}{2} |E_0|^2, \\ E_i^{(0)} E_i^{*(s)} &= \frac{1}{1 + \sqrt{\varepsilon_0}} (\delta_{ij} - n_i n_j) |\vec{E}^{(0)}|^2\end{aligned}$$

Використовуючи ці співвідношення, з (8) знаходимо

$$\begin{aligned}I_{\omega, \Omega}^{(1)} &= \frac{c}{64 \rho v_i^3} \frac{\omega^6}{c^6} \cos \theta (\varepsilon_0 - 1)^2 \times \\ &\times \alpha^4 \Psi(\gamma) \hbar \Delta \omega \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \Delta \omega}{2kT} \right) \times \\ &\times |\vec{E}^{(0)}|^2 \Pi_y \Pi_k (\delta_{ik} - n_i n_k) \delta \left(\frac{\omega^2}{c^2} - \left(\frac{\Delta \omega}{\alpha v_i} \right)^2 \right).\end{aligned}\quad (16)$$

Визначаючи надалі коефіцієнт некогерентного відбивання, як співвідношення

$$\frac{d^2 R_{\omega, \Omega}}{d\omega d\Omega} = \frac{I_{\omega, \Omega}}{I_0},$$

де $I_0 = \frac{c}{8\pi} |\vec{E}^{(0)}|^2$ – інтенсивність падаючого випромінювання, знаходимо з (16):

$$\begin{aligned}\frac{dR^{(1)}}{d\omega d\Omega} &= \frac{\pi}{8 \rho v_i^3} \frac{\cos \Phi_1(\theta)}{\left(\sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta} + \varepsilon_0 \cos \theta \right)^2} \times \\ &\times \frac{\omega^4}{c^4} (\varepsilon_0 - 1)^2 \Psi(\gamma) \times \\ &\times \hbar \Delta \omega \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \Delta \omega}{2kT} \right) \delta \left[\frac{\frac{\omega^2}{c^2} \sin^2 \theta - \left(\frac{\Delta \omega}{\alpha v_i} \right)^2}{\left(\frac{\Delta \omega}{\alpha v_i} \right)^2} \right] d\omega.\end{aligned}\quad (17)$$

В формулі (17), як і в попередніх формулах, відкинуто доданки з комбінаційними частотами $\Delta \omega^{(2)} = \omega_0 \pm \omega$, тому що в цьому випадку із-за наявності дельта-функції в (17) коефіцієнт розповсюдження хвилі

$$\delta_v = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - q^2} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} + \frac{(\omega + \omega_0)^2}{\alpha^2 v_i^2}}, \quad q^2 = q_0^2$$

був би чисто уявною величиною, і внесок від цих доданків в вектор Умова-Пойтінга також прямував би до нуля.

Визначимо тепер інтегральний коефіцієнт відбивання в тілесний кут $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ тобто

$$\begin{aligned}\frac{dR^{(1)}}{d\Omega} &= \int_0^\infty \frac{d^2 R^{(1)}}{d\omega d\Omega} d\omega = \\ &= \frac{\pi \hbar}{8 \rho v_i} \frac{\cos \theta \Phi_1(\theta)}{\left(\sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta} + \varepsilon_0 \cos \theta \right)^2} \times \\ &\times (\varepsilon_0 - 1) \frac{\omega_0^4}{c^4} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \alpha v_i \omega_0 \sin \theta}{2ckT} \right) \alpha^6 \Psi(\gamma).\end{aligned}\quad (18)$$

Аналогічно проводиться розрахунок величин $I_{\omega, \Omega}^{(2)}, I_{\omega, \Omega}^{(3)}$. Дійсно, маємо

$$I_{\omega, \Omega}^{(2)} = \frac{c}{(2\pi)^4} \frac{\omega^6}{c^6} \cos \theta \frac{\varepsilon_0 - 1}{8(1 + \sqrt{\varepsilon_0})} \times$$

$$\frac{\omega_0 |E_0|^2 (q^2 - \chi_i^2)}{\omega 2q^2} \times$$

$$<< a_{1z}(\bar{q}, \Delta\omega) a_{1z}^* >> \times$$

$$\left\{ a_1 \left[\frac{\Pi_{ij} \Pi_{ik} \eta_{ij}^{(i)} (\delta_{jk} - n_j n_k)}{\chi_i + ik_z^{(s)} + is} + k.c. \right] + \right.$$

$$\left. a_2 \left[\frac{\Pi_{ij} \Pi_{ik} \eta_{ij}^{(i)} (\delta_{jk} - n_j n_k)}{\chi_i + ik_z^{(s)} + is} + k.c. \right] \right\} =$$

$$\frac{c}{16} \frac{\omega^4}{c^4} \alpha^2 \frac{\omega_0}{\omega} \frac{\Psi(\gamma) \hbar \Delta\omega \sin^2 \theta \cos \theta \Phi_2(\theta)}{(\varepsilon_0 + \sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta})^2} \times$$

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\sqrt{\varepsilon_0} + 1} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Delta\omega}{2kT} \delta \left[\frac{\omega^2}{c^2} \sin^2 \theta - \left(\frac{\Delta\omega}{\alpha v_i} \right)^2 \right], \quad (19)$$

$$I_{\omega, \Omega}^{(3)} = \frac{c}{(2\pi)^4} \left(\frac{\omega}{2c} \right)^4 \cos \theta |E_0|^2 \times$$

$$<< a_{1z}(\bar{q}, \Delta\omega) a_{1z}^*(\bar{q}, \Delta\omega) >> \times$$

$$\frac{\sqrt{1 - \alpha^2} \left[a_1^2 \Phi_3(\theta) + a_2^2 \Phi_4(\theta) + a_1 a_2 \Phi_5(\theta) \right]}{(1 + \sqrt{\varepsilon_0}) \sqrt{1 - \gamma^2 \beta^2} \left[\left(\frac{\omega_0}{\omega} \sqrt{\varepsilon_0} + \sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta} \right) \right]} \times$$

$$\left[(1 - \alpha^2) \sin^2 \theta + \left(\frac{\omega_0}{\omega} \sqrt{\varepsilon_0} + \sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta} \right) \right] \quad (20)$$

Таким чином, провівши необхідні обчислення, з (19) та (20) одержимо:

$$\frac{dR^{(2)}}{d\omega} = \frac{\pi \hbar}{2\rho v_i} \frac{\varepsilon_0 - 1}{\sqrt{\varepsilon_0} - 1} \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^4 \times$$

$$\frac{\sin^2 \theta \cos \theta \Phi_2(\theta)}{(\varepsilon_0 \cos \theta + \sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta})^2} \times \quad (21)$$

$$\alpha^2 \Psi(\gamma) \operatorname{cth} \frac{\hbar \alpha v_i \omega_0 \sin \theta}{2ckT},$$

$$\frac{dR^{(3)}}{d\Omega} = \frac{\pi \hbar \omega_0^4 \sqrt{1 - \alpha^2}}{2\rho v_i c^4 \sqrt{1 - \alpha^2 \gamma^2} (1 + \sqrt{\varepsilon_0})^2} \times$$

$$\frac{\sin^2 \theta \cos \theta \Psi(\gamma)}{(\varepsilon_0 \cos \theta + \sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2 \theta})^2} \times \quad (22)$$

$$\left[a_1^2 \Phi_3(\theta) + a_2^2 \Phi_4(\theta) + a_1 a_2 \Phi_5(\theta) \right] \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar v_i \omega_0}{2kTc} \sin \theta \right).$$

Величин $\Phi_1(\theta) - \Phi_5(\theta)$ порядку одиниці і слабо залежать від кута θ та параметрів кристалу [10]

Висновки

З одержаних нами виразів для інтегральних коефіцієнтів відбивання світла в тілесний кут $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ (18), (21), (22) від фотопружнього середовища слідує, що всі ці величини одного порядку, тобто

$$\frac{dR^{(1)}}{d\Omega} \approx \frac{dR^{(2)}}{d\Omega} \approx \frac{dR^{(3)}}{d\Omega} \approx 10^{-8},$$

чого при сучасному рівні лазерної спектроскопії можна легко досягнути. Крім того, з аналізу виразів (18), (20) та (22) слідує, що в тілесний кут (θ, φ) відбувається відбивання на двох частотах

$$\omega = \omega_0 \left(1 \pm \frac{\alpha v_i}{c} \sin \theta \right)$$

з практично однаковими інтенсивностями, оскільки $\frac{v_i}{c} \ll 1$. При нормальному падінні зсув по частоті для стоксової $\left(\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{\alpha v_i}{c} \sin \theta \right) \right)$ та антистоксової $\left(\omega = \omega_0 \left(1 - \frac{\alpha v_i}{c} \sin \theta \right) \right)$ компонент не зале-

жить від азимутального кута φ . Крім того, якщо падаюча хвиля природно поляризована, то й сумарний коефіцієнт некогерентного відбивання

$$\frac{dR}{d\Omega} = \sum_{i=1}^3 \frac{dR^{(i)}}{d\Omega}$$

не залежить від цього кута.

Таким чином, підсумовуючи вище викладене, можна констатувати, що вивчення Мандельштам-Бриллюєнівського розсіювання світла від фотопружного середовища цікаве з цілого ряду причин. По перше, розрахувавши теплові флуктуації, можна визначити параметри поверхні, аналізуючи переріз розсіювання. Детальний аналіз перерізу розсіювання також дає можливість одержати інформацію про стан поверхні, взаємодію між різними поверхневими групами атомів, протікання хімічних реакцій на поверхні, процеси перетворення та трансформації енергії на поверхні. Розроблені методики дозволяють отримати з перерізу розсіювання усю необхідну для цих досліджень інформацію. Крім того, аналіз розсіювання світла дозволяє визначити характер розсіюючої поверхні та використати його для її діагностики.

З приводу одержаних результатів зробимо ще одне зауваження. При розгляді процесів відбивання світла від фотопружного середовища слід мати на увазі наступне: при великих інтенсивностях падаючого випромінювання вже з самого початку потрібно враховувати вплив цього випромінювання на рух середовища. Останній, як відомо, призводить до виникнення вимушеного розсіювання на поверхневих хвилях, характерною особливістю якого є наявність порогу по інтенсивності $I_p \approx 10^8$ Вт/см². Тому при експериментальному вивченні розглянутого нами ефекту слід вибрати інтенсивність падаючого випромінювання такою, щоб вона була меншою від I_p , але достатньою для спостереження некогерентного випромінювання з урахуванням коефіцієнту некогерентного відбивання.

Список використаних джерел

1. Cherif S.M., Dugautier C., Hennequin J.-F., and Moch P. Brillouin Light scattering by magnetic surface waves in dot-structured

permalloy layers // *Jor. Magn. Magn. Materials.* - 1997. - V.175. - P. 228-236.

2. Comins J.D., Every A.G., Stoddart P.R., Zhang X., Crowhurst J.C., Hearne G.R. Surface Brillouin scattering of opaque solids and thin supported films // *Ultrasonics.* - 2000. - V.38. - P.450-458.
3. Mishra S., Bray R. Surface-ripple mechanism for Brillouin scattering of reflected light from bulk acoustic waves // *Phys.Rev.Lett.* - 1977. V.39. - P.222-225.
4. Rowell N.L., Stegermann G.I. Theory of Brillouin Scattering from opaque media // *Phys.Rev.B.* - 1978. - V.18. - P.2598
5. London R., Sandercock J.R. Analysis of the scattering cross-section for surface ripples in solids // *J. Phys.C.* - 1980. - V.13. - P.2609 - 2621.
6. Velasco V.R., Garsia-Moliner F. Brillouin scattering from surface waves // *Solid State Communications.* - 1980.- V.33. - P.1.
7. London R., Sandercock J.R. Analysis of the scattering cross-section for surface ripples in solids // *J. Phys.C.* - 1980. - V.13. - P.2609 - 2621.
8. Velasco V.R., Garsia-Moliner F. Brillouin scattering from surface waves // *Solid State Communications.* - 1980.- V.33. - P.1.
9. Rowell N.L., Stegermann G.I. Theory of Brillouin Scattering from opaque media // *Phys.Rev.B.* - 1978. - V.18. - P.2598.
10. Гречко Л.Г., Коцаренко Н.Я., Федорченко А.М., Теория когерентного рассеяния электромагнитных волн на флуктуациях поверхности в фотоупругих средах. - Препринт ИТФ 72-7836 1972.12 с.

Надійшла до редколегії 12.10.2009р

УДК 548.4: 539.26

Д.В. Калініченко асп.

**Зміна структури приповерхневого шару
монокристалічного кремнію під дією НВЧ
опромінення**

Вперше методом рентгенівської дифрактометрії було виявлено зміну параметру ґратки монокристалічного кремнію *n*-типу провідності, (КЕФ-4.5, вирощеного за Чохральським) під впливом короткодіючого НВЧ електро-магнітного опромінення. Ефект має релаксаційний характер і зникає через деякий час. На основі одержаних експериментальних результатів висловлені гіпотетичні фізичні механізми, які лежать в основі виявлених ефектів. Суть цих механізмів полягає у врахуванні суттєвої ролі кисню та кисневмісних дефектів у зміні структурних характеристик кристалу під дією НВЧ опромінення.

Ключові слова: кремній, параметр ґратки, кластер, НВЧ поле.

E-mail: kdv3d@ukr.net

Вступ

Кремній вивчається з середини минулого століття, але з ростом вимог та топологічної норми в мікроелектроніці збільшується й область невивченого в кристалах кремнію [1]. Основні властивості напівпровідникових монокристалів, які використовуються в науці і техніці, залежать від їх дефектної структури та хімічної чистоти як у поверхневому шарі, так і в об'ємі матеріалу. Незважаючи на скептичне ставлення багатьох науковців, факт впливу магнітного поля на кристали кремнію підтверджується все більшою кількістю публікацій по даній темі. Останнім часом в літературі з'явилося чимало статей щодо впливу магнітного поля на стан дефектно-домішкової структури немагнітних матеріалів [див. огляд 2]. Але слід відзначити, що, не зважаючи на велику експериментальну базу, єдиної концепції щодо впливу різного типу зовнішнього впливу (постійного або змінного слабого магнітного поля, слабого НВЧ електро-магнітного опромінення, лазерного опромінення тощо) на кристали кремнію досі не існує. А саме такі засоби модифікації дефектно-

D. V. Kalinichenko, PhD student

**A structure change of silicon monocrystals in
near-surface layer under the influence of
microwave irradiation**

Using the method of tri-crystal X-ray diffractometry the change of lattice parameter under the influence of microwave irradiation was discovered. The effect is of a relaxational nature and disappears after some time. On the basis of the experimental findings the hypothetical physical mechanisms which underlie the effects discovered are formulated.

The essence of the mechanisms consists in taking into account the principal role of oxygen and oxygen clusters in the change of structural characteristics of a crystal under the influence of microwave irradiation.

Key Words: silicon, lattice parameter, cluster, microwave radiation.

домішкової структури кристалів кремнію дадуть змогу отримувати кристали з заданими властивостями в процесі виготовлення сучасних інтегральних схем.

З цих міркувань, як для теоретичних, так і для прикладних цілей було дуже важливо дослідити вплив надвисокочастотного поля (53,7 ГГц) на структуру кристалічного кремнію шляхом ресстрації зміни параметру кристалічної ґратки.

Методика експерименту

Для експериментів використовувалися зразки бездислокаційного монокристалічного Si *n*-типу провідності, орієнтації (111) леговані фосфором та вирощенні за методом Чохральського. Концентрація домішки фосфору була встановлена за допомогою чотирьох-зондового методу обчислювання опору кристалу і склала 10^{15} см^{-3} . Вміст кисню в кристалах кремнію був обчислений за допомогою ІЧ-спектроскопії і склав порядку $[O_i] = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Зразки мали форму $10 \times 7 \times 0,45 \text{ мм}$ та були

двосторонньо механічно та хімічно поліровані за заводськими технологіями виготовлення інтегральних мікросхем. Для експериментів використовувались зразки з різних партій вирощування або різних пластин однієї партії. Але вихідні значення концентрації вільних носіїв заряду та міжвузельного кисню були однакові в межах похибки виміру на всіх зразках.

Основною досліджуваною величиною у роботі була відносна зміна параметру ґратки кристалу отримана за допомогою трикристального рентгенівського дифрактометра (ТРД). Вплив магнітної обробки на зміну параметра ґратки вивчався при кімнатній температурі. Враховувались вплив змін температури оточуючого середовища на зміну параметра ґратки з точністю до 0,1 градуса. Величина похибки виміру відносної зміни параметра ґратки складала порядку $1,4 \cdot 10^{-6}$, при куті Бреґа для площин (111) $\theta_B = 0,24806$ рад, $\text{ctg}(\theta_B) \approx 3,946$.

Схема експерименту була наступна. Спочатку вирізались декілька (2-4) зразків однакової форми з технологічно підготовлених пластин кремнію. Потім на цих зразках проводилась серія контрольних вимірів. Далі вони опромінювались на генераторі НВЧ поля - Г4-141.

Опромінювання зразків кремнію проводилось при наступних умовах та параметрах випромінювання:

- Час опромінення складав 1-1,5 години. Цей час було вибрано з тих міркувань, що приблизно за одну годину по вимірам зміни мікротвердості магнітомеханічний ефект (ММЕ) досягав максимальних величин і далі не збільшувався з часом [3].

- Опромінення зразків відбувалося НВЧ опроміненням однакої потужності $\approx 3,2$ мВт.

- Частота НВЧ поля була встановлена максимальна, що дає генератор Г4-141 - 53 ГГц. З дослідів по виміру зміни мікротвердості встановлено, що величина ефекту лінійно залежить від частоти НВЧ випромінювання [3].

Після опромінення НВЧ полем зразки терміново виймалися з хвилеводу генератора та вимірювався параметр ґратки. Повторні

вимірювання на кожному зразку проводились з шагом в добу.

Експериментальні результати

На рисунках 1 та 2 наведені графіки зміни параметру ґратки на зразках монокристалічного кремнію легованих фосфором з різним типом провідності. На кожному типі зразків, вирізаних з однієї пластини було проведено 2-4 незалежних експериментів. З рисунків видно помітне різке збільшення параметру ґратки під впливом НВЧ поля вже після однієї години опромінення. Далі проводились виміри параметру ґратки раз на добу. Останнє показало той факт, що через 1-2 доби зміни параметру кристалічної ґратки ще тримались, але згодом почали поступово зникати. Приблизно через 4-7 діб ці структурні зміни монокристалів кремнію повертаються до вихідних значень так, якби ніякого впливу кристали не зазнавали.

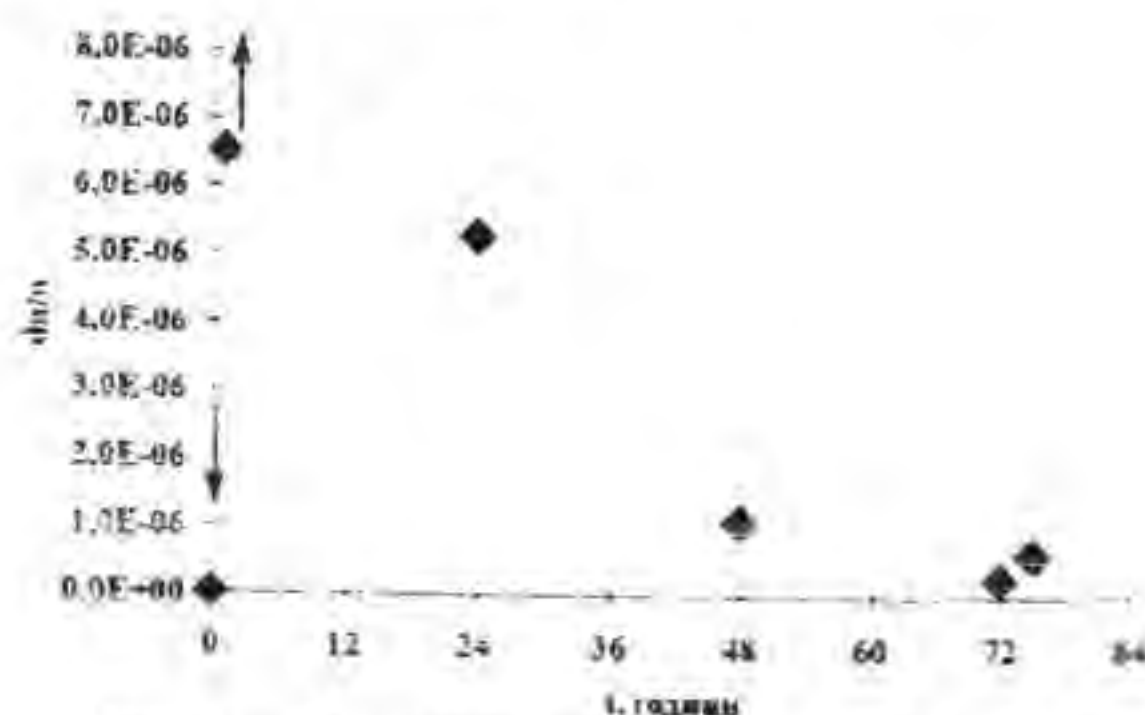


Рис.1 Відносна зміна параметру ґратки кристалів КЕФ-1.0 від часу опромінення НВЧ полем. Стрілка донизу та догори – початок та припинення дії НВЧ поля на кристал відповідно.

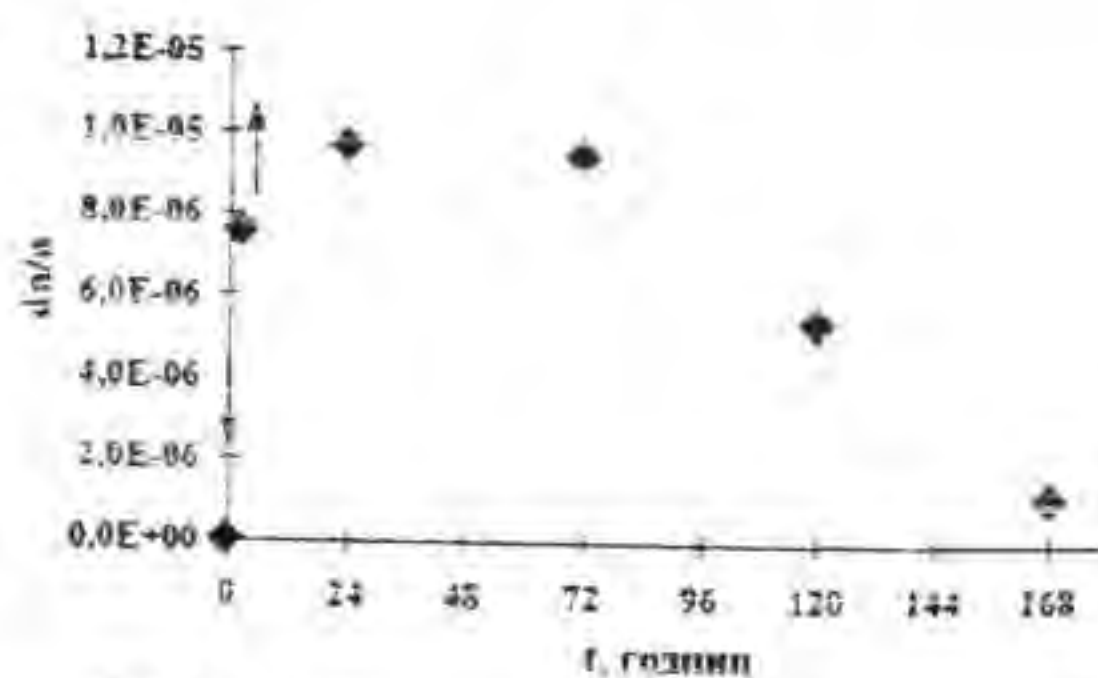


Рис.2 Відносна зміна параметру ґратки кристалів КЕФ-5.0 від часу опромінення НВЧ

полем. Стрілка донизу та догори – початок та припинення дії НВЧ поля на кристал відповідно.

Такий ефект дії НВЧ поля на бездислокаційні монокристали кремнію можна пояснити з іншого боку, використовуючи термодинамічний підхід та наступні міркування.

Послаблення сили хімічних зв'язків між всіма атомами кристалу, до яких призводить дія НВЧ поля виявляється в зміні повного термодинамічного потенціалу всіх часток в кристалі, зокрема в більш складних системах кластерів $\text{Si}_x\text{O}_y\text{V}_z$. Згідно [4] повний термодинамічний потенціал в даному випадку можна представити за формулою (1), як алгебраїчну суму термодинамічного потенціалу дефектів без накладення ЕМП та енергії ЕМП.

$$G = G_d - W \quad (1)$$

Де G_d – повний термодинамічний потенціал одного моля атомів без накладення до кристалу ЕМП, W – енергія ЕМП, що надається парамагнітним частакам в одному молі кристалу.

Зміна хімічного потенціалу всіх точкових дефектів під впливом ЕМП призводить до зміни термодинамічної рівноваги в кристалі. В цьому випадку можна казати про недосичення або пересичення дефектів кристалу в порівнянні з вихідним положенням, до накладення ЕМП. Взагалі, у нашому випадку дія ЕМП призводить до зміни хімічного потенціалу в кристалі і створення термодинамічної нерівноваги. Тепер, якщо кисневмісний комплекс (КВК) розпадається за рахунок послаблення сил хімічного зв'язку та енергії термічних флуктуацій на складові, то зворотній хід реакції утворення подібного комплексу термодинамічно не вигідний при даних умовах. Тому загальна концентрація домішок кристалу, яку можна описати рівнянням (3), під дією ЕМП збільшиться.

$$\begin{aligned} C &= N \cdot \exp\left(\frac{G}{kT}\right) = N \cdot \exp\left(\frac{G_d - W}{kT}\right) = \\ &= N \cdot \exp\left(\frac{G_d}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) = C_0 \cdot \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \end{aligned} \quad (3)$$

Де C_0 – вихідна концентрація точкових дефектів до накладення ЕМП.

$$C_0 = N \cdot \exp\left(\frac{G_d}{kT}\right) \quad (4)$$

N – кількість атомів в одиниці об'єму кристалу, k – стала Больцмана, T – температура кристалу за Кельвіном.

Зміна концентрації домішок в кристалі, в свою чергу, дає зміну параметру ґратки за формулою:

$$\frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon} = \beta \cdot \Delta C \quad (5)$$

З формули (5) з врахуванням (3) и (4) отримуємо відносну зміну параметру ґратки під дією зовнішнього поля за рахунок дефектно-домішкової перебудови структури:

$$\frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon} = \beta \cdot C_0 \cdot \left(e^{-\frac{W}{kT}} - 1\right) \quad (6)$$

Взагалі, у (5) та (6) β – це алгебраїчна сума коефіцієнтів стиснення ґратки всіх точкових дефектів. Так, для кисню $\beta = 5,24 \cdot 10^{-24}$, таке ж значення β має донарна домішка фосфору, який навпаки від міжвузельного кисню займає положення заміщень в ґратці, але має більший атомний радіус ніж атом кремнію. Акцепторна домішка бору також займає положення заміщень, але має значно менший атомний радіус за атоми кремнію. Але для акцепторного бору $\beta = 5,19 \cdot 10^{-24}$.

Враховуючи той факт, що концентрація домішки кисню в дослідних кристалах кремнію на 3-4 порядки перевищувала концентрацію всіх інших домішок, то впевнено можна знехтувати внеском в ефект зміни параметру кристалічної ґратки від інших домішок (P, B, C).

Таким чином, ЕМП індукувало розпад КВК і збільшення концентрації точкових дефектів, зокрема кисню. Ця зміна концентрації міжвузельного кисню і дає ефект збільшення параметру ґратки кристалів. Після припинення дії ЕМП на кристал хімічний потенціал дефектів змінюється зворотньо до значення, що було до

накладання ЕМП, тому кристалу термодинамічно не вигідно тримати пересичений розчин точкових дефектів. Далі існує декілька каналів реакцій цих дефектів: рекомбінація пар, зворотнє утворення КВК або дифузійний сток точкових дефектів на дислокації чи поверхню. Саме тому що, тільки частка атомів кисню знову має змогу з'єднатись в КВК, а інші зреагують по іншим каналам, ми спостерігаємо значно менший або взагалі відсутній ефект при повторній обробці ЕМП кристалів, якщо наступне опромінення робити через невеликий часовий проміжок після першого. Можна сказати, що після опромінення кристал частково очистився від домішки кисню за рахунок виходу останньої на поверхню, тому наступний раз вже значно слабкіше має «реагує» на повторну дію збоку ЕМП.

Слід також зазначити, що ефект зміни параметру ґратки під дією постійного слабкого ЕМП має приповерхневий характер. Змінення параметру ґратки скоріш за все, буде відбуватися в тому шарі кристалу, товщина якого приблизно буде дорівнювати довжині вільного пробігу міжвузельного кисню при дифузії. Кисень з більш глибоких шарів може на своєму шляху до поверхні зустрічати та захоплюватись вакансіями та іншими дефектами ґратки тому. З цих причин в цьому шарі зміна параметру ґратки скоріш за все буде відсутня.

Цікавим для подальших експериментальних дослідів є припущення про те, що після тривалого відпочинку кристалу при кімнатних температурах, нерівноважний розподіл концентрацій домішок в кристалі повинен вирівнюватись. Приповерхневі шари монокристалу за деякий час можуть знову насититись киснем як з поверхні, так і з більш глибоких шарів кристалу. Дуже цікавим моментом для подальших дослідів буде перевірка впливу повторного опромінення кристалів НВЧ полем на зміну кристалічної ґратки після тривалого відпочинку кристалів в звичайних умовах. Наприклад, в більш ранніх роботах [3,5] було показано, що повторна польова обробка кристалів не веде до змін мікротвердості.

Висновок

На дослідних зразках монокристалічного кремнію було помічено зміну параметру ґратки під дією опромінення НВЧ полем протягом години. Опромінення НВЧ полем веде до зворотніх структурних змін в приповерхневому шарі кристалу, що зникають протягом 4-7 діб після припинення дії поля на кристал. Подібні зміни параметру ґратки можуть бути пов'язані з процесом розпаду та зворотнього утворення кисневмісних дефектних комплексів у кристалі під дією зовнішнього опромінення.

Список використаних джерел

1. В.Киреев. Технологии и оборудование для производства интегральных микросхем. Состояние и основные тенденции развития // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2004. № 7. С.72-77.
2. Головин Ю.И. //ФТТ - 2004. -46, вып.5. - С.769-803.
3. Макара В.А., Стебленко Л.П., Курилюк А.М. та ін. Вплив надвисокочастотного електромагнітного випромінювання на мікромеханічні властивості монокристалічного кремнію. // Металлофизика и новейшие технологии. – 2008. – т.30, №2. – С.235-246.
4. Алехин В. П. Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов. – М., Наука, 1983г.-280с.
5. В.А. Макара, М.А. Васильев, Л.П. Стебленко. Вызванные действием магнитного поля изменения примесного состояния и микротвердости приповерхностных слоев кристаллов кремния. // Физика и техника полупроводников. – 2008. – т.42, №9. – С.1061-1064.

Надійшла до редколегії 7.09.2009

УДК 538.9 ; 621.798.1 ; 532

Королович В.Ф.^{*}, аспірант,
Адаменко І.І., д. ф.-м. наук, проф.,
Дашенко О.І., канд. ф.-м. наук,
Держипольський А.Г.,
Меленевський Д. О., канд. ф.-м. наук,
Копитков В.В., канд. тех. наук
Селькин В.П., канд. тех. наук
Мороз К.О., канд. ф.-м. наук
Королович А.Ф., студент

Оптичні властивості водно-полімерних систем і полімерних плівок на їх основі

Досліджено температурну залежність показника заломлення, люмінесценцію водних систем з поліакриламідом, натрієвою сіллю карбоксиметилцелюлози і сіллю Na_2SO_4 . Методом кореляційної лазерної спектроскопії оцінено розмір глобул, що утворюють полімери у водному середовищі.

Представлено результати дослідження ІК спектрів плівок на основі водно-полімерних систем. Проаналізовано вплив домішок на структуру поверхні цих рідинних систем.

Ключові слова: водно-полімерні системи, показник заломлення, кореляційна лазерна спектроскопія, люмінесценція, полімерні плівки.

^{*}E-mail: korolovich@gmail.com

Вступ

Розвиток тароупаковочної індустрії супроводжується неперервним зростанням кількості відходів різноманітних пластикових упаковок, утилізація яких стала однією з глобальних проблем сучасного суспільства [1]. Актуальним напрямком її вирішення стає виробництво екологічно чистої упаковки на основі водно – полімерних систем (ВПС), котра після використання здатна біорозкладатися під дією природних факторів, зокрема шляхом компостування.

Проведені дослідження [2-4] показали, що упаковка на основі водно-полімерних систем, досить швидко руйнується за наявності вологи. А самі водорозчинні полімери, будучи біобезпечними, здатні утримувати вологу і тим самим покращувати в засушливих районах водно-повітряний баланс.

Дослідженню водорозчинних полімерів і упаковок присвячена не одна публікація [5-8],

V.F. Korolovych^{*}, PhD stud.,
I.I. Adamenko, Dr. Sci., Prof.,
O.I. Datsenko, PhD,
A.G. Derzhypolskyi,
D.O. Melenevskyi, PhD,
V.V. Kopytkov, PhD,
V.P. Selkin, PhD,
K.O. Moroz, PhD,
A.F. Korolovych, stud.

Optical properties of water – polymer systems and polymer films

The luminescence and temperature dependence of refractive index are studied for water systems with polyacrylamide, sodium salt of carboxymethylcellulose and Na_2SO_4 . The sizes of globules formed of the polymers in the water environment are estimated by the laser correlation spectroscopy method. The results of study of the IR spectra for the films based on the water-polymer systems are reported. The impurity effect on the surface structure of these liquid systems is analyzed.

Key Words: water-polymer systems, index of refraction, laser correlation spectroscopy, luminescence, polymer films.

але актуальним залишається пошук поєднання оптимального складу ВПС з необхідними для упаковки властивостями: гнучкістю, міцністю, швидкістю біоруйнування і т.д., що визначаються фізико-хімічними властивостями ВПС. Метою нашої роботи було дослідити оптичні властивості: 1) ВПС – температурну залежність показника заломлення, люмінесценцію і розмір глобул, що утворюють полімери при розчиненні у воді; 2) плівок на основі ВПС – ІК спектроскопія. Проведені дослідження дозволять розширити уявлення про структуру ВПС і в подальшому покращити цінні властивості плівок на основі ВПС.

Матеріали і методи

Компонентами водної системи були водорозчинні полімери промислового виготовлення, а саме поліакриламід (ПАА) у вигляді 6%-го поліакриламід-гелю (ТУ 6-01-1049-92), дисперсний порошок натрієвої солі

карбометилцелюлози (NaКМЦ) (ГОСТ 6-05-386-80), а також сіль Na_2SO_4 .

Полімерні системи готували розмішуючи в дистильованій воді ПАА до повного розчинення та досягненні гомогенності розчину. Після чого вводили інші компоненти системи.

Дослідження показника заломлення проводилося за допомогою рефрактометра Аббе в інтервалі температур від 20°C до 45°C . Точність визначення $\pm 0,0005$.

Дослідження розміру глобул, що утворюють полімери при розчиненні у воді, здійснювалося методом кореляційної лазерної спектроскопії (довжина хвилі лазера $632,8\text{ нм}$) на приладі Zetasizer Nano S (Malvern Instruments, Великобританія) в лабораторії дослідницького центру "АЛТ Україна ЛТД". Точність знаходження розміру глобул 2% .

Спектри фотолюмінесценції отримані за допомогою імпульсного азотного лазера ИЛГИ-503 потужністю $3,5\text{ мВт}$, довжина хвилі збудження 337 нм . Спектри перераховані на спектральну чутливість установки. По осях ординат наведено величину, пропорційну енергії на одиницю спектрального інтервалу.

Структуру плівок на основі ВПС з додаванням полівінілового спирту вивчали методом ІЧ спектроскопії на спектрофотометрі «Nicolet 2400». Оптичну густину характеризували інтенсивністю поглинання D , визначеною методом базової лінії. В якості характеристичних смуг використовували смугу 3350 см^{-1} , котру можна віднести до внутрішньомолекулярних водневих зв'язків, і смуги 3405 см^{-1} та 3305 см^{-1} , що відносяться до міжмолекулярних водневих зв'язків [9].

Отримані результати опрацьовували методами математичної статистики з достовірністю $0,95\%$. Повторюваність експерименту – трикратна.

Для дослідження структури поверхні плівок на основі водних систем використовували оптичний мікроскоп Intel Play зі збільшенням $\times 200$. Плівки виготовлялися змочуванням поліетиленової (інертної) підкладки з подальшим природним висушуванням протягом 3 діб. При цьому температура навколишнього середовища коливалася в межах $23 \pm 2^\circ\text{C}$, при вологості повітря $83 \pm 2\%$.

Результати і їх обговорення

На рис. 1 представлено гістограму логарифмічної залежності густини розсіяння світла Q глобулами водної системи з NaКМЦ,

концентрацією $C = 0,075\text{ г/л}$ при температурі 25°C . Аналіз максимумів розсіяння світла показав присутність у ВПС розсіювальних центрів трьох усереднених розмірів: 13 нм , 80 нм і 600 нм . Максимум розсіяння світла, що відповідає 13 нм ми пов'язуємо з розміром глобул NaКМЦ у воді, на нього припадає 90% об'ємної густини глобул у ВПС (рис. 2).



Рис.1. Гістограма логарифмічної залежності розподілу інтенсивності розсіяння світла на глобулах ВПС з NaКМЦ ($C = 0,075\text{ г/л}$)

Максимуми розсіяння світла, що відповідають 80 нм і 600 нм на нашу думку пов'язані з коагуляцією полімера і являють собою утворення з декількох полімерних глобул.



Рис.2. Гістограма логарифмічної залежності об'ємної густини розподілу глобул за розмірами у ВПС з NaКМЦ ($C = 0,075\text{ г/л}$)

Експериментальні дослідження показали, що в інтервалі температур від 20°C до 45°C відносний показник заломлення ВПС монотонно спадає зі збільшенням температури. Додавання у воду солі і полімерів збільшує величину показника заломлення води (рис.3), що свідчить про збільшення густини ВПС.

Апроксимація експериментальних точок методом найменших квадратів дала можливість оцінити вклад різних компонентів цієї рідинної системи у температурну дисперсію показника заломлення ВПС: ПАА зменшує залежність показника заломлення від температури. Поліакриламід-сіль зменшує вплив ПАА на залежність $n(T)$. 5% концентрація NaКМЦ від загальної маси ВПС, компенсує вплив 0,3% ПАА на характер залежності показника заломлення. Додавання сульфату натрію (Na_2SO_4) призводить до збільшення величини показника заломлення; збільшення швидкості спадання температурного коефіцієнта ВПС, що відображається на температурних залежностях густини.

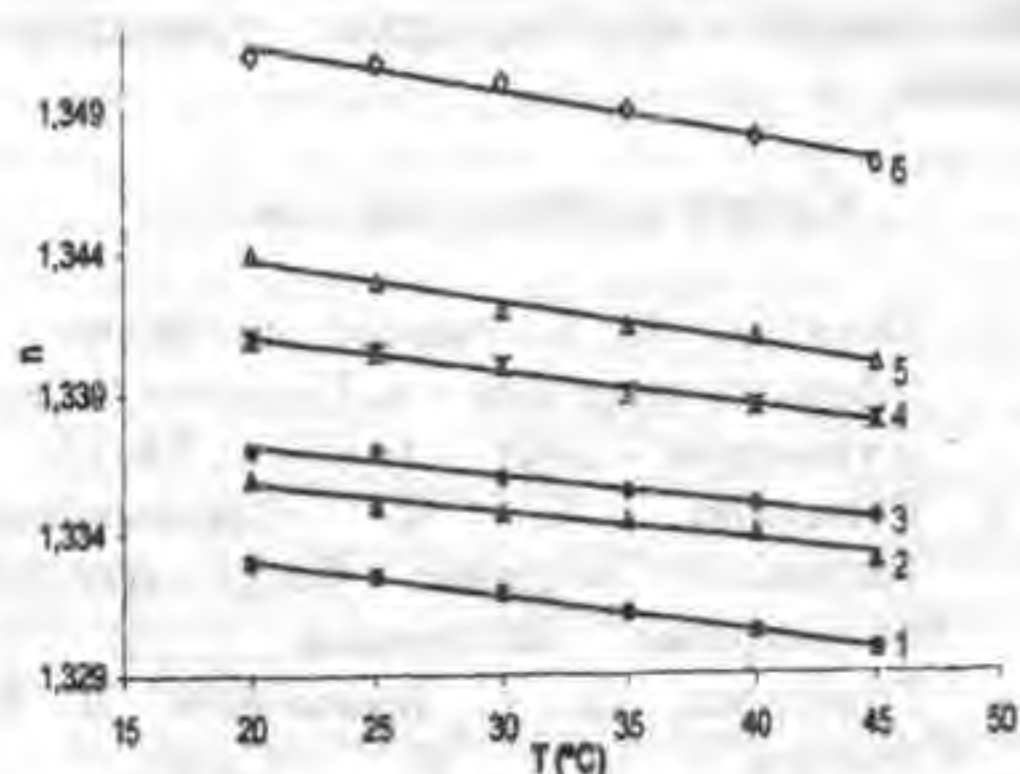


Рис.3. Залежність показника заломлення n від температури T : 1-вода (дистильована); 2-вода (99,7%)+ПАА (0,3%); 3-вода (97,2%)+ NaКМЦ (2,5%)+ПАА (0,3%); 4-вода (94,7%)+NaКМЦ (5%)+ПАА (0,3%); 5-вода (94,7%)+ Na_2SO_4 (5%)+ПАА (0,3%); 6-вода (94,7%)+ Na_2SO_4 (5%)+ПАА (0,3%)+ NaКМЦ (5%).

Порівняльний аналіз впливу окремих компонентів на оптичні властивості ВПС свідчить, що найбільш вагомий вклад у величину показника заломлення вносять солі Na_2SO_4 , NaКМЦ.

Спектр фотолюмінесценції чистого NaКМЦ при кімнатній температурі являє собою смугу шириною 150 нм з максимумом в області 565 нм (рис. 4, крива 1). При температурі рідкого азоту (крива 2) в спектрі домінує нова смуга з максимумом близько 475 нм. У водній системі максимум спектра зміщується на 5 нм у бік коротких хвиль, крім цього дещо збільшується ширина смуги (крива 3). Причиною деформації спектра чистого NaКМЦ в порівнянні з водною системою може бути перепоглинання емісії в матеріалі (самопоглинання), тобто ефект внутрішнього світлофільтра.

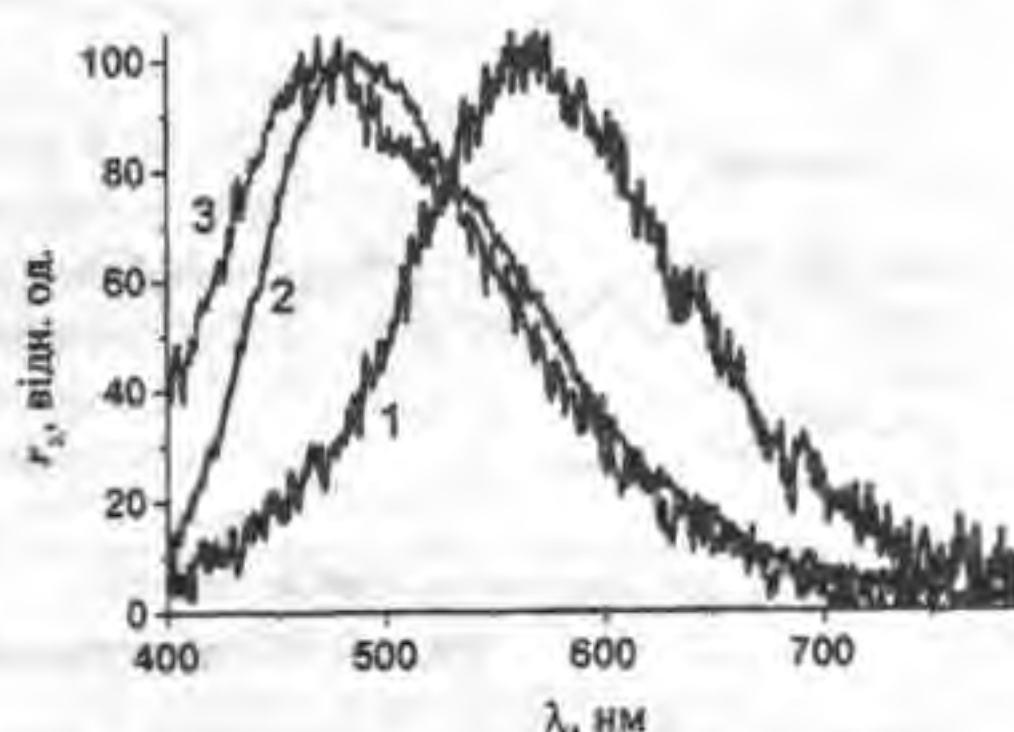


Рис.4. Спектри фотолюмінесценції чистого NaКМЦ при 300 К (1) і 80 К (2), а також спектр водної системи $\text{H}_2\text{O}+5\%\text{NaКМЦ}$ при 80 К (3).

При 80 К поліакриламід у водній системі виявляє одну широкую смугу люмінесценції з максимумом в області 450 нм (рис. 5, крива 1). Спектральна крива чистого поліакриламід (крива 2) спотворена подібно до випадку з NaКМЦ, що дозволяє й тут припустити вплив самопоглинання.

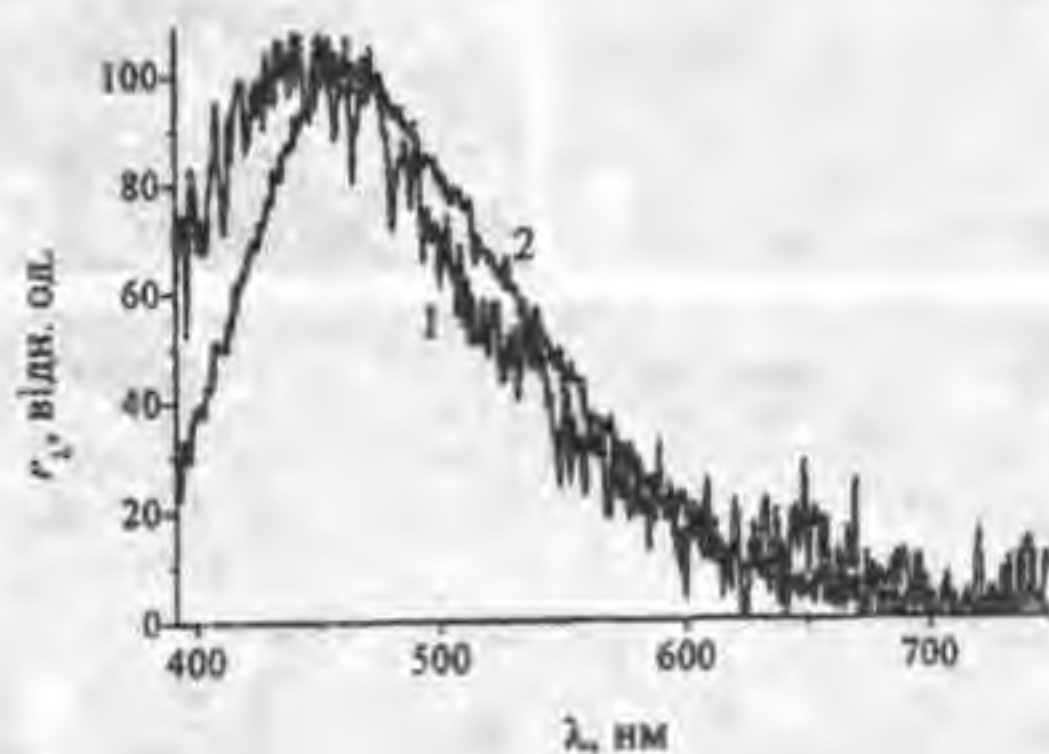


Рис.5. Спектри фотолюмінесценції водної системи $\text{H}_2\text{O}+5\%\text{ПАА}$ (1) і чистого ПАА (2) при 80 К.

Аналіз ІЧ-спектрів плівок (рис.6), отриманих із досліджуваних ВПС, свідчить про збільшення кількості між- і внутрішньомолекулярних водневих зв'язків при введенні в водні системи другого матричного полімера. Найбільша кількість між- і внутрішньомолекулярних водневих зв'язків спостерігається в плівках, отриманих на основі полівінілового спирту (ПВС) та NaКМЦ. На нашу думку, це пов'язано з тим, що саме в такому складі сумарно спостерігається велика кількість іонів гідроксиду і атомів кисню.

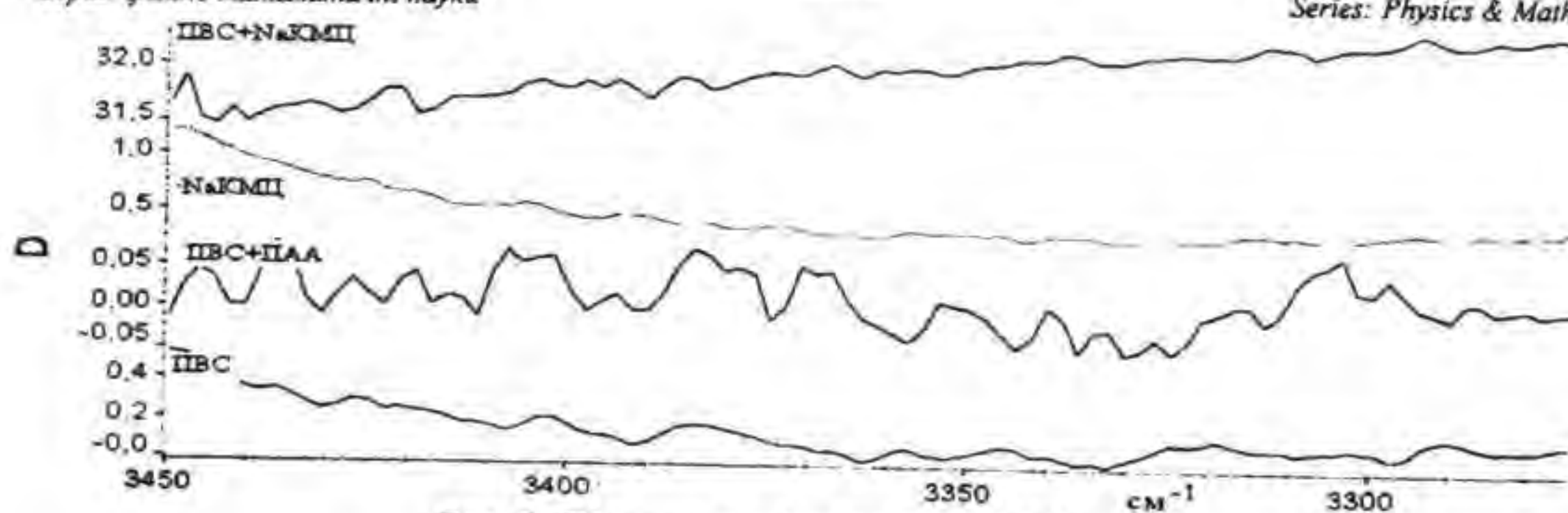


Рис. 6. ІЧ спектри плівок на основі ВПС

Порівняльний аналіз морфології плівок (рис.7) свідчить про утворення у водній системі ПВС+NaКМЦ невеликої кількості глобулярних структур, хоча самі плівки мають фібрилярну структуру. Оскільки NaКМЦ є жорсткоцепним полімером, то утворення глобулярних структур в суміші ПВС+NaКМЦ може свідчити про великі значення сил електростатичного відштовхування між макромолекулами.

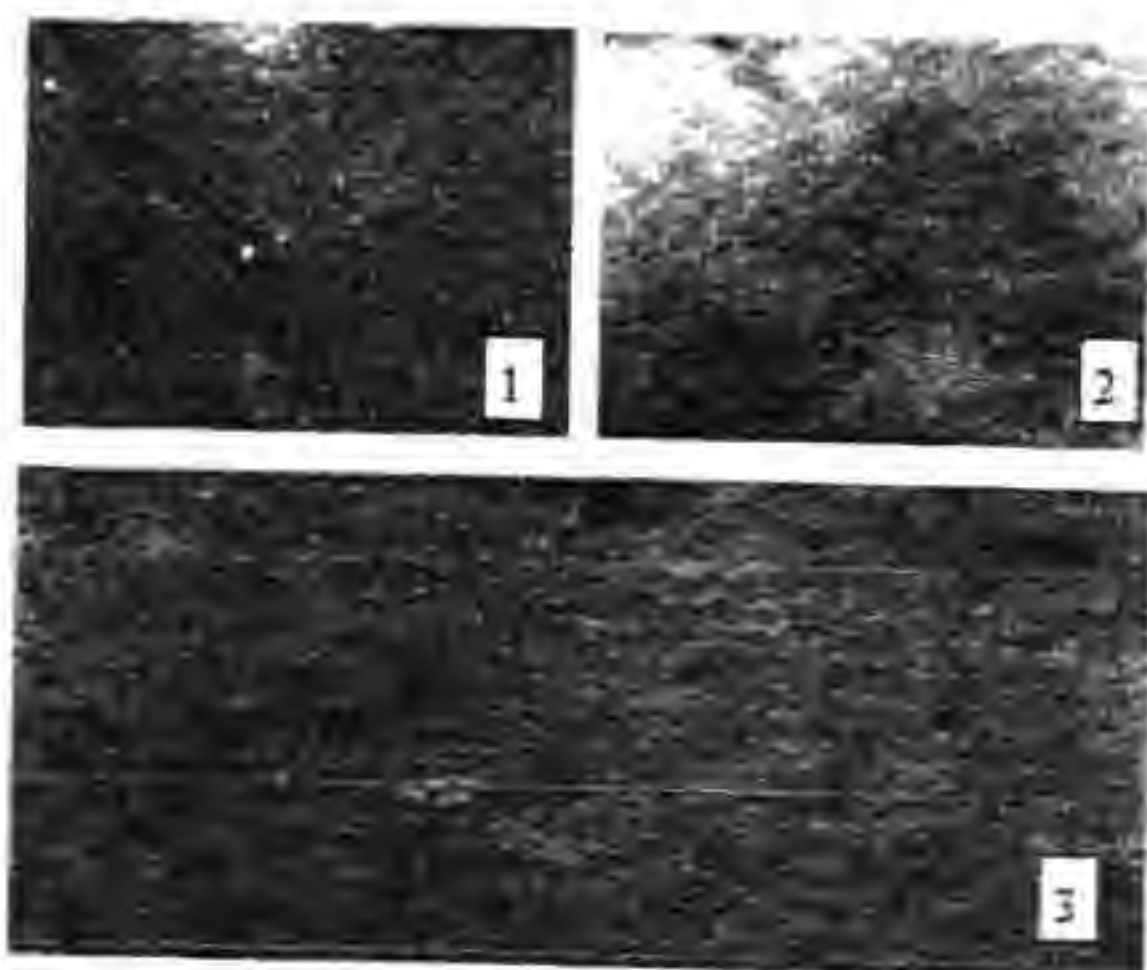


Рис.7. Структура плівок, отриманих з ВПС.
Збільшення $\times 60$. Домішки: 1 – NaКМЦ;
2 – ПВС; 3 – (NaКМЦ:ПВС=1:2)

Висновки:

Проведені дослідження показали, що NaКМЦ утворює у воді глобули з середнім діаметром 13 нм і коагулює у агрегати з максимальним розміром близько 600 нм. Таким чином при виготовленні плівок на основі водно-полімерних систем необхідно враховувати розмір агрегатів у ВПС що, як показує аналіз морфології поверхні плівок проявляються у вигляді неоднорідностей.

Аналіз термічних залежностей показника

заломлення ВПС показав різний характер впливу домішок водорозчинних полімерів на величину дисперсії показника заломлення ВПС. Тобто на необхідність врахування при виготовленні плівок з ВПС взаємозв'язку концентрація – температура обробки.

Список використаних джерел

1. Порядин, А. Кризисное положение с отходами упаковки / А. Порядин // Тара и упаковка. – 2001. – № 4. – С. 28–32.
2. Гончарова, Е. П. Современные тенденции создания биоразлагаемых полимерных материалов / Е. П. Гончарова, О. А. Ермолович, Л. С. Пинчук, В. Е. Сыцко // Материаловедение. – 2006. – № 9. – С. 37–44.
3. Гумаргалиева, К. З. Биосовместимость и биодеструкция полиолефинов / К. З. Гумаргалиева // Пластические массы. – 2001. – № 9. – С. 39–43.
4. Гончарова Е.П. Репелентная биоразрушаемая пленка для упаковывания текстильных и меховых изделий / Е.П. Гончарова // МТИ. – 2009. – № 2. – С. 51–54.
5. Пинчук, Л. С. Полимерные пленки, содержащие ингибиторы коррозии / Л. С. Пинчук, А. С. Неверов. – М.:Химия, 1993. – 176 с.
6. Патент RU 96101147
7. Патент UK 2374580
8. Handbook of Fiber Chemistry / 3 Edition CRS Press 2007. – 1044 p.
9. Тарутин Л. И., Позднякова Ф. О. Спектральный анализ полимеров. – Л.: Химия. – 1986

Надійшла до редколегії 01.10.09

УДК 539.26

Ніколюк П.К., д. ф.-м. н., проф.,
Баран В.В., інж
Серпак Н.Ф., асп.,
Лукіянчук С.М., асп.,
Грущенко Н.Л., асп.,
Ніколайчук В.Я., асист.,
Чухно М.В., студ.

Явище дегібридизації в купратах

Проведено теоретичний аналіз впливу електрон-фононної взаємодії у високотемпературних надпровідниках з урахуванням явища дегібридизації. Показана важлива роль даного явища в сильно корельованих системах, де енергія між електронної взаємодії різко зростає. В кінцевому випадку це приводить до розщеплення (біфуркації) електронних станів валентної зони високотемпературних надпровідників (ВТНП). Показано, що для надпровідного спарювання необхідно, щоб ефективна константа зв'язку перевищувала певну величину. Записано гамільтоніан системи з урахуванням дегібридизаційних процесів у електронній системі ВТНП.

Ключові слова: дегібридизація, електронна структура, електрон-фононна взаємодія, високотемпературні надпровідники

E-mail: pknikol@planeta.vn.ua

Високотемпературні купрати володіють сукупністю конкуруючих впорядкованих станів, таких як впорядкування типу зарядової густинної хвилі та спінової густинної хвилі, спінове пайєрлісівське впорядкування, смужкове (stripes) впорядкування та впорядкування у вигляді клітинок на шахівниці (checkerboard) і, нарешті, псевдощілинне та надпровідне [1]. Перераховані види впорядкування часто конкурують між собою, тому важливим є питання про основний стан високотемпературних купратів [2]. Логічно припустити, що існує фактор, який спричиняє виникнення спектру таких змін в електронній структурі ВТНП. Таким фактором, на наш погляд, є дегібридизація, детально описана в роботах [3-8]. В даному випадку можна говорити про нерівноважний стан електронної системи ВТНП або про біфуркацію електронних станів,

Nikoluyk P.K., Dr. Sci., Prof.,
Baran V. V., Eng,
Serpak N.F., PhD stud.,
Lukiyanchuk S.M., PhD stud.,
Grushchenko N.L., PhD stud.,
Nikolaichuk V. Y., Ass.,
Chuhno M.V., stud.

Degibridizatin phenomenon in cuprates

The theoretical consideration of electron-phonon interaction for high-temperature superconductors has been performed by means of degibridization phenomenon/ The important role of this phenomenon in strong correlation systems, where interelectron interaction sharply growthed, is shown. One was shown that in final case this come to division (separation) of valence zone electronic states. For superconducting pairing it is necessary effective relation constant was exceeded the definite value. The system Hamiltonian by means of degibridization processes in electronic system of HTSC had been written.

key words: degibridization, electronic structure, electron-phonon interaction, high-temperature superconductors

спричинену впливом дегібридизаційного фактора. Іншими словами, електронні стани системи виводяться із рівноважного стану за рахунок допущення вихідних сполук. Прояв дегібридизаційних особливостей, в свою чергу, спостерігається при допущенні вихідних сполук, що являють собою моттівські діелектрики. Високотемпературні надпровідники – купрати міді – належать до класу сильно корельованих систем, в яких характерна енергія кулонівської взаємодії більше або порядку ширини зон [9]. В таких системах спостерігаються тенденції як до магнітного, так і до надпровідного впорядкування. Зв'язок магнітного і надпровідного станів найбільш детально може бути досліджений в рамках моделі Хаббарда. В представленні вторинного квантування гамільтоніан моделі записується таким чином:

© Ніколюк П.К., Баран В.В., Серпак Н.Ф.,
Лукіянчук С.М., Грущенко Н.Л., Ніколайчук В.Я.,
Чухно М.В.

Представлено: член-кор. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Макара В.А

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (1)$$

де $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ - число електронів із спіном σ на даному вузлі. В рівняння (1) входять два параметри: t - матричний елемент переходу між найближчими вузлами і U - параметр кулонівського відштовхування електронів на одному вузлі.

Дегібридизація електронних станів спричиняє різке зростання цього параметру, так що відношення $U/t \gg 1$. Важливим наслідком електронних кореляцій при умові сильної дегібридизації теорія Хаббарда дає розщеплення вихідної електронної смуги на дві підсмуги, відстань між якими порядку U .

Таким чином, розглядається модель, в якій електрони взаємодіють не з фононами, а з електронними збудженнями, енергія яких суттєво більше енергії фононів. Факт впливу сильних ефектів локального поля на виникнення високих T_c в системах із сильною взаємодією розглядався, зокрема, в роботі [10]. Спроби застосувати для пояснення механізму надпровідності більш високоенергетичний "клей" мають давню історію. В якості такого механізму пропонувалось використати екситони, плазмони, магнони, згустки спінів - так звані "спінові мішки" та ряд інших електронних збуджень, енергії яких можуть суттєво перевищують енергії фононів.

Проте рішучої відмови від електрон-фононного механізму не відбулося. Навпаки, ряд досліджень [11-13] намагаються пояснити механізм виникнення стану високотемпературної надпровідності на основі традиційного електрон-фононного механізму. При цьому приводяться такі факти: з теорії Бардіна-Купера-Шріффера випливає, що критична температура надпровідного переходу T_c може бути представлена таким чином

$$T_c \approx \omega_{ph} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right), \quad (2)$$

де ω_{ph} - середня фононна частота, λ - константа електрон-фононної взаємодії. Проте у випадку ВТНП частота фононної взаємодії може значно зростати, оскільки визначається зв'язками типу $Cu3d(x^2-y^2)-O2p$. Зростання середньої фононної частоти в даному випадку обумовлене малою масою атомів кисню.

Взагалі, для оксидів міді характерна конкуренція двох енергій - енергії сильної внутрішньоатомної взаємодії $d-d$ електронів та енергії сильної мідь-кисневої гібридизації [14]. Перевага енергії мідь-кисневої гібридизації над енергією внутрішньоатомної взаємодії в кінцевому випадку приводить до виникнення в структурі ВТНП сегментів типу CuO_2 . Очевидно, дана обставина характерна для всіх без винятку ВТНП. На сильну гібридизацію типу $Cu3d(x^2-y^2)-O2p$, що має місце у високотемпературних надпровідниках, звертає увагу Р.В. Anderson в своїй роботі [15]. Michael R. Norman в роботі [16] також звертає увагу на те, що енергія $Cu3d(x^2-y^2)-O2p$ взаємодії майже рівна енергії локалізованих $Cu3d$ -електронів. Тому сильний $Cu3d(x^2-y^2)-O2p$ зв'язок являється основою для прояву дегібридизаційних ефектів, що приводять до розділення електронних станів валентної зони ВТНП. В результаті такого розділення якраз і з'являються електронно-структурні особливості у вигляді згустків електронних станів - смужок (stripes).

Таким чином, сильні електронні кореляції у ВТНП обумовлені виключно сильною мідь-кисневою гібридизацією, спроможною спричиняти розділення (біфуркацію) електронних станів ВТНП під впливом заколапсованих $Cu-O$ зв'язків.

Було доведено [17], що високі значення T_c можуть бути отримані лише в системах з сильною електрон-електронною взаємодією типу гібридизації $Cu3d(x^2-y^2)-O2p$. Така гібридизація приводить до сильного електронного відштовхування електронів таких заколапсованих орбіталей та електронів, що формують валентну зону ВТНП.

Важливо зауважити, що пояснити високотемпературну надпровідність можна в рамках моделі із сильною електрон-фононною взаємодією. Розрахунки [17] константи електрон-фононної взаємодії λ , що фігурує в рівнянні (2), дають значення в межах $0.6 \leq \lambda \leq 2$ (для

класичних надпровідників $\lambda \ll 1$). Головні причини, що сприяють відносно великим значенням λ в купратних надпровідниках, є наступні: 1) сильна мідь-киснева гібридизація; при цьому молекулярні орбіталі $Cu3d(x^2-y^2)-O2p$ спричиняють розділення електронних станів валентних електронних станів ВТНП-сполуки, так що в результаті густина електронних станів на поверхні Фермі досягає значно більших значень, чим в нормальних металах (наприклад, густина електронних станів в сполуці $La_{1-x}Sr_xCuO_2$ на порядок вища, чим в елементарній міді [7]); 2) участь в процесах електрон-фононної взаємодії атомів кисню, що дозволяє суттєво підняти частоти коливань ω_{ph} і, таким чином, значно підвищити T_c згідно (1); 3) значна доля іонної складової на зв'язках $Cu-O$.

Остання обставина сприяє додатковому накопиченню носіїв на площинах $Cu-O$ та послабленню екранування в напрямках, перпендикулярних до мідь-кисневих площин. Це, в свою чергу, приводить до сильної електрон-фононної взаємодії на $Cu-O$ площині через зміну потенціалу Маделунга на атомах Cu і O за рахунок фононів, що обумовлюють рух позаплощинних іонів. Константа зв'язку з такими модами досягає 4.

В роботі [18] зауважено, що врахування кулонівського відштовхування в рамках електрон-фононного механізму надпровідності показує, що для надпровідного спарювання необхідно, щоб ефективна константа зв'язку перевищувала не усереднену по зоні Бріллюена кулонівську енергію U_c , а її логарифмічно ослаблене значення, тобто

$$|V| = \frac{U_c}{1 + g_F U_c \ln(E_F / \hbar \omega_D)} \quad (3)$$

де g_F – густина станів на рівні Фермі, $\hbar \omega_D$ – дебаївська енергія, що визначає

енергетичний масштаб притягання електронів в околі поверхні Фермі. В нашому випадку ми маємо справу із зростанням величини U_c за рахунок біфуркації електронних станів, спричиненої впливом замкнутих електронних орбіталей на електронну структуру валентної зони ВТНП. В результаті такого розділення якраз і з'являються електронно-структурні особливості у вигляді згустків електронних станів – смужок (stripes).

С. Howald із співавторами [2], використавши скануючу тунельну спектроскопію, знайшли, що у високотемпературному надпровіднику $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8.8}$ має місце періодичне зростання густини електронних станів саме у напрямку зв'язків $Cu-O$. Автори роботи [1] пояснюють періодичний зарядовий порядок в сполуці $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8.8}$ модуляціями електронної амплітуди.

Для опису варіацій електронної структури ми пропонуємо гамільтоніан у вигляді:

$$\hat{H} = \hat{H}_{BCS} + \hat{H}_{DG},$$

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}\sigma} (E_{\vec{k}} - \mu_{DG}) C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} (C_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} C_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} + C_{-\vec{k}\downarrow} C_{\vec{k}\uparrow})$$

$$\hat{H}_{DG} = V (C_{0\uparrow}^{\dagger} C_{0\uparrow} + C_{0\downarrow}^{\dagger} C_{0\downarrow}), \quad (4)$$

де μ_{DG} – хімічний потенціал, що визначається перенормованою завдяки впливу дегібридаційного фактору густиною станів на рівні Фермі; $E_{\vec{k}}$ – закон дисперсії, що визначається типом кристалічної структури ВТНП. Саме доданок $\hat{H}_{DG}$ загального гамільтоніану (4) є визначальним з точки зору утвердження високотемпературної надпровідності.

Розрахунок впливу такого потенціалу на електронну структуру ВТНП проведений в роботі [19].

Тому в даному випадку треба говорити не про розсіяння носіїв на дефектах структури чи домішках, як це робиться в роботі [20], а про збурюючий потенціал V , періодично розташований в межах кристалу

Метод розв'язання рівняння (4) і отримання локальної густини станів являє собою стандартне перетворення Боголюбова разом із застосуванням методики гріновських функцій.

Отриманий в роботі гамільтоніан враховує особливості електронної структури ВТНП. Виникнення δ -подібного резонансного піку електронних станів, що формується в околі рівня Фермі в результаті дії дегібридаційного фактору, підтверджено експериментально [18].

Таким чином, у ВТНП-системах пояснення основних особливостей може бути проведено на основі механізму електрон-фононої взаємодії. Проте сама по собі електрон-фононна взаємодія не може забезпечити d -зпарювання, що спостерігається в купратах. Значить повинен існувати механізм, який пояснює це зпарювання. Цим механізмом є саме дегібридація електронних станів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Daniel Podolsky, Eugene Demler, Kedar Damle, and B.I. Halperin. Translational symmetry breaking in the superconducting state of the cuprates: Analysis of the quasiparticle density of states // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67, № 9. – P. 094514.
2. Howald, H. Eisaki, N. Kaneko, M. Greven, and A. Kapitulnik. Periodic density-of-states modulations in superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-x}$ // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67, № 1. – P. 11206 – 11219.
3. Ніколюк П.К., Шнерко В.Н., Гринчук В.Г., Шкрабалюк П.А. Рентгеновские полосы соединения EuCu_2Si_2 // УФЖ. – 1990. – т. 35, № 7. – С. 1076 – 1077.
4. Ніколюк П.К. Резонанс Абрикосова-Сула в CeCu_2Si_2 та EuCu_2Si_2 // Металлофиз. и новейшие технологии. – 2001. – Т. 23, № 10. – С. 176 – 180.
5. Ніколюк П.К. Фотоелектронне та рентгеноспектральне дослідження інтерметаліду CeCu_2Si_2 // УФЖ. – 2001. – т. 46, № 7. – С. 752 – 754.
6. Ніколюк П.К. Явище дегібридації в сполуці CeCu_2Si_2 // Металлофиз. и новейшие технологии. – 2001. – Т. 23, № 2. – С. 147 – 152.
7. P.K. Nikolyuk, V.G. Dzis, V.D. Martynyuk, V.Ya. Nikolaichuk, A.V. Yushchenko. Dehybridization in cuprates // Ukr. Phys. J. – 2004. – V. 49, № 10. – P. 996-999.
8. Ніколюк П.К., Дзись В.Г., Лукіяничук С.М., Бурдейна Л.І., Ніколайчук В.Я., Баран В.В. Дегібридація в сполуках RAl_2Si_2 // Вісник Київського у-ту. – 2009, сер. фіз., вип. 2 – с. 120-125.
9. Ю.Л. Изюмов. Магнетизм и сверхпроводимость в сильно коррелированной системе // УФН. – 1991. – т. 161, № 11. – с. 1-46.
10. Е.Г. Максимов, О.В. Долгов О возможных механизмах высокотемпературной сверхпроводимости. – УФН. – 2007. – т. 177. – с. 983-987.
11. В.Л. Гинзбург Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра. – УФН – 2000. – т. 170. – с. 619-630.
12. Е.Г. Максимов, Д.Ю. Саврасов, С.Ю. Саврасов. Электрон-фононное взаимодействие и физические свойства металлов. – УФН. – 1997. – т. 167. – с. 353-376.
13. В.А. Гавричков, Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников Электронная структура и симметрия параметра порядка высокотемпературных сверхпроводников. – УФН. – 2000. – т. 170. – с. 189-192.
14. В.А. Гавричков, Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников Электронная структура и симметрия порядка высокотемпературных сверхпроводников // Успехи физических наук. – 2000. – Т. 170, № 2. – С. 189-192.
15. P.W. Anderson. Present status of the theory of the high T_c cuprates. -arXiv:cond-mat/0510053v2.
16. Michael R. Norman. Physics, 1, 21 (2008).
17. Е.Г. Максимов Проблема высокотемпературной сверхпроводимости Современное состояние // УФН. – 2000. – т. 170, № 10. – с. 1033-1061.
18. В.И. Белявский, Ю.В. Копяев Сверхпроводимость отталкивающихся частиц // УФН. – 2006. – т. 176, № 5. – с. 457-485.
19. П.К. Ніколюк, В.Я. Ніколайчук, В.Г. Дзись, В.М. Чубатюк, А.В. Ющенко. Явище дегібридації в купратах // Доп. НАНУ. – 2007. – № 5. – с. 104-109.
20. Degang Zhang and C.S. Ting. Energy-dependent modulations in the local density of states of the cuprate superconductors // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67. – P. 1000506-1 – 100506-4.

УДК 536.21: 539.2

Пурський О.І., к.ф.-м.н., доцент
Сисоєв В.М., д.ф.-м.н., професор

Вплив обергального руху молекул на ізобарну теплопровідність твердого β - C_6H_{12}

Теплопровідність твердого C_6H_{12} виміряна під тиском власних насичених парів в діапазоні температур від 80K до температури плавлення. З підвищенням температури ізобарна теплопровідність зменшується в обох фазах. Відносне зменшення теплопровідності при структурному фазовому $\alpha \rightarrow \beta$ переході складає 87%. Вплив орієнтаційного руху молекул на процеси переносу тепла в β -фазі твердого C_6H_{12} досліджується модифікованим методом приведених координат.

Ключові слова: теплопровідність, фонони, тепловий опір.

E-mail: Pursky_O@ukr.net

1. Introduction

The thermal physical properties of simple molecular crystals (SMC) depend to a large degree on orientational motion of molecules [1]. Depending on the substance and temperature the form of rotational molecular motion in SMC crystals varies over a wide range, i.e., from librations at small angles to hindered or practically free rotation. Experimental studies of the thermal conductivity Λ have established the generally peculiarities of translation-rotation coupling (TRC) in ordered and disordered SMC under constant density. In orientationally-ordered (OO) phases of MC TRC makes to additional thermal resistance $W=1/\Lambda$, this

O.I. Pursky, Ph.D.
Sysoev V. M. Dr. Sci., Prof.

Molecular rotation effect on the isobaric thermal conductivity of solid β - C_6H_{12}

The thermal conductivity of solid cyclohexane (C_6H_{12}) was measured at saturated vapour pressure in temperature interval from 80K to the melting. It has been found that with a temperature increase the isobaric thermal conductivity decreases. The relative increase in thermal conductivity at phase $\alpha \rightarrow \beta$ transition is about 87%. Influence rotational molecular motion on the heat transfer processes of β - C_6H_{12} is investigated by the modified method of reduced coordinates.

Key Words: thermal conductivity, phonons, thermal resistance

leads to essential deviations of the thermal conductivity from a $\Lambda \propto 1/T$ law. In orientationally-disordered (OD) phases, unfreezing of the rotational motion of molecules as whole is accompanied by an increase in the isochoric thermal conductivity [2]. Up to now, the mechanisms influencing of rotational molecular motion on the heat transfer processes in SMC, under isobaric condition are still not completely understood.

In this work, we present our studies results of isobaric thermal conductivity of solid cyclohexane. The measurements were conducted in OO and OD phases of C_6H_{12} . The role of TRC in heat transfer processes of C_6H_{12} is investigated within modified

method of reduced coordinates by the way of high [5] and atmospheric [6] pressures, these data appear to be somewhat contradictory. In particular, the experimental results cited in [6], show a minimum in thermal conductivity at about 240 K, which is not observed in [5]. The reported anomalous increase of thermal conductivity at increasing temperature within the range 150-186 K [6] was not observed in [5]. The data of these works show considerable distinctions (about 40%) in values of thermal conductivity, for the same conditions (P,T).

2. The object

Cyclohexane possesses spherical symmetry as a result of rotation of the molecules as well as form inherent structure. At present, two stable and one metastable phase of solid cyclohexane are known [3]. The metastable form is obtained by quenching either gas, liquid or phase β at 77 K. Under the saturated vapour pressure solid C_6H_{12} has two crystalline modifications. On cooling 279.8 K, liquid C_6H_{12} crystallizes into a face-centred cubic (fcc) β -form of space symmetry group $Fm\bar{3}m$, with four molecules per unit cell. From the NMR measurements it was concluded that, in β -phase, the molecules have a considerable freedom of reorientation, such that the intramolecular contribution to the second moment above 220 K, the intermolecular contribution vanishes [4]. Because of low entropy of melting $\Delta S_f/R=1.14$ (which is much lower than the Timmermans criterion for OD phases $\Delta S_f/R=2.5$), the β -phase of C_6H_{12} may be classified as "plastic" [3].

On further cooling to temperatures just below 186.1 K, the fcc β -phase transforms into a monoclinic one of space symmetry $C2/c$ with $Z=4$. The first order transition at 186.1 K is isothermal, with an entropy variation of $\Delta S_f/R=4.35$ [3]. On warming from 155 to 180 K, the second moment of the NMR decreases to a value indicates the reorientation of the molecules about their triad axis. Just below 186 K the reorientation frequency is of the order $3 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$ [4]. To date, the thermal conductivity of solid C_6H_{12} has been measured at

3. Experimental technique

The thermal conductivity of solid C_6H_{12} was studied by the linear-flow method under saturated vapor pressure. It is pertinent to note that the pressures of the order of few ten of bars practically do not effect the magnitude of thermal conductivity, therefore the data may be considered as referring to zero pressure. The sample ampoule was a stainless steel 70 mm long tube 7.2 mm in diameter with the wall thickness 0.3 mm. The temperature sensors were germanium resistance thermometers and a copper-constantan thermocouple mounted on the copper rings attached to the cell. The measurements were performed using a modified heat potentiometer [7], which made it possible to minimize the error in determination of the thermal conductivity. Uncontrolled heat fluxes due to thermal radiation were reduced considerably with a radiation shield, on which a system of thermocouples and a precision heat controller reproduced the temperature field of the measuring cell. The samples were grown by solidifying the liquid C_6H_{12} at temperature just below the 279.8 K, with cooling the bottom zone of the measuring ampoule to the liquid nitrogen temperature. The crystallization front moved from

the bottom to the top of the ampoule. Two samples were investigated (the purity of solid C_6H_{12} was no worse than 99.9%). The accuracy of the thermal conductivity measurement was 5%.

4. Results and discussion

The experimental results are shown in Fig. 1. The different symbols correspond to two different samples. The solid line shows smoothed values. In both phases, the isobaric thermal conductivity decreases with temperature increasing. In low-temperature α -phase the temperature dependence of thermal conductivity is $\Lambda_{p(\alpha)} \propto T^{-1.15}$, whereas in high-temperature β -phase $\Lambda_{p(\beta)} \propto T^{-0.31}$. Such difference in β -phase can be related to approaching thermal conductivity to its lower limit Λ_{min} and additional influence of rotational molecular motion. The concept of the "minimum thermal conductivity" is based on a heat transfer theory proposed by Einstein [8]. By this theory the atomic vibrations are assumed to be incoherent and therefore heat transport occurs as a diffusive heat transfer directly from site to site on a time scale of one-half the period of oscillation. In the majority of cases, Einstein's model could not describe the thermal conductivity of dielectric crystals but can be use to understanding the heat transfer processes in crystals with different types of orientational disorder. At temperature increases, the phonon-phonon scattering processes enhance, and the phonons mean free path l decreases. In the high-temperature region (at temperature near or over the Debye temperature), this leads to limitation of l by a distance of the order of few wavelength, and significant deviations of the thermal conductivity from a $\Lambda \propto 1/T$ law [9]. If all vibrational modes scatter for a distance of $\lambda/2$ (where λ is an acoustic

wavelength, and whose frequencies of oscillation are

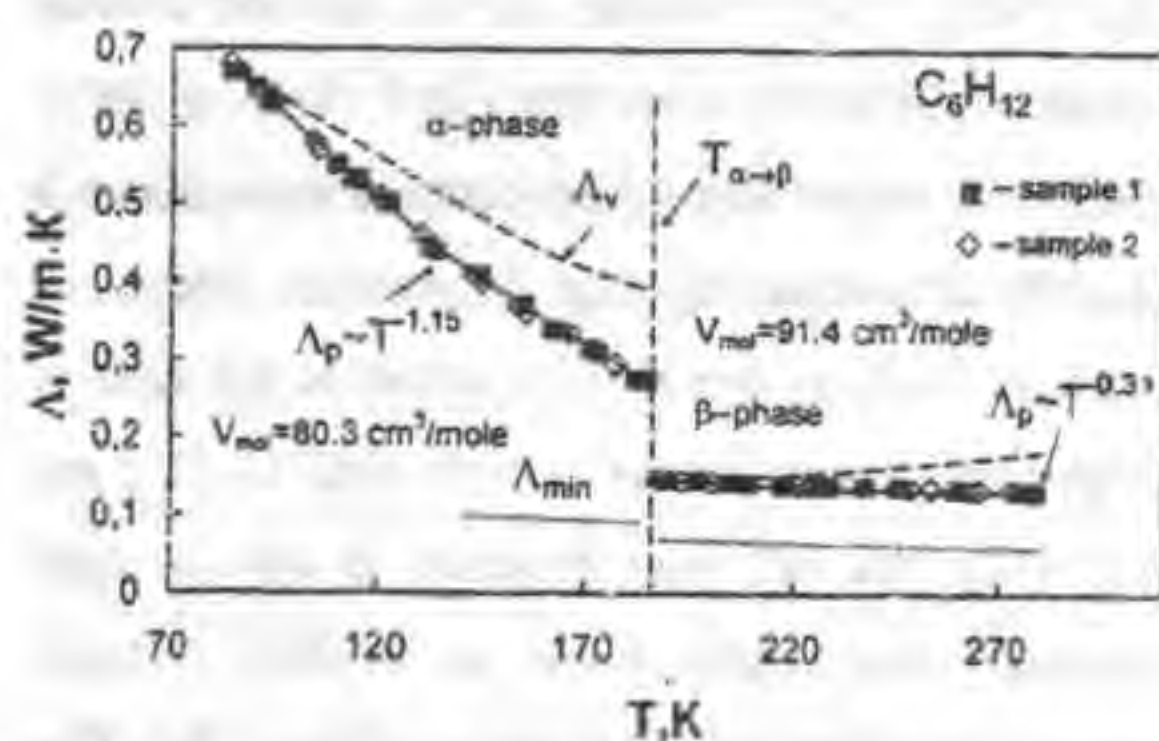


Fig. 1. Isobaric and isochoric thermal conductivity of solid C_6H_{12} in the α and β phases. The different symbols correspond to two different samples. Solid line shows the smoothed experimental dependence. Dashed line is the thermal conductivity recalculated to constant molar volumes, according to formula (2). The lower limit of the thermal conductivity Λ_{min} calculated by Eq. (1) is shown as dotted line. $T_{\alpha \rightarrow \beta}$ is temperature of $\alpha \rightarrow \beta$ phase transition.

given by the low frequency speed of sound $\omega = 2\pi\nu/\lambda$), the thermal conductivity reaches its lower limit [8]:

$$\Lambda_{min} = \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} k_B n^{2/3} \sum_i v_i \left\{ \left(\frac{T}{\Theta_i}\right)^{2\Theta_i/T} \int_0^{\Theta_i/T} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right\}, \quad (1)$$

The index i labels the three (one longitudinal and two transverse) sound modes with the sound velocities v_i , Θ_i is the Debye cutoff frequency for each polarization in Kelvins, $\Theta_i = v_i (\hbar/k_B) (6\pi^2 n)^{1/3}$, and n is the number density of atoms (molecules).

The dotted line in the lower part of the Fig. 1 is the lower limit of the thermal conductivity of solid C_6H_{12} calculated for the isobaric case, according to Eq. (1). The necessary data on the density and sound velocity for the calculation were taken from [10]. It can be seen that in high-temperature β -phase the isobaric thermal conductivity of solid C_6H_{12}

approaches its lower limit, being no more than twice that value. The proximity of the isobaric thermal conductivity to its lower limit in β -phase, gives us reason to expect that its temperature dependence is mainly determined by high-frequencies vibrational modes, much as this was observed in the case of high-temperatures phases of solid CHF_2Cl [11] and CO [12]. We call your attention to only a slight thermal conductivity jump at melting (relative increasing in thermal conductivity is about 7%). This is in good agreement with the data [3] indicating a low entropy of melting. The dashed line in Fig.1 represents the temperature dependence of the isochoric thermal conductivity Λ_v . The values of the isochoric thermal conductivity at gives temperatures were obtained by recalculating the experimental data on the isobaric thermal conductivity to constant molar volumes of $80.3 \text{ cm}^3/\text{mole}$ in α -phase and $94.1 \text{ cm}^3/\text{mole}$ in β -phase. The recalculation was done according to the formula [13]:

$$\Lambda_v = \Lambda_p \left(\frac{V(T)}{V_0} \right)^g, \quad (2)$$

where Λ_v is the isochoric thermal conductivity of the sample with a molar volume V_0 , $V(T)$ is the current molar volume of the free sample depending on the temperature, and $g = -(\partial \ln \Lambda / \partial \ln V)_T$ is the Bridgman coefficient, according to [14] was accepted equal 5.5.

With temperature increases, the isochoric thermal conductivity of solid C_6H_{12} decreases slower than $\Lambda \propto 1/T$ in α -phase and increases in β -phase. In our previous works [2,11,12], an increase of the thermal conductivity in the orientationally disordered phases of molecular crystals was explained by the weakening of phonon scattering by collective

rotational excitations since the correlations between rotations of neighbouring molecules weaken with temperature increase.

As noted above, the experimental studies of the isochoric thermal conductivity offer a clearer view of the role of molecular rotation motion in heat transfer processes, at $T \geq \Theta_D$. Under constant pressure, the influence of this kind of thermal motion on thermal conductivity is comparatively scantily known.

In present study, the influence of molecular rotation on the heat transfer processes under isobaric conditions are investigated within the modified method of reduced coordinates [15] by the separation of translation and translation-rotation contribution to the total thermal resistance $W = 1/\Lambda$. It is important that with this method there is no need to involve any approximate model. In so doing, we supposed that heat is mainly transferred by translational vibrations, irrespective of orientational ordering in the crystal. The calculations were carried out in assuming that contributions of different phonons scattering mechanisms to the total thermal resistance are additive. As a rule, the reduction parameters are $T_{\text{mol}} = \epsilon/k_B$, $\Lambda_{\text{mol}} = k_B / \sigma^2 \sqrt{\epsilon/\mu}$, and $V_{\text{mol}} = N\sigma^3$, where σ and ϵ are the parameters of Lennard-Jones potential, μ is the molar weight, and N is the total number of particles. In this study as the reducing parameters T_{mol} and V_{mol} we used temperatures and molar volumes of solid C_6H_{12} and Xe at the critical point T_c and V_c [16] (see table 1). Such a choice of critical coordinates is explained by the fact that, in the case of simple molecular substances, the critical parameters T_c and V_c are proportional to ϵ and σ^3 , respectively. However, the determination accuracy of critical parameters is much higher than the accuracy of potential parameters. Suggesting that the

thermal resistance of molecular crystals resulting from phonon-phonon scattering W^{pp} , when being expressed in terms of reduced coordinates ($W^*=W/W_{mol}$, $T^*=T/T_{mol}$), is identical to that for solidified inert gases at the same reduced volume $V^*=V/V_{mol}$, one can extract the phonon-phonon W^{pp} , and phonon-rotational W^{pr} , components of the thermal resistance.

The results of the calculations are presented in Fig. 2. The solid curve is the sum of the thermal component resistance. The phonon-phonon

of the phonon scattering by orientational subsystem of C_6H_{12} as the correlations of rotational molecular motion becomes weaker. This in agreement with data cited in [17], according to which the molecular rotational motion at premelting temperatures of solid

Substance	T_m , K	$V_m \cdot 10^{-6}$, m ³ /mole	$\sigma \cdot 10^{-10}$, m	W_{mol} , m $\times$ K/W
Xe	289.7	119.4	5.83	10
C_6H_{12}	553	380	7.99	7.93

Table 1. Reduced parameters for Xe and C_6H_{12} . C_6H_{12} is closely similar to that in the liquid state.

5. Conclusion

We have investigated the thermal conductivity of solid C_6H_{12} under saturated vapour pressure in temperature range from 80 K up to onset of melting. It has been found that with a temperature increase the isobaric thermal conductivity decreases in both phases. At $\alpha \rightarrow \beta$ phase transition occurs the thermal conductivity jump caused mainly by disordering processes in orientational subsystem. The molecular rotation effect on the heat transfer processes in solid C_6H_{12} is investigated by the modified method of reduced coordinates. The isobaric thermal conductivity in β -phase diminishes weakly with temperature. Such behavior is attributed to a weakening of the translation-rotation coupling as the rotational motion of the C_6H_{12} molecules becomes less hindered and by approaching thermal conductivity to its lower limit. The calculations of phonon-rotation thermal resistance in β -phase (Fig.

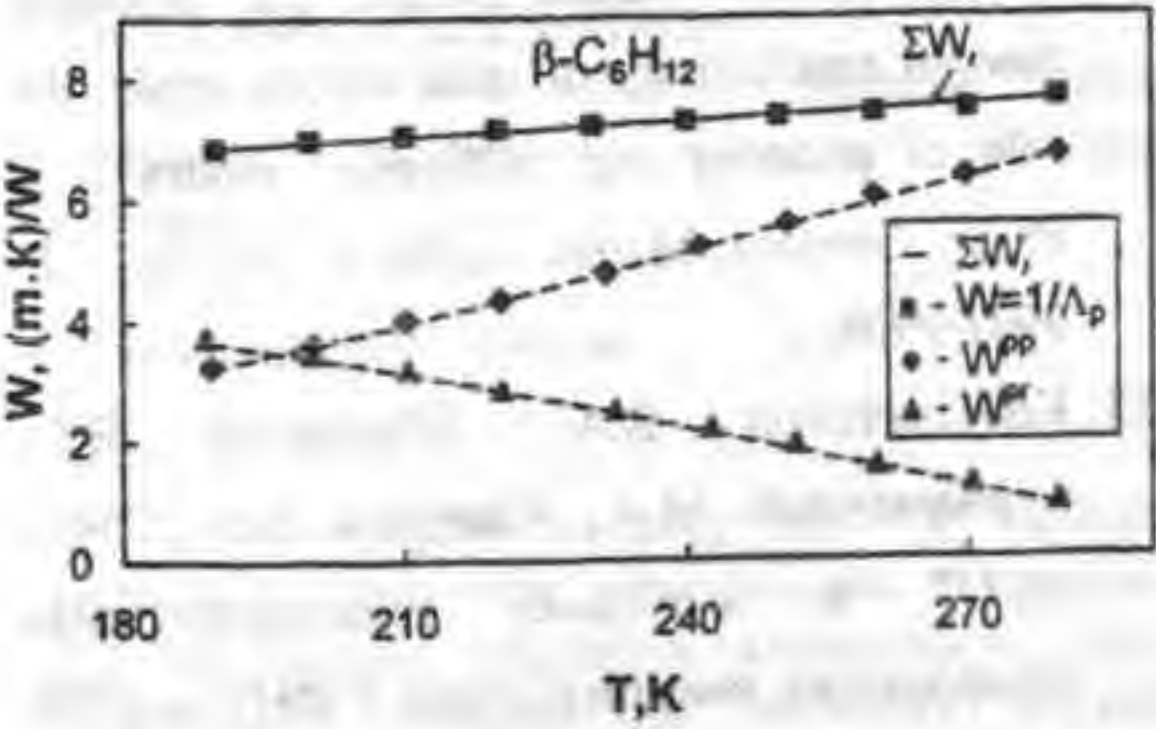


Fig. 2. Phonon-phonon, W^{pp} , and phonon-rotational, W^{pr} , components of the total thermal resistance in β -phase of solid C_6H_{12} . Solid line is the sum W_i of the thermal resistance components.

component W^{pp} increase with increasing temperature. In β -phase the phonon scattering by the orientational subsystem decreases. Immediately after phase transition W^{pr} exceeds the W^{pp} , this is in good agreement with the data [10] indicating a strong translation-rotation coupling in this temperature range. At premelting temperatures the additional contribution of W^{pr} to the total resistance is about 14% of the phonon-phonon component. A decrease of the phonon-rotation resistance relative to the maximum is around 60%. The observed effect can be attributed to a weakening

2) confirm this assumption. The obtained results, showed that unhindering of the rotational molecular motion leads to decrease of W^{pr} in high-temperature phase, and in the absence of the thermal expansion can lead to growth of the isochoric thermal conductivity with increasing temperature.

References

1. Manzhelii V.G., Freiman Yu.A. Physics of cryocrystals. – Woodbury, New York: AIP Press. – 1997. – 691 p.
2. Pursky O.I., Zholonko N.N., Konstantinov V.A. Influence of rotational motion of molecules on the thermal conductivity of solid SF_6 , CHCl_3 , C_6H_6 , and CCl_4 // ФНТ. – 2003. – Т. 29, №9/10. – С. 1021-1026.
3. Kahn R., Fourme R., Andre D., Renaud M. Crystal structure of cyclohexane I and II // Acta Cryst. (B) – 1973. – Vol. 29. – P. 131-138.
4. Andrew E.R., Eades R.G. A nuclear magnetic resonance investigation of solid cyclohexane // Proc. Roy. Soc. (A) – 1953. – Vol. 216, №1126. – P. 398-412.
5. Andersson P. Thermal conductivity and heat capacity of cyclohexane under pressure // J. Phys. Chem. Solids – 1978. – Vol.39, №1. – p. 65-68.
6. Могилевский Б.М., Сури́н В.Г., Чудновский А.Ф. Влияние примеси на теплопроводность поликристаллического циклогексана // ИФЖ – 1972. – Т. 23. – С. 1556-1557.
7. Анцыгина Т.Н., Городилов Б.Я., Жолонко Н.Н., Кривчиков А.И., Манжелей В.Г., Слюсарев В.А. Перенос тепла в слабых растворах неона в параводороде // ФНТ. – 1992. – Т. 18, №4. – С. 418-423.
8. Cahill D., Watson S.K., Pohl R.O. Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals // Phys. Rev. B. – 1992. – Vol. 46, №10. – P. 6131-6140.
9. Берман Р. Теплопроводность твердых тел: Пер. с англ. – М.: Мир, 1979. – 286 с.
10. Green J.R., Scheie C.E., Ultrasonic investigation of solid dl-camphene, cyclohexane and cyclohexanol // J. Phys. Chem. Solids – 1967. – Vol. 28, №3 – P. 383-394.
11. Pursky O.I., Konstantinov V.A. Thermal conductivity of solid CHF_2Cl // Physica B. – 2008. – Vol. 403. – P. 190-194.
12. Konstantinov V.A., V.G. Manzhelii, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, Pursky O.I. Isochoric thermal conductivity of solid carbon oxide: the role of phonons and “diffusive” modes // J. Phys.: Condens. Matter. – 2006. – Vol. 18. – P. 9901-9909.
13. Константинов В.А., Манжелей В.Г., Стржеменский М.А., Смирнов С.А. Закон $\lambda \propto 1/T$ и изохорная теплопроводность отвердевших инертных газов // ФНТ. – 1988. – Т.14, №1. – С. 90-100.
14. Ross R.G., Andersson P., Sunquist B., Backstrom G. Thermal conductivity of solid and liquids under pressure // Rep. Pro. Phys. – 1984. – V.47. – P. 1347-1355.
15. Konstantinov V.A., Manzhelii V.G., Revyakin V.P., Smirnov S.A. Heat transfer in the orientationally disordered phase of solid methane // Physica B. – 1999. – Vol. 262. – P. 421-425.
16. Кикоин И.К. Таблицы физических величин. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.
17. The plastically crystalline state (Orientationally-disordered crystals) / Y.N. Sherwood (ed.), John Wiley & Sons, Shichester – New York – Brisbane – Toronto. – 1979. – 377 p.

Надійшла до редколегії 29.10.99

УДК 539.194

Розуван К.П., Розуван* С.Г., Шайкевич І.А.

Розрахунки форми смуги поглинання лазерного барвника

Коливальні частоти молекули бриліантового зеленого барвника були знайдені шляхом визначення його силової матриці. Обчислений електронно-коливальний спектр молекули порівнювався з експериментальними результатами спектральних еліпсометричних вимірів. Структура смуги поглинання барвника була пояснена в рамках моделі π спряженого ланцюжка. Обчислення в рамках методу повного активного простору підтвердили наявність такого ланцюжка в молекулі.

Ключові слова: лазерний барвник, силова матриця, коливальні частоти, активний простір.

*E-mail: sgt@univ.kiev.ua

Прогрес останніх десятиліть в побудові порівняно недорогих раманівських мікроскопів [1] ще більше підвищив актуальність задачі теоретичної інтерпретації оптичних спектрів органічних з'єднань. Сукупність різних оптичних спектральних методик, включаючи випромінюючу і поглинаючу спектроскопію, спектральну еліпсометрію, дозволяє отримувати різноманітні дисперсійні криві досліджуваних речовин. Раманівські спектри складних молекул з трьох-, чотирьохзначною кількістю атомів неможливо проаналізувати з використанням „чисто” аналітичних методик. Тому важливою задачею при розробці функціональних матеріалів є розвиток чисельних методик для визначення дисперсійних кривих складних молекул. У зв'язку з розвитком сучасних швидкодіючих комп'ютерів, ті процедури розрахунку коливань складної молекули які потребували великих затрат часу [2] можуть бути без особливих зусиль включені в бібліотеки сучасних об'єктно-орієнтованих мов програмування. Це значно розширює типи молекул які потенційно підлягають обчислювальному аналізу. Водночас такий підхід автоматично означає неможливість представлення кінцевих результатів розрахунків в аналітичному виді оскільки розв'язок задачі отримується у вигляді великих масивів даних-результатів дії програмного забезпечення. Як

K.P.Rozouvan, S.G. Rozouvan*, I.A. Shaykevich

Calculations of laser dye absorption band shape.

Brilliant green molecule vibrational frequencies were determined by calculation its Hessian matrix. Calculated absorption band of the molecule was compared with spectral ellipsometry experimental data. The band shape was treated in frames of π conjugated chain model. Numerical simulation with complete active space approach confirmed the presence of the chain in the molecule.

Key words: laser dye, Hessian matrix, vibrational frequencies, active space.

наслідок, для подальшого аналізу і фізичної інтерпретації отриманих результатів потрібно проводити якісний аналіз отриманих даних використовуючи базову фізичну теорію. Наприклад, результати обчислень [3] частот оптичних переходів лазерного барвника на жаль не дають інформації про типи симетрії збудженого і основного станів що звужує потенційну цінність цих результатів для практичних задач синтезу оптичних функціональних матеріалів. Однією із задач даної публікації, яка може розглядатися як логічне продовження досліджень з [3] являється подальший якісний і кількісний аналіз структури електронно-коливальної смуги поглинання молекули бриліантового зеленого.

Для обчислення коливальних частот молекули потрібно спершу знайти методом градієнтного спуску точну сідлову точку положень її атомів:

$$g_i = \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

де $i \in [1..3\alpha]$, α - кількість атомів в молекулі. На відміну від аналогічної процедури в першій частині даних досліджень, обчислювальна процедура, що описується цим співвідношенням потребує досить значних затрат машинного часу, оскільки енергія молекули V обчислюється

знаходячи базис задачі Хартрі-Фока для кожного кроку процедури градієнтного спуску.

Наступний етап знаходження коливального спектру це обчислення силової матриці (Hessian matrix) яка складається з частинних похідних енергії по ядерним координатам:

$$V''(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 V}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 V}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 V}{\partial x_1 \partial x_{3\alpha}} \\ \frac{\partial^2 V}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 V}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 V}{\partial x_2 \partial x_{3\alpha}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 V}{\partial x_{3\alpha} \partial x_1} & \frac{\partial^2 V}{\partial x_{3\alpha} \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 V}{\partial x_{3\alpha} \partial x_{3\alpha}} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Значення матриці знаходиться для положень ядер які були знайдені на попередньому етапі. Другі похідні енергії по ядерних координатах також визначаються при отриманні чисельних

$$M_i = m_{3i-2} = m_{3i-1} = m_{3i} \quad (4)$$

Діагоналізація матриці W приводить до знаходження 3α фундаментальних частот коливань квадрати яких будуть знаходитись на діагоналі матриці. З цих частот нас цікавлять тільки $3\alpha - 6$ значень які являються коливальними частотами, а решта 6 значень відповідають оберտальному та поступальному рухові. Для економії затрат машинного часу ми не проводили заміну координатного базису з декартових до внутрішніх координат з метою зведення силової матриці до блочного виду і виключення обертальних та поступальних частот з подальшого розгляду. По-перше, ці шість частот відповідають далекій інфрачервоній області спектру і можуть бути знайдені по критерію малості їх величин. По-друге, для органічних

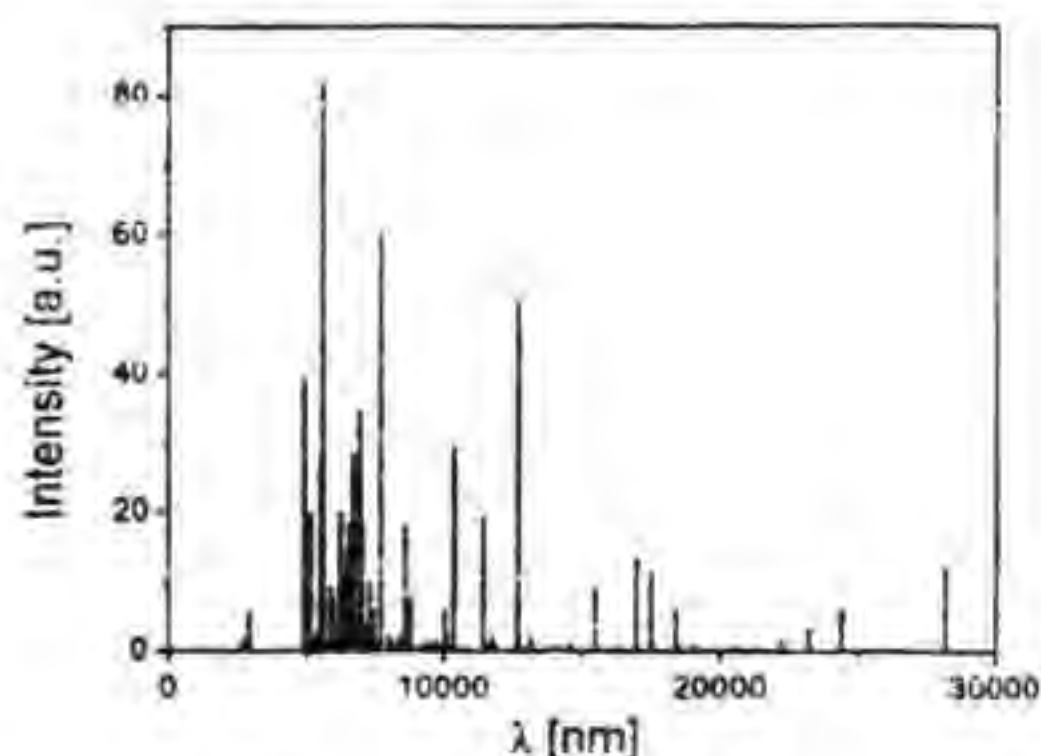


Рис.1 Обрахований коливальний спектр молекули бриліантового зеленого.

розв'язків рівняння Шредінгера для кожної окремої атомної конфігурації. Критерій правильності обчислення точки мінімуму енергії молекули це позитивні величини всіх діагональних елементів силової матриці. Матрицю V'' можна перевести в базис координат нормованих масами ядер молекули:

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 V}{m_1 \partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 V}{\sqrt{m_1 m_2} \partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 V}{\sqrt{m_1 m_{3\alpha}} \partial x_1 \partial x_{3\alpha}} \\ \frac{\partial^2 V}{\sqrt{m_2 m_1} \partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 V}{m_2 \partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 V}{\sqrt{m_2 m_{3\alpha}} \partial x_2 \partial x_{3\alpha}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 V}{\sqrt{m_{3\alpha} m_1} \partial x_{3\alpha} \partial x_1} & \frac{\partial^2 V}{\sqrt{m_{3\alpha} m_2} \partial x_{3\alpha} \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 V}{m_{3\alpha} \partial x_{3\alpha} \partial x_{3\alpha}} \end{pmatrix} \quad (3)$$

де маси ядер M_i , $i \in [1..3\alpha]$ зв'язані з масами m_i в матриці S наступним чином:



Рис. 2 Коливання молекули барвника що відповідає лінії поглинання 10366,45 нм.

молекул з $\alpha \gg 6$, неколивальні частоти не можуть суттєво вплинути на форму лінії поглинання. При діагоналізації W базис координат $\{x_i\}$ переходить в новий базис і нові нормальні координати для кожної частоти коливання ν_i можуть бути записані наступним чином:

$$\bar{q}_i = \left\{ \sum_{j=1}^{3\alpha} A_{i,3j-2} x_{3j-2} \sqrt{m_{3j-2}}; \sum_{j=1}^{3\alpha} A_{i,3j-1} x_{3j-1} \sqrt{m_{3j-1}}; \sum_{j=1}^{3\alpha} A_{i,3j} x_{3j} \sqrt{m_{3j}} \right\} \quad (5)$$

де $A_{m,n}$ це елементи матриці перетворення, яка діагоналізує $V''(x)$:

$$W = A^{-1} V'' A \quad (6)$$

Розрахований коливальний спектр молекули бриліантового зеленого зображений на рис.1. На

рис.2,3 стрілочками позначені коливання з розрахованого спектру з частотами 10366,45 нм та 2900,1 нм. З рисунків видно, що більша частота відповідає коливанням п'яти атомів молекули, в той час як меншу частоту мають коливання дванадцяти атомів. З фізичної точки зору це зрозуміло - частота коливань осцилятора обернено пропорційна корню квадратному з маси осцилятора. Для перевірки теоретичних викладок нами були проведені еліпсометричні вимірювання бриліантового зеленого барвника в поліхлорвініловій матриці. На рис.4 зображена експериментальна крива оптичної провідності зразка а також розрахований електронно-коливальний спектр який був обрахований шляхом суперпозиції розрахованої раніше електронної частоти [3] і коливальних частот з рис.1. Максимуми експериментальної і теоретичної кривих були суміщені

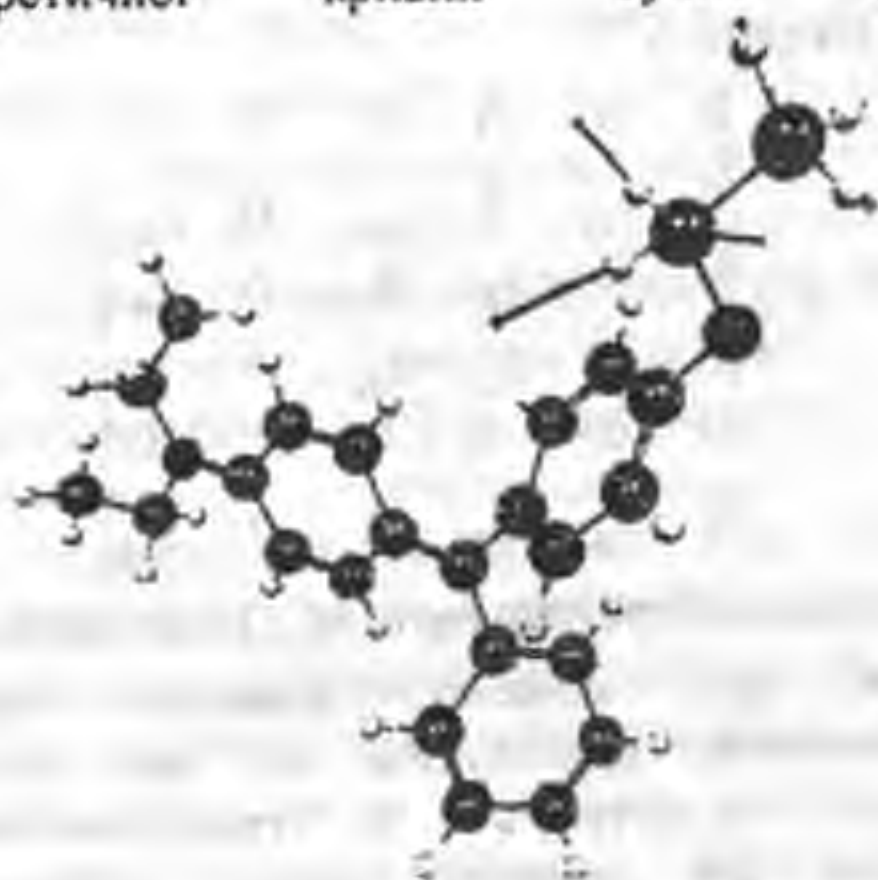


Рис. 3 Коливання молекули барвника що відповідає лінії поглинання 2900,1 нм.

зсувом розрахованого спектру на 47 нм для компенсації похибки розрахунків [3] а розрахований спектр з рис.1 згладжений. Процедура згладжування моделювала неоднорідне уширення ліній поглинання при якому кожне нормальне коливання молекули замінювалась в спектрі на функцію Гауса. З рисунка видно, що довгохвильові плечі двох кривих дуже добре співпадають на відміну від їх короткохвильових частин. Треба також відмітити, що на рис.1 ми зобразили тільки ті частоти які відповідають квантовому коливальному числу $\nu = 0$. При врахуванні коливальних збуджень які відповідають квантовим числам $\nu = 1, 2, \dots$ короткохвильова частина розрахованої кривої буде більш широкополосна. В спектральному діапазоні 570-620 нм на експериментальній кривій оптичної провідності видні додаткові максимуми.

Наявність додаткової структури на дисперсійних кривих в області поглинання барвників реєструвалась раніше [4]. Такі максимуми пояснювались оптичними переходами на електронно-коливальні рівні з урахуванням принципу Франка-Кондона. Згідно цієї моделі перехід відбувається тільки на ті коливальні рівні де є пучність електронної густини хвильової функції при даному положенні ядер, що і приводить до певної структуризації дисперсійних кривих. Наявність і відносна величина додаткових максимумів на кривій залежить від багатьох факторів - температури, кислотності або хімічної формули розчинника/матриці де знаходяться молекули барвника. Чисельна перевірка даної моделі потребує точної побудови поверхні функції потенціальної енергії в околі сідлової точки при такій величині околу яка б була не менша за амплітуди коливань ядер. Це надзвичайно трудомістке завдання яке потребує використання більш потужних комп'ютерів з паралелізацією обчислювальних алгоритмів.

Орбіталі які входять в матрицю фокіана можуть бути прокласифіковані з точки зору їх симетрії як σ і π орбіталі. Оскільки фокіан являється повносиметричним то за теоремою Вігнера-Екарта [5] недіагональні матричні елементи які відповідають орбіталям різної симетрії мають дорівнювати нулеві. Послідовність процедур перетворення матриці фокіана складає напівемпіричний метод Хюккеля [6] при якому послідовною заміною базису матриця фокіана зводиться до послідовності блочно-діагональних матриць в яких кожний блок

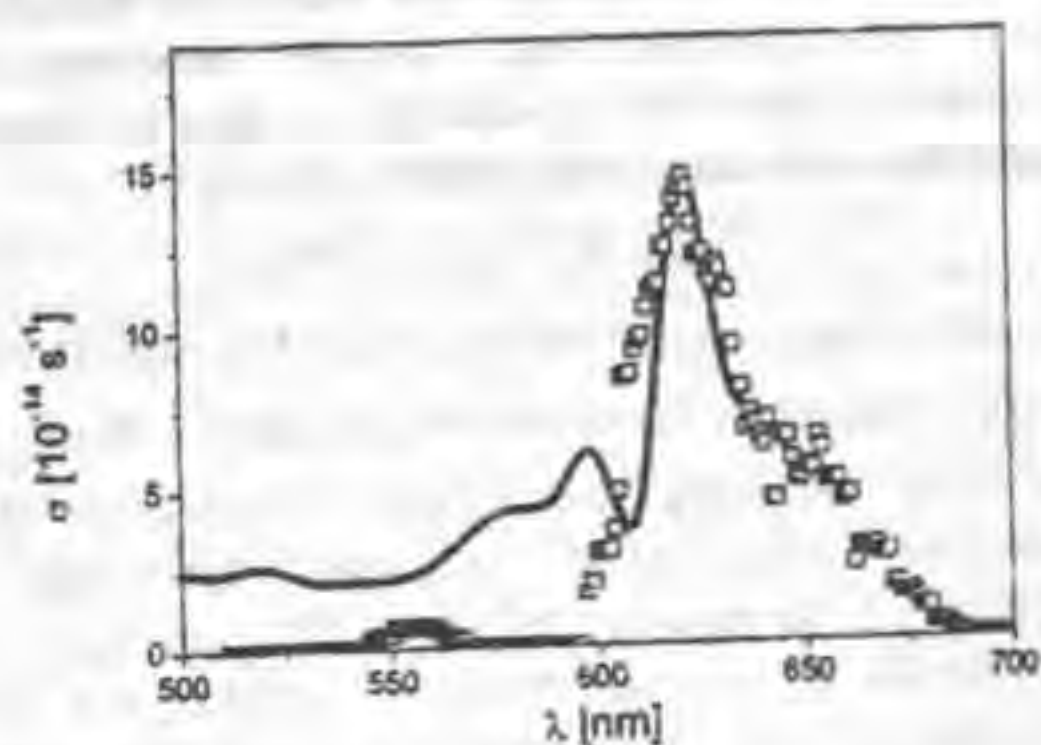


Рис.4 Згладжений розрахований електронно-коливальний спектр з рис.1 (□) та експериментальна крива оптичної провідності (—).

відповідає за свій тип симетрії (σ чи π). Даний квантово-хімічний підхід виявився не дуже

ефективним для наших обчислень оскільки отримувані похибки були на порядок більшими від похибок які виникають при застосуванні методики Хартрі-Фока.

Для аналізу просторової симетрії отриманих рішень рівняння Шредінгера для молекули

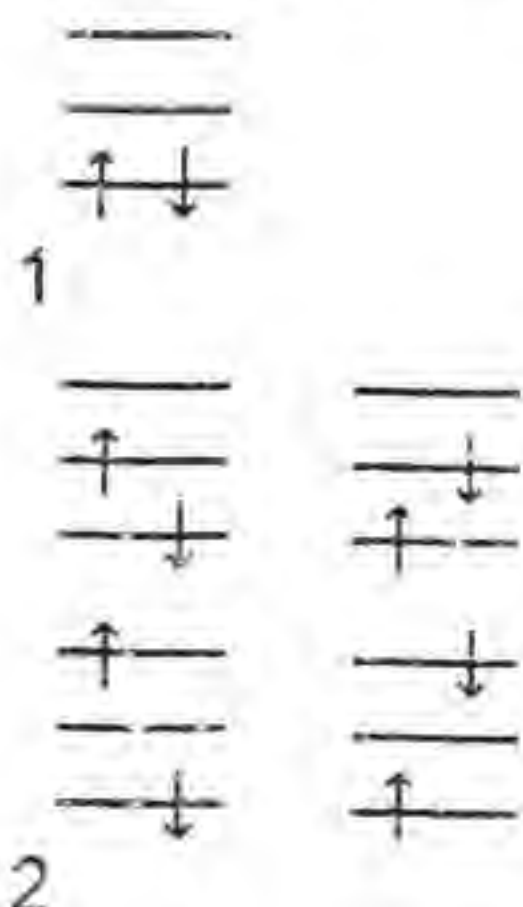


Рис. 5 Активний простір із трьох рівнів і двох електронів, $\Delta S_z = 0$ 1: $|\Phi_0\rangle$, 2: $|\Phi_a\rangle$.

бриліантового зеленого ми застосували метод повного активного простору (complete active space (CAS)) [7,8]. Ідея методу базується на формалізмі квантовомеханічної теорії збурень. При цій методиці всі орбіталі молекули поділяються на три групи - неактивні (заповнені оболонки), активні (частково заповнені оболонки) і віртуальні (незаповнені оболонки). У матрицях Слетера Φ , беручи до уваги спин електрона, всі неактивні орбіталі мають бути подвійно заселені. При обчисленнях ми маємо враховувати скінченну кількість можливих реалізацій таких детермінантів які задовольняють умову:

$$N_{\text{active}} = N_{\text{electron}} - 2m_{\text{closed}} \quad (7)$$

де N_{active} це кількість активних орбіталей, m_{closed} - кількість неактивних орбіталей а N_{electron} - загальна кількість електронів в молекулі. Всі можливі конфігурації активних орбіталей і формують активний простір. Для органічних сполук ми не можемо проводити розрахунки для абсолютно всіх орбіталей молекули внаслідок великого об'єму комп'ютерних обчислень. Всі можливі комбінації одноелектронного збудження включають перехід електрону з неактивної орбіталі в активну або віртуальну орбіталь, з активної у віртуальну і т.д. Хвильові функції станів активного простору можна знайти

аналогічно до [3] використовуючи зв'язаний кластерний підхід:

$$\psi = e^{\sum_i \hat{i}_i} \Phi \quad (8)$$

де $\hat{i}_i = \sum_j \hat{i}_i^j a_j^* a_j$, описує всі можливі

переходи на i -й рівень. Якщо ми не розглядаємо нелінійно оптичні ефекти зв'язані з багатоелектронними переходами, тоді ми повинні брати тільки перші два члени ряду Тейлора для експоненти у співвідношенні (8). На рис.5 схематично зображений активний простір для трьох енергетичних рівнів при одноелектронному збудженні.

При розрахунках по співвідношенням (7),(8) ми працювали у активному просторі з шести орбіталей. Гамільтоніан активного простору, який ми отримали можна схематично представити у вигляді матриці S :

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_{22} & 0 & s_{24} & 0 & s_{26} \\ 0 & 0 & s_{33} & s_{34} & 0 & s_{36} \\ 0 & s_{24} & s_{34} & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{55} & 0 \\ 0 & s_{26} & s_{36} & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Для проекції орбітального M_z і спінового S_z моментів ми можемо записати схожі співвідношення, враховуючи те, що обидва оператори комутують з гамільтоніаном. Наприклад, для оператора проекції спінового моменту, елементи комутатору з гамільтоніаном можуть бути записані у вигляді:

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{S}_z | n \rangle &= \delta_{mn} S_z(m) \\ \langle m | \hat{S}_z \hat{H} | n \rangle &= \sum_l \langle m | \hat{S}_z | l \rangle \langle l | \hat{H} | n \rangle = \\ &= \langle m | \hat{S}_z | m \rangle \langle m | \hat{H} | n \rangle \\ \langle m | \hat{H} \hat{S}_z | n \rangle &= \sum_l \langle m | \hat{H} | l \rangle \langle l | \hat{S}_z | n \rangle = \\ &= \langle m | \hat{H} | n \rangle \langle n | \hat{S}_z | n \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

Як видно із співвідношень (10) недіагональні елементи гамільтоніану $\langle m | \hat{H} | n \rangle$ можуть бути відмінними від нуля тільки в тому випадку коли стани m і n мають однакові значення S_z . Аналогічні співвідношення можуть бути записані і для M_z а тому необхідною умовою відмінності недіагонального елементу (m, n) гамільтоніану

від нуля являється однакові значення двох величин S_z і M_z станів m і n . Детальний аналіз таких елементів з урахуванням геометричної і динамічної фаз [9] дозволяє зв'язати недиагональні елементи гамільтоніану активного простору зі спин-орбітальною взаємодією. В нашому випадку при напівширині електронно-коливальної смуги поглинання в десятки нанометрів спин-орбітальна взаємодія не може суттєво вплинути на форму смуги поглинання. Тому її подальший аналіз не проводився. Із виду матриці S в (9) випливає, що недиагональні елементи матриці мають ненульове значення тільки для пар станів які відповідають наступним ненульовим елементам: (2,4), (2,6), (3,4), (3,6). Нульовий діагональний елемент матриці (1,1) описує віртуальний рівень. Той факт що недиагональні елементи (2,3) і (4,6) дорівнюють нулю хоч стани 2,3,4 і 6 мають однакові значення M_z і S_z може бути пояснений тим що відповідні хвильові функції цих станів рознесені у просторі, бо локалізовані на несусідніх атомах молекули барвника. Ненульові недиагональні елементи матриці S із співвідношення (9) відображають ділянку ланцюжка взаємодіючих молекул (π -спряженого ланцюжка). Вид матриці є наслідком просторової структури молекули. Так, наприклад, для одиночних атомів матриця S має мати виключно блочно-діагональний вигляд. В даній роботі ми не проводили детальний аналіз спин-орбітальної взаємодії внаслідок того, що енергії цієї взаємодії порівняно невеликі і не можуть суттєво вплинути на форму смуги поглинання бриліантового зеленого.

Говорячи про $\pi \rightarrow \pi^*$ збудження вздовж спряженого ланцюжка ми використовуємо певне наближення - а саме застосовуємо формалізм розроблений для двохатомних молекул до попарної взаємодії атомів більш складної молекули. При цьому ми розглядаємо взаємодіючі атоми як такі що формують лінійну багатоатомну молекулу для якої наближення двохатомних молекул також справедливе [10]. Ми вважаємо що такий підхід може докладно описувати локальний характер оптичного збудження у спряжених полімерах. Звичайно, для повного аналізу структури рівнів молекули потрібно проводити розрахунки у більшому активному просторі, хоч із вигляду S в (9) можна зробити певні припущення про просторову симетрію отриманих рішень. Той факт, що ненульові недиагональні елементи матриці

гамільтоніану активного простору відповідають тільки одній парі згрупованих діагональних елементів дозволяє нам говорити про можливе відображення кожною парою цих діагональних елементів синглетних рівнів станів $^1\Sigma$ і $^1\Delta$. Ці стани виникають внаслідок попарної взаємодії $\pi 2p$ орбіталей сусідніх атомів вуглецю [10] і в кожному з цих двох станів існує тільки по одному рівню з квантовими числами $M_z = 0$, $S_z = 0$. Як наслідок, цим станам може відповідати два діагональних і два недиагональних ненульових елементів в матриці S з співвідношення (9).

Звичайно, наше моделювання активного простору не може повністю описати структуру електронних рівнів даного барвника. Для точного визначення положень рівнів $\sigma, \pi, n, \sigma^*, \pi^*$ у молекулі бриліантового зеленого потрібно застосовувати активний простір більшої величини, що неможливе без використання більш потужних комп'ютерів. Проте в рамках наших досліджень дане наближення дозволяє отримувати важливу інформацію про структуру електронної смуги поглинання бриліантового зеленого.

Питанням фотогенерації і транспорту в барвниках присвячена досить вагома кількість наукових досліджень [11-13]. В цих роботах був досягнутий вагомий прогрес в емпірико-хімічних аспектах досліджень що дозволяє зрозуміти деякі деталі спектральної поведінки цих речовин. Водночас детальний аналіз даних сполук в рамках апарату квантової механіки і фізики твердого тіла до кінця ще не зроблений. Так, наприклад, при класифікації широких класів барвників, процеси фотогенерації в них розглядалися як процес перерозподілу енергії між хромоформними комплексами молекули барвника з їх подальшою взаємодією з молекулами розчинника [4] без використання базових рівнянь фізики твердого тіла, що описують перехід електрона з валентної зони в зону провідності. Також до кінця не зрозумілий поляронний механізм транспорту носіїв при якому довга органічна молекула може вести себе як провідник [14,15], напівпровідник [16] чи ізолятор [17]. Результати розрахунків на базі існуючих теоретичних моделей часто залежать від конкретного типу апроксимації міжатомного поля, що приводить до відмінних картин взаємодії з поляритонами [18], в тому числі в π -спряжених полімерах [13]. Застосування експериментальних і теоретичних фізичних підходів даного дослідження дозволило отримати якісно нову інформацію про $\pi \rightarrow \pi^*$

збудження органічних речовин. Так спектральна еліпсометрія дозволяє реєструвати дисперсію оптичної провідності яка відображає структуру електронно-коливальних рівнів зразка. Певне „замивання” коливальної структури на дисперсійних кривих поглинання може бути пояснено ненульовою концентрацією заряджених частинок у валентній зоні і зоні провідності внаслідок $\pi \rightarrow \pi^*$ переходів. Цей процес аналогічний процесам в π -спряжених полімерах які фактично являються органічними напівпровідниками [13]. Звичайно, у випадку більш компактних молекул лазерних барвників ми можемо проводити дану аналогію з певним наближенням - на відміну від довгих ланцюжків полімерів, збудження у барвниках більш просторово локалізоване, хоча вже сам той факт, що смуга поглинання барвника зміщена з ультрафіолетової області у видиму, свідчить про наявність ланцюжка π спряжених зв'язків [19], а значить і про виникнення струму внаслідок оптичного збудження. Важливим висновком з результатів даної роботи являється метод знаходження топології спряжених зв'язків в органічній молекулі. Як впливає з отриманих результатів, суттєвою ознакою наявності π -спряженого ланцюжка в органічній молекулі може являтися присутність множини пар ненульових недиагональних елементів в матриці гамільтоніану активного простору. Теоретичні розрахунки положення і форми електронної смуги поглинання молекули бриліантового зеленого дозволяють цілеспрямовано застосувати дані результати для подальших робіт по створенню оптичних матеріалів з наперед заданими властивостями.

Список використаних джерел

1. Nakamoto K. Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds. - New York: Wiley, 1997. - 425 pages.
2. Маянц Л.С. Теория и расчет колебаний молекул. - М: Издательство Академии Наук СССР, 1960, 526 с.
3. Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Розрахунки енергії оптичного переходу лазерного барвника, Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. - 2009. - №1, С.275-280.
4. Давыденко Н.А., Ищенко А.А., Кувшинский Н.Г. Фотоника молекулярных полупроводниковых композитов на основе органических красителей. - Киев: Наукова Думка, 2005. - 295 с.

5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Квантовая механика. - М: Наука, т.3, 1989, - 767с.

6. Atkins P.W., Friedman R.S. Molecular Quantum Mechanics. - New York: Oxford University Press, 1996. - 545 pages.

7. Kluener T., Govind N., Wang Y. A., and Carter E. A. Periodic density functional embedding theory for complete active space self-consistent field and configuration interaction calculations: Ground and excited states, J. of Chem. Phys. - 2002. - V.116, - № 1. P.42-54.

8. Angeli C., Cimiraglia R., Evangelisti S., Leininger T., Malrieu J.-P., Introduction of n-electron valence states for multireference perturbation theory, J. Chem. Phys. - 2001. - 114 (23). - 10252.

9. Yi X. X., Chang J. L. Off-diagonal geometric phase in composite systems, Phys. Rev. A. - 2004. - 70, - 12108.

10. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. - М: Мир, 1974, - 208 с.

11. Pope M., Swenberg C.E. Electronic processes in organic crystals - Oxford: Clarendon Press, 1982. - 382 pages.

12. Pope M., Swenberg C.E. Electronic processes in organic crystals and polymers. - Oxford: Oxford University Press, 1994. - 419 pages.

13. Semiconducting polymers: Chemistry Physics and Engineering by Hadziionnou G., van Hutte P.F. (Editors) Weinheim: Wiley: VCH, 2000. 267 pages.

14. Fink H.W., and Schonenberger C. Electrical conduction through DNA molecules, Nature, - 1999. - Vol.398, - № 407, - P. 381-396.

15. Tran P., Alavi B., and Gruner G., Charge transport along the λ -DNA double helix // Phys. Rev. Lett. - 2000. - № 85, - P.1564-1569.

16. Porath D., Bezryadin A., de Vries S. and Dekker C., Direct measurements of electrical transport through DNA molecules, Nature. - 2000. - Vol. 403, - № 635, - P. 126-141.

17. Braun E., Eichen Y., Sivan U., Ben-Yoseph G. DNA templated assembly and electrode attachment of conducting silverwire, Nature. - 1998. - Vol.391. - № 669. - P. 775-778

18. Fuentes M.A., Maniadis P., Kalosakas G., Rasmussen K.O., Bishop A.R., Kenkre V.M., and Gaididei Y.B. Multi peaked polarons in soft potentials. Phys. Rev. - 2004. - E 70, - 025601.

19. Орешникова Е.Г. Спектральный анализ. - М: Высшая школа. 1982, 375с.

Надійшла до редколегії 12.10.2009р

УДК 519.9

Стебленко Л.П., д.ф.м.н., с.н.с.,
Науменко С.М., пров.інж.,
Кріт О.М., асп.,
Коплак О.В., асп.,
Кобзар Ю.Л., к.ф.м.н., м.н.с.,
Курилюк А.М., інж.,
Руденко О.В., к.ф.м.н., с.н.с.

Зміна мікротвердості кристалів кремнію, індукована слабоінтенсивним рентгенівським випромінюванням

У роботі досліджується вплив слабоінтенсивного рентгенівського випромінювання на мікротвердість кристалів кремнію. Виявлено особливості радіаційно-механічного ефекту (ефекту зміни мікротвердості в результаті впливу рентгенівського опромінення на кристали Si). Установлено, що величина й характер релаксації радіаційно-механічного ефекту залежать від дози рентгенівського опромінення та концентрації кисню.

Ключові слова: кремній, рентгенівське опромінення, мікротвердість, радіаційно-механічний ефект.

L.P. Steblenko, Dr. Sci, Sen. Sci. Res.,
S.M. Naumenko, Princ. Eng.,
O.M. Krit, PhD stud.,
O.V. Koplak, PhD stud.,
Yu.L. Kobzar, Ph.D., Young. Sci. Res.,
A.M. Kuryliuk, Eng.,
O.V. Rudenko, Ph.D., Sen. Sci. Res.

The microhardness change of silicon crystals induced by weak intensive x-ray radiation

The influence of weak intensive X-ray radiation on microhardness of silicon crystals is investigated. Features of radiation-mechanical effect (effect of microhardness change as a result of X-ray irradiation influence on Si crystals) are revealed. It is established that a value and character of relaxation of radiation-mechanical effect dependence on a dose of X-ray irradiation and concentration of oxygen.

Key Words: silicon, X-ray radiation, microhardness, radiationmechanical effect.

*E-mail: kurylyuk_a@univ.kiev.ua, yu_1_kolchenko@univ.kiev.ua

Фізичні (у тому числі й механічні) властивості напівпровідників багато в чому визначаються станом підсистеми структурних дефектів. В умовах опромінення ключову роль у формуванні властивостей грає якісний й кількісний склад радіаційних дефектів (РД). Слід зазначити, що закономірності дефектоутворення при малих дозах опромінення, зокрема рентгенівського опромінення кремнію, залишаються маловивченими. Існує лише невелика кількість робіт, у яких розглядається вплив малодозового рентгенівського опромінення на структуру й структурно-залежні властивості матеріалів [1-4].

Створення цілісного уявлення про зміну структури й структурно-залежних властивостей

матеріалів, обумовлену малодозовим рентгенівським впливом, потребує нових знань і нової наукової інформації. У зв'язку із цим метою даної роботи було дослідження впливу слабоінтенсивного рентгенівського випромінювання на мікротвердість кристалів кремнію.

В експериментах досліджували зразки Si n-типу, вирощені по методу Чохральського (Cz-Si) і зразки Si, вирощені по методу безтигельної зонної плавки (Zm-Si). Доза рентгенівського опромінення варіювалася в межах $D = (10^4 \div 10^7)$ R. Тестування мікротвердості H по Вікерсу на площині {111} здійснювалося на приладі ПМТ-3М як до, так і після рентгенівської обробки (РО) кристалів Si. Після цього

визначалася індукована рентгенівською обробкою зміна мікротвердості або відносна мікротвердість $\Delta H/H$, що класифікувалася як радіаційно-механічний ефект (РМЕ). Похибка у визначенні РМЕ становила 4%. Крім визначення величини РМЕ, що здійснювалося відразу після завершення РО, у роботі велося спостереження за тим, наскільки стабільним є РМЕ, тобто досліджувався процес релаксації РМЕ.

Проведені дослідження дозволили виявити наступні закономірності. Залежність величини відносної мікротвердості й, відповідно, залежність РМЕ від дози рентгенівського опромінення має немонотонний характер як для кристалів, вирощених по методу Чохральського, так і для кристалів, вирощених по методу безтигельної зонної плавки (Рис.1).

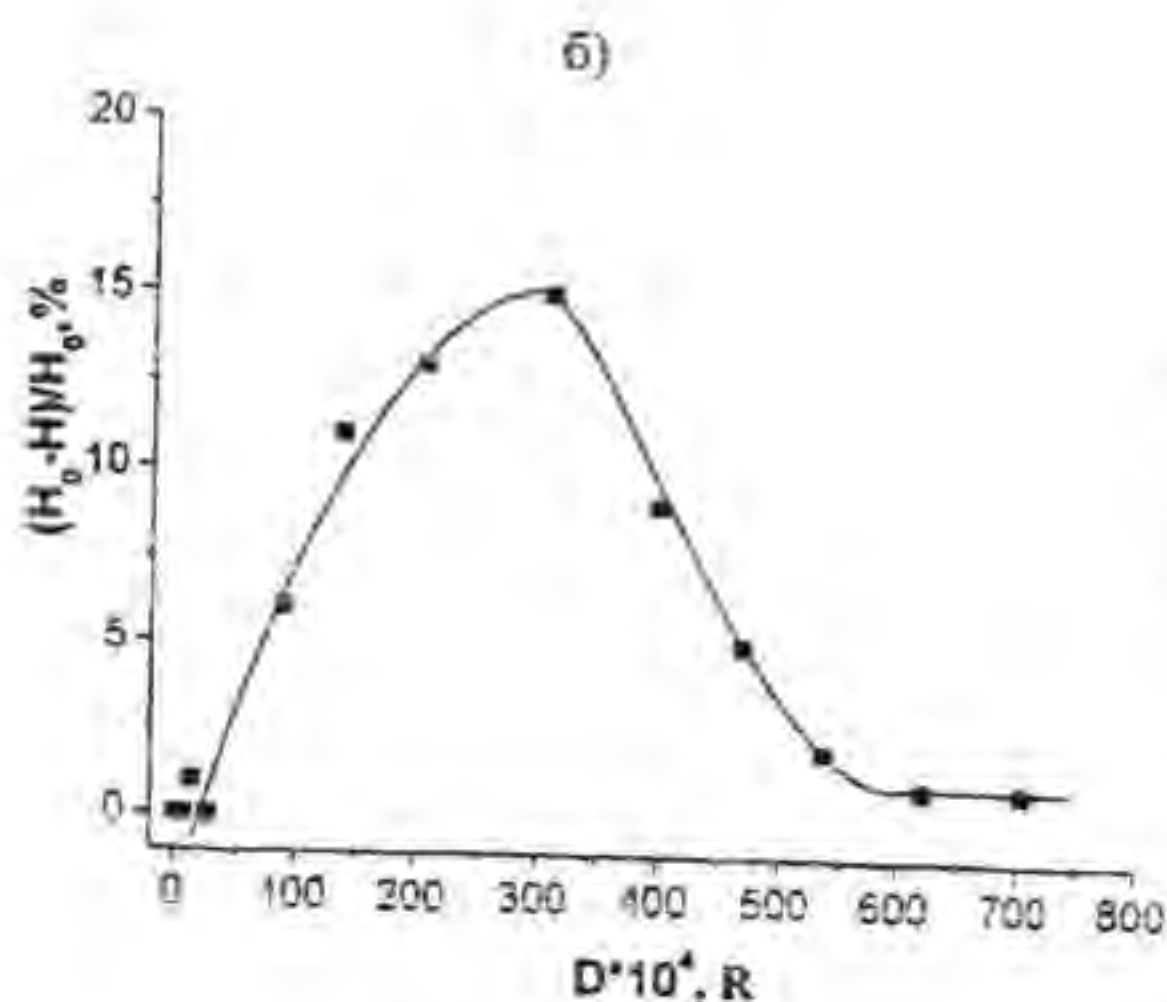
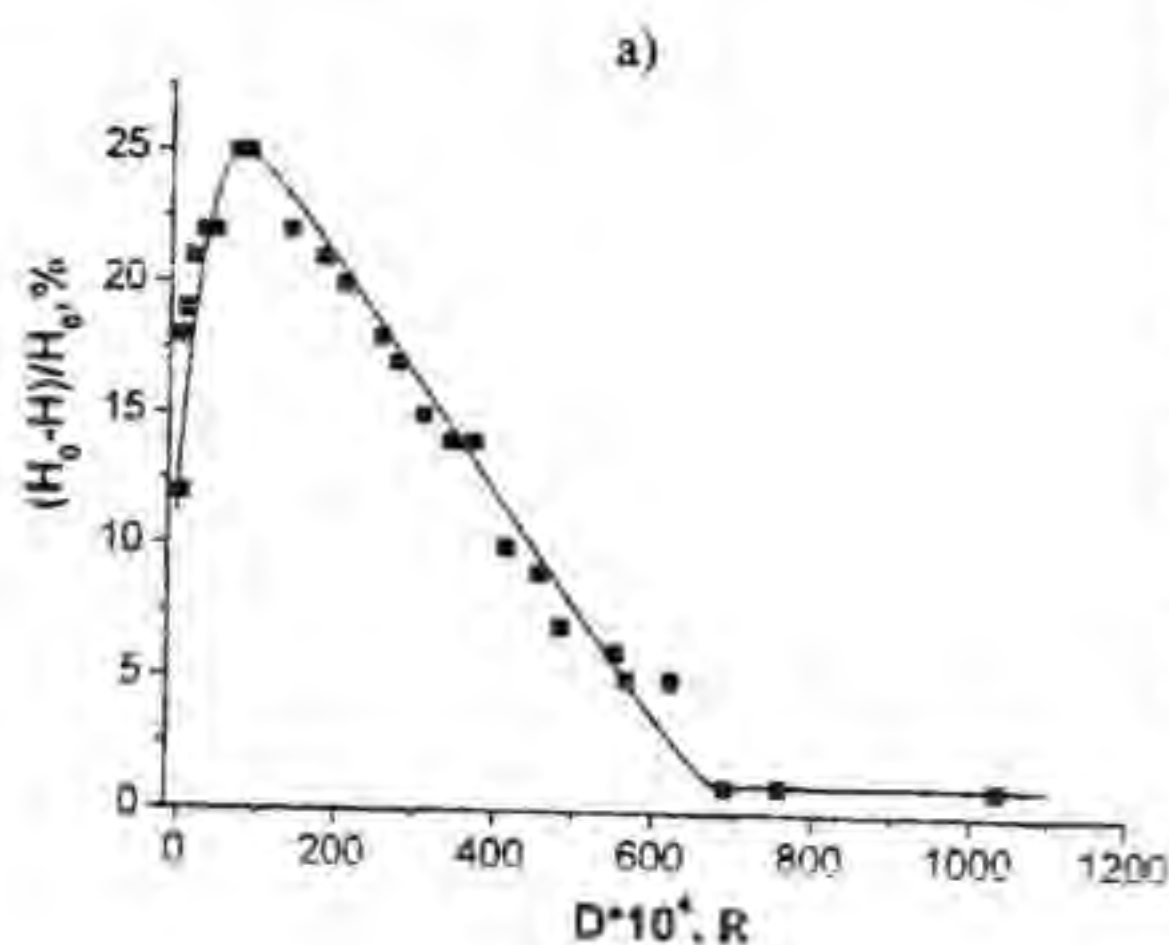


Рис.1. Залежність величини відносної мікротвердості (радіаційно-механічного ефекту) у кристалах Si n-типу від накопичувальної дози рентгенівського опромінення D: (а) – кристали кремнію, вирощені по методу Чохральського; (б) – кристали кремнію, вирощені по методу безтигельної зонної плавки.

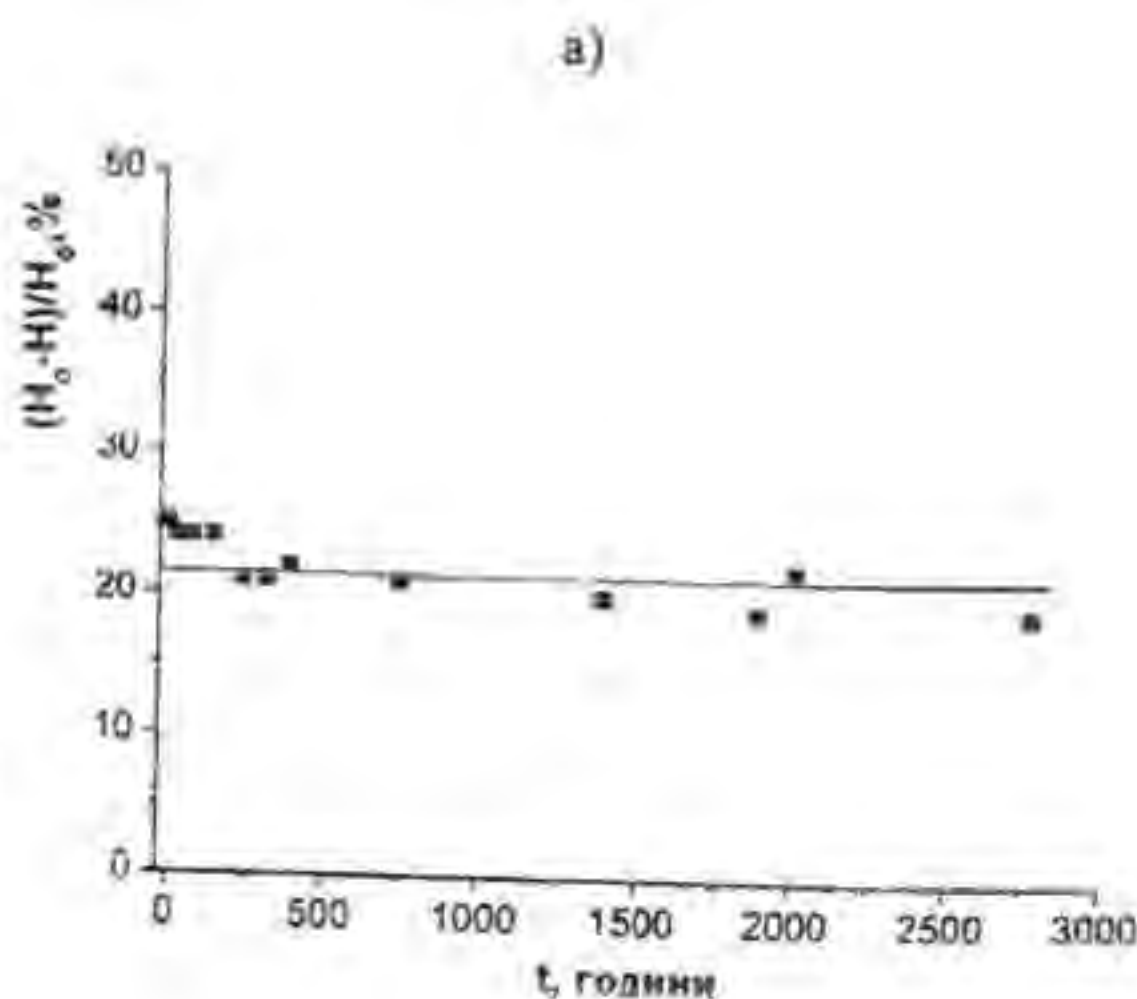
Слід зазначити, що сама по собі величина максимального РМЕ в *Zm-Si* була на 10% менша, ніж в *Cz-Si*.

Різниця між зазначеними двома групами зразків полягає також й у відмінності дози РО, при якій спостерігається максимальний РМЕ. Так, у кристалах *Cz-Si* максимум РМЕ мав місце при $D \approx 10^6 R$, у кристалах *Zm-Si* – при $D \approx 3,5 \cdot 10^6 R$. Характерно, що в кристалах *Cz-Si* в інтервалі доз $10^6 R \leq D \leq 5 \cdot 10^6 R$, а в кристалах *Zm-Si* в інтервалі доз $3,5 \cdot 10^6 R \leq D \leq 5 \cdot 10^6 R$ РМЕ поступово зменшувався, і в решті решт нівелювався. Нівелювання рентгенівського впливу на мікротвердість наступало в кристалах *Cz-Si* й у кристалах *Zm-Si* при дозі $D \approx 5 \cdot 10^6 R$.

Більш детальне дослідження процесу релаксації РМЕ на зразках *Cz-Si* показало, що характер релаксації визначається дозою РО. Так, при певній дозі РО ($D \approx 7 \cdot 10^5 R$) РМЕ протягом тривалого часу ($t \geq 100$ діб) зберігався незмінним, тобто не релаксував (Рис.2а).

У той же час при більш низькій дозі РО, а саме при дозі $D = 2,2 \cdot 10^4 R$, РМЕ виявився нестійким (Рис.2).

Було встановлено, що релаксація РМЕ в діапазоні доз РО $0,3 \cdot 10^4 R \leq D \leq 2,2 \cdot 10^4 R$ відбувалася за лінійним законом (Рис.3).



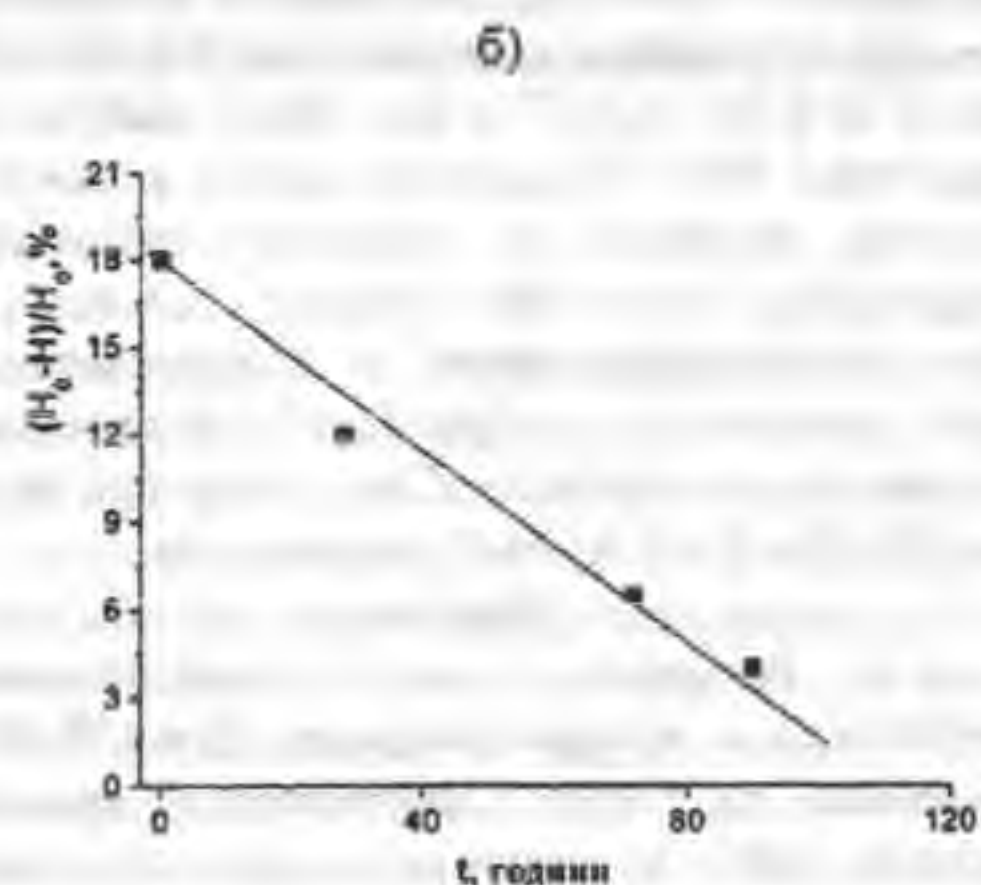


Рис.2. Залежність величини радіаційно-механічного ефекту в кристалах $Cz-Si$ n -типу від часу, що пройшов після завершення рентгенівської обробки. Доза рентгенівського опромінення: а) $D = 7 \cdot 10^5$ R; б) $D = 2,2 \cdot 10^4$ R.

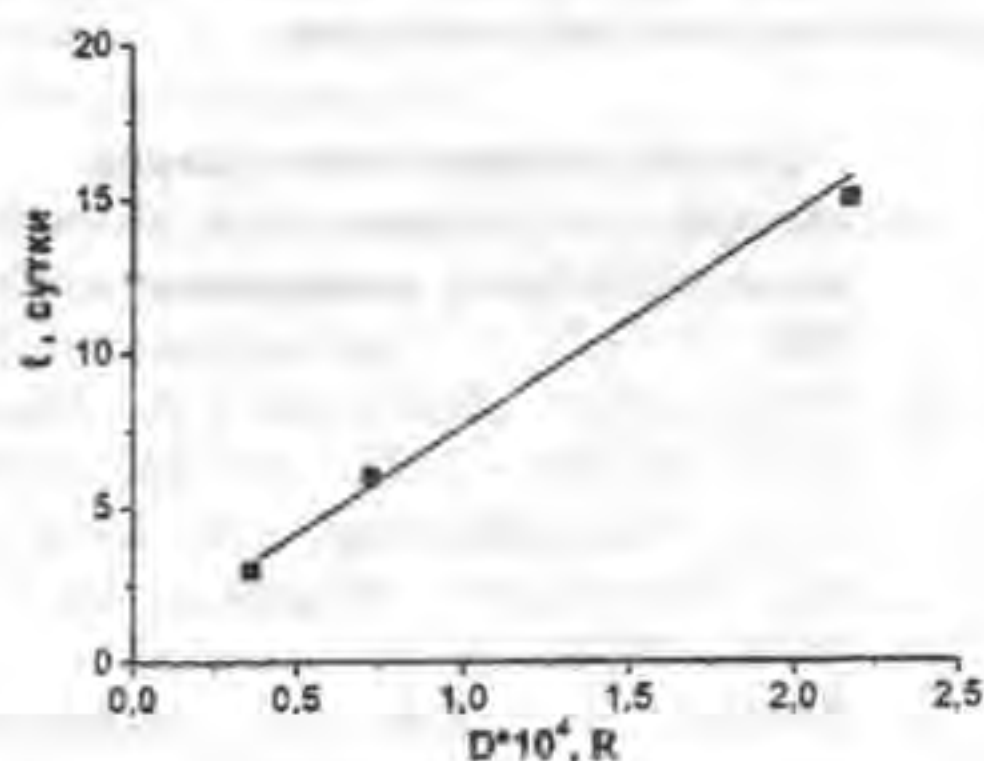


Рис.3. Залежність часу релаксації радіаційно-механічного ефекту в кристалах $Cz-Si$ n -типу від дози рентгенівського опромінення.

В основі виявлених у нашій роботі особливостей радіаційно-механічного ефекту, за нашими припущеннями, можуть лежати наступні механізми.

Як відомо, радіаційне опромінення напівпровідникових матеріалів створює в них різноманітні радіаційні дефекти [4-7].

Відомо також, що РД можна розділити на первинні й вторинні. Первинні РД (вакансії, міжвузельні атоми) у напівпровідниках мігрують і взаємодіють із домішками, утворюючи вторинні

РД. До вторинних радіаційних дефектів, які виникають в опромінених кристалах кремнію, належать, зокрема, A -дефекти, тобто дефекти «кисень-вакансія» ($O-V$), більш складні киснево-вакансійні комплекси (V_2-O-C) (так називані K -дефекти), а також E -дефекти, тобто дефекти «кисень-легуюча домішка» («кисень-фосфор», «кисень-бор» і т.п.). В [4] повідомляється про можливість не тільки процесів дефектоутворення, але й про особливості стимульованих рентгенівськими квантами процесів дифузії точкових дефектів.

Не виключено, що в наших експериментальних умовах викликане слабоінтенсивним рентгенівським опроміненням кристалів кремнію утворення A - і K -дефектів приводить до зменшення концентрації вакансій завдяки підвищенню рухливості вакансій і зв'язуванню їх киснем і вуглецем. У свою чергу зменшення концентрації вакансій приводить до зменшення пов'язаних з утворенням і переміщенням вакансій зон стиснення в приповерхневих шарах Si . Відомо, що мікротвердість матеріалу обумовлена двома факторами: перебудовою дислокаційного каркасу, що формується в приповерхневому шарі в процесі мікроіндентування, і рухливістю точкових дефектів. Імовірно, у приповерхневих шарах кремнію, позбавлених після опромінення рентгеном внутрішніх зон стиснення, умови для перебудови дислокаційного каркасу під індентором полегшені. Внаслідок останнього поверхневі шари опроміненого Si стають більш пластичними, і, відповідно, менш твердими. З вищезгаданих міркувань, менший по величині РМЕ в кристалах $Zm-Si$ у порівнянні із кристалом $Cz-Si$ можна пояснити меншою концентрацією кисню в кристалах $Zm-Si$ й, відповідно, меншою концентрацією утворених при РО A - і K -дефектів і більшою концентрацією вакансій, які не зв'язалися з киснем і залишилися в ізольованому стані. Імовірно, мала концентрація кисню й приводить до того, що максимальний РМЕ в кристалах $Zm-Si$ ~ на 10% менший по величині, ніж РМЕ в кристалах $Cz-Si$, а для його досягнення потрібна ~ в 3,5 рази більша доза РО ($3,5 \cdot 10^6$ R) у порівнянні із кристалом $Cz-Si$ (10^6 R).

Виявлена в роботі відмінність у характері релаксації РМЕ при різних дозах РО може бути пов'язана з відмінністю у такій характеристиці РД як радіаційна стійкість.

Цікавим є встановлений у роботі ефект зменшення й поступового нівелювання РМЕ при досягненні певної критичної дози РО

($D_{кр} \geq 10^6 R$ – для кристалів $Cz-Si$ й $D_{кр} \geq 3,5 \cdot 10^6 R$ – для кристалів $Zm-Si$ (Рис.1)).

Механізм, що лежить в основі цього результату, можна зрозуміти, якщо взяти до уваги динаміку перетворення підсистеми власних і радіаційних структурних дефектів у кремнії в умовах низькоінтенсивного опромінення.

У роботі [8] відзначається, що при малодозовому опроміненні кремнію електронами конкуренція домішкових атомів й інших дефектів у процесах захоплення вакансій (як первинних РД) може приводити в міру наростання флюенса опромінення до насичення концентрації комплексів, що містять вакансії, у той час як концентрація домішки, що входить у цей комплекс, від насичення далека.

Особливий інтерес викликає можливість наступного після утворення насичуючої концентрації комплексів, які містять вакансії, перекачка вакансій на інші комплекси, чим може бути пояснена немонотонність спостережуваної в [8] залежності мікротвердості від часу опромінення кремнію ($H \sim f(t_{po})$). Як відзначається в [8], перекачка вакансій може відбуватися на легуючі домішки. При цьому, з одного боку, збільшується відносна частина квазіхімічних реакцій з утворенням E -центрів ($V + P \rightarrow V-P$), а з іншого боку, зменшується стаціонарна концентрація вільних вакансій, здатних брати участь у серії послідовних реакцій, кінцевим продуктом яких є комплекс V_2O-C , відомий у літературі як « K -дефект» [7, 8].

Апроксимуючі висновки роботи [8] на наші експериментальні результати, можна припустити наступне. В умовах слабоінтенсивного рентгенівського опромінення збільшення дози опромінення приводить до збільшення відтоку генерованих опроміненням вакансій на легуючу домішку фосфору. Наслідком останнього може бути збільшення концентрації E -дефектів й, відповідно, зменшення концентрації A -дефектів ($V-O$) і K -дефектів (V_2O-C). Енергія зв'язку комплексів «вакансія-атом донорної домішки» залежить від зміни енергії електростатичної взаємодії між вакансією й зарядженою домішкою. Як відзначається в [8] пружна взаємодія більшого атома донорної домішки (фосфору) з вакансією повинна приводити до збільшення енергії зв'язку, тому що варто очікувати, що вакансії притягаються до зон стиснення.

Можна припустити, що додаткова концентрація E -центрів, яка утворюється за рахунок відтоку вакансій на легуючу домішку фосфору, приводить до появи зон стиснення і до

збільшення мікротвердості. У той же час, імовірно, A - і K -дефекти, з утворенням яких в опроміненому рентгеном кремнії зв'язане зменшення мікротвердості, приводять до появи зон розтягу в кристалі. Результатом цих процесів є те, що починаючи з деякої дози РО ($D \approx 10^6 R$ для $Cz-Si$ й $D = 3,5 \cdot 10^6 R$ для $Zm-Si$) відбувається зменшення РМЕ. Подальший відтік вакансій на легуючу домішку й подальше збільшення концентрації E -центрів приводить до того, що зони розтягу (обумовлені A - і K -дефектами) і зони стиснення (обумовлені E -дефектами) взаємно компенсуються. Саме тому при певній дозі РО ($D \sim 5 \cdot 10^6 R$) РМЕ нівелюється.

Висновки

1. Виявлено, що слабоінтенсивне рентгенівське випромінювання ($D = 10^4 \div 10^7 R$) приводить до зміни мікротвердості кристалів кремнію, тобто до появи радіаційно-механічного ефекту.
2. Установлено, що залежність величини радіаційно-механічного ефекту від дози рентгенівського опромінення носить немонотонний характер.
3. Вивчено особливості радіаційно-механічного ефекту, що виникає в кристалах кремнію з різним вмістом кисню.

Список використаних джерел

1. Макара В.А., Новиков Н.Н. // Физика и химия обработки материалов. – 1973. – №6. – С.137.
2. Альшиц В.И., Даринская Е.Б., Козакова О.Л. // ЖЭТФ. – 1997. – 111, №2. – С.615.
3. Кулиш Н.П., Максимюк П.А., Мельникова Н.А., Онанко А.П., Струтинский А.М. // ФТТ. – 1998. – 40, №7. – С.1257.
4. Вавилов В.С., Кив А.Е., Ниязов О.Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. – М.: Наука, 1981. – 368 с.
5. Клингер М.И., Луцкич Ч.Б., Машовец Т.В., Холодять Г.А., Шейкман М.К., Эланго М.А. // УФН. – 1985. – 147, №3. – С.523.
6. Луцкич Ч.Б., Луцкич А.Ч. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. – М.: Наука, 1989. – 263 с.
7. Вавилов В.С., Киселев В.Ф., Мукашев Б.Н. Дефекты в кремнии и на его поверхности. – М.: Наука, 1990. – 216 с.
8. Головин Ю.И., Дмитриевский А.А., Сучкова Н.Ю. // ФТТ. – 2008. – 50, №1. – С.26.

Надійшла до редколегії 01.09.09

УДК 520.17

Удалов¹ Є.П., к. ф.-м. н.

Принципи отримання та керування голографічними зображеннями за допомогою ЕОМ

Традиційні шляхи усунення несприятливих факторів полягають в максимальній стандартизації і відтворюваності умов голографічного експерименту. В роботі, яка носить методичний характер, розглядається оперування з оптичними сигналами поданими у електронному вигляді. Ці сигнали можуть бути відмінні в розподілі амплітуди і фази при записі і відновленні голограми. (розглядають два чи більше різних етапів часу t_1, t_2). Головною метою виконаної роботи була стабілізація передавальної функції голографічної системи, яка визначальним чином впливає на зображення. Були проведені як теоретичні так і експериментальні дослідження, спрямовані на керування чи усунення впливу випадкових факторів на передавальну функцію [5, 6-9]. Розглянуто принципи формування електронних зображень за допомогою ЕОМ з керованою передавальною функцією.

Ключові слова: голографічне зображення, електронна голограма, спекл-голограма, передавальна функція.

E.P. Udalov¹, Ph.D. of phys.& Math.

Principles of Obtaining and Steering Holographic Images with the Means of Computer

In maximum standardization and reproducibility of requirements holographic experiment, conventional ways of removal adverse factors consist. In the article, methodical character which has, operations with the optical signals shown in an electronic kind are considered. In allocation of amplitude and a phase at record and renewal of the hologram, these signals can be different (view two or more different stages of time t_1, t_2). Stabilization of relaying function holographic system which determining fashion influences on the image was an overall objective of executed activity. Both theoretical and pilot researches, directional on steering or removal of influence random factors on a transfer function [5, 6-9] have been lead. The principles of formation electronic images gained COMPUTERS with a steered relaying function have been surveyed.

Keywords: holographic image, electronic hologram, speckle - hologram, relaying function.

¹ E-mail: udalov@univ.kiev.ua

WWW: <http://www.mechmat.univ.kiev.ua/ua/udalov.html>

Вступ

Одержання якісного і стабільного голографічного зображення є необхідною умовою більшості задач обробки оптичних сигналів і формування когерентних пучків з заданими властивостями. В практиці при запису і відтворенні голограм завжди виникають які-небудь відмінності в лазерних пучках, параметрах схеми оптичного тракту, які пов'язані із зміною просторових (амплітудних, фазових) характеристик пучків чи часових факторів, або зміною умов вимірювань. Означені відмінності негативно впливають на відтворене зображення і спотворюють його.

Як відомо, оптичний сигнал на виході будь-якої голографічної системи визначається добутком декількох функцій розподілу поля для

лазерних пучків, що приймали участь у створенні і відтворенні голограми, включно з тими, які були піддані змінам самою голографічною схемою. Саме ця обставина визначає кореляційний характер формування результуючого сигналу [1-3]. А також окреслює вимогу, щоб кореляційна функція, яка пов'язана з формуючими властивостями голографічної схеми, якнайменше залежала від змін світлових пучків, які подаються на її вхід.

Припустимо, що при записі голограми в момент часу t_0 були використані пучки з комплексними амплітудами $A(x_0, y_0, z_0, t_0)$ і $C(x_0, y_0, z_0, t_0)$, а при відтворенні в момент t_1 використано пучок $A'(x_0, y_0, z_0, t_1)$. Тоді, враховуючи рівняння голограми і теорему згортки, поле яке утворюється в одному з дифракційних порядків буде мати вигляд:

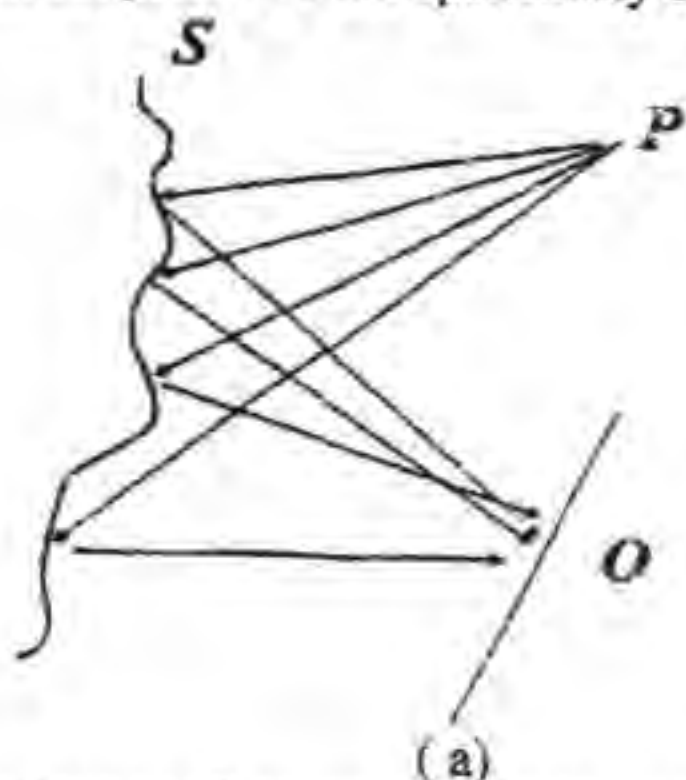
$$V(x_3, y_3, z_3, t_1) = \hat{F} \{ \omega_A \cdot \omega_A^* \cdot \omega_C \} = \\ = [A'(x_3, y_3, z_3, t_1) * A^*(x_3, y_3, z_3, t_0)] \otimes C(x_3, y_3, z_3, t_0)$$

де $\hat{F}$, $*$, $*$, $\otimes$ означають, відповідно, оператори Фур'є перетворення, комплексного спряження, кореляції і згортки, а $\omega(x_2, y_2, z_2, t)$ – розподіл поля в кутовому спектрі пучків, що взаємодіють. Схема Фур'є-голографії при її теоретичному представленні може бути зведена до еквівалентної телескопічної системи де є передня, середня і задня фокальні площини, які і позначають координатні індекси 1, 2, 3.

Для виконання умови незалежності характеристик вихідного сигналу від можливих змін у вхідних пучках потрібно, щоб вираз у квадратних дужках мало залежав від таких змін, тобто добре апроксимувався δ функцією [1].

Було встановлено, що вплив часових факторів приводить до змін амплітудно-фазових характеристик оптичних трактів, але його дію можна звести до мінімальних значень сперуючи штучним розподілом (цілеспрямованим перетворенням) $M(x, y)$ на вході електронних оптичних систем. Результатами проведених досліджень стала фактично нова область голографії – кореляційна голографія. Її головна особливість полягає у компенсації значної частини викривлень опорного та сигнального пучків в процесі відтворення голограми іншим пучком $M(x, y, z) \cdot A(x_1, y_1, z_1, t_0, t_1)$ у складі якого вже є цілеспрямовані викривлення [8, 9, 11]. Ці дослідження мали досить загальний характер, і їх результати були поширені на інші практичні застосування, а саме для оптимального конструювання оптоелектронних голографічних систем.

Розглянемо принципові позиції при формуванні зображень в когерентному світлі.



(а)

1. Спекл структура зображення

Явище спекл-структури привернуло увагу вчених після того, як з'явилися та стали доступні джерела лазерного випромінювання у 1960 роках. Характерні картини спекл-структури (зображено на рис. 1.в) можна спостерігати коли шорстка поверхня освітлена когерентним променем лазера чи він проходить крізь середовище із випадковими варіаціями показника заломлення. Процес утворення спекл-зображення стохастичний, тому для пояснення його властивостей була застосована теорія ймовірностей. Основні формули для спеклу були спочатку отримані [1]. Довгий час спекл подавався як когерентний шум й було багато праць пов'язаних із зменшенням його впливу на сформоване зображення у радарх, астрономії чи голографії. Однак, були також розроблені деякі оптичні методи, які використовували спекл як носій інформації відносно об'єкта [2, 3]. Усі вони засновані на принципі зміни спекл властивостей, які з'являються в розсіяному оптичному полі при незначній зміні стану об'єкту дослідження. Теорія спеклів в когерентному світлі та частково-когерентному світлі була подана у [1]. Тут увага сфокусована на основних статистичних властивостях повністю когерентного світла, які необхідні для пояснення концепції роботи електронного спекл-зсувного інтерферометра.

Статистичні властивості спеклів.

Об'єктивне зображення спекл поля сформованого когерентним джерелом світла P , і дифузно розсіяним шорсткою поверхнею S на площині O , подано на рисунку 1в.



(в)

Рис. 1 Розсіяння світла на неоднорідній структурі (а), і реальна спекл структура (в).

Рис. 1 пояснює механізм утворення спекл структури. Екран поставлений в площині O показує наявність спекл структури (на представленому негативі це хаотично розташовані білі плямки) рис. 1в

Із допущення, що випромінення повністю когерентне, а дифузне поле поляризоване, статистичні обрахунки в першому порядку дадуть формули для спекл поля.

Для монохроматичного поля комплексне збурення U у вибраній точці (x, y, z) [1] буде мати вигляд

$$U(x, y, z, t) = A(x, y, z) \exp[2\pi i \nu t] \quad (1)$$

де ν є оптична частота, а $A(x, y, z)$ комплексно виражена амплітуда, яка має вигляд:

$$A(x, y, z) = |A(x, y, z)| \exp[i\theta(x, y, z)] \quad (2)$$

Інтенсивність падаючої хвилі в цій точці

$$I(x, y, z) = A(x, y, z) A^*(x, y, z) = |A(x, y, z)|^2 \quad (3)$$

де A^* є комплексно спряженою із A .

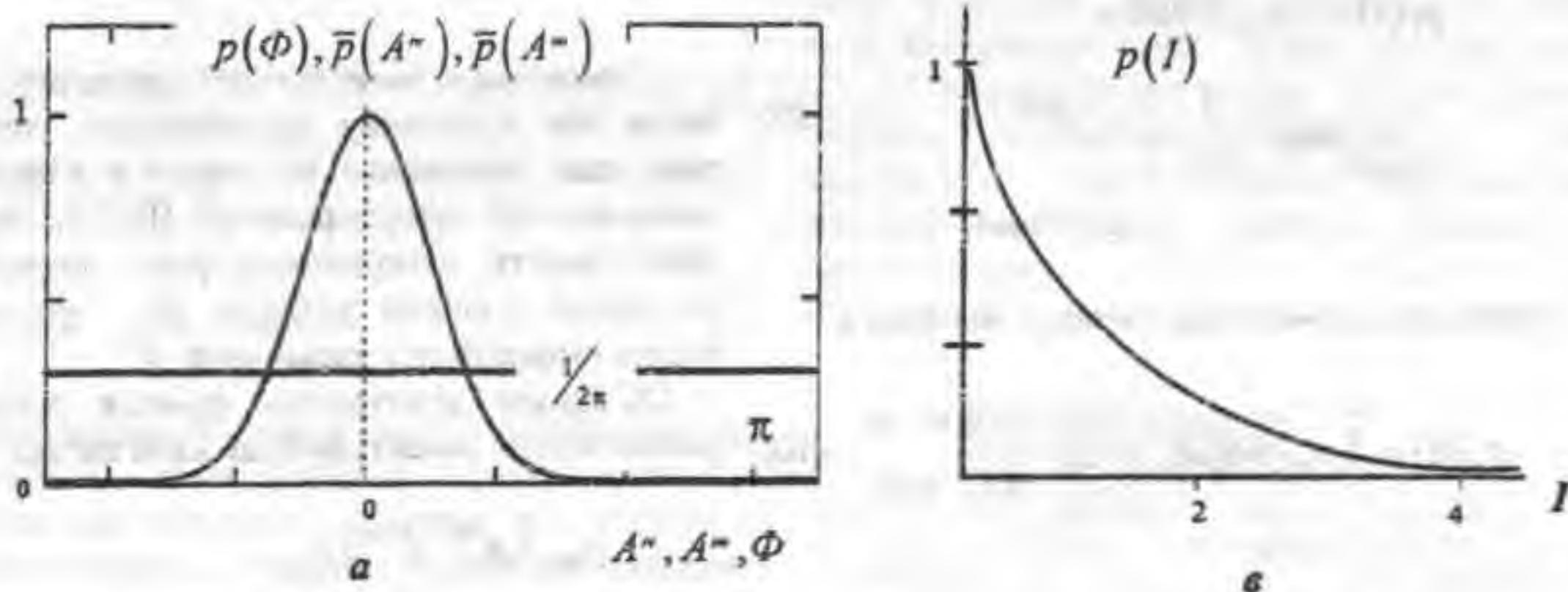


Рис.2 Розподіл вірогідності дійсної та уявної частин амплітуди ($p(A^r)$, $p(A^i)$), фази- $p(\phi)$ та інтенсивності - $p(I)$ в когерентному спекл полі.

Повна комплексна амплітуда в околі точки на площині O буде сума елементарних вкладів $\frac{1}{\sqrt{N}} \times a_k(x, y, z)$ отриманих від елементів поверхні S .

$$A(x, y, z) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{N}} a_k(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N |a_k| e^{i\phi_k} \quad (4)$$

Наступні результати отримані згідно двом припущенням

- амплітуда й фаза елементарного збурення у точці (x, y, z) незалежні одна від одної й від амплітуд інших елементарних збурень.
- фази ϕ_k рівномірно розподілені в інтервалі $(-\pi$ до $\pi)$ тобто шорсткість поверхні більша ніж довжина хвилі λ розсіяного світла.

При прийнятих умовах якщо N дуже велике (тобто $N \rightarrow \infty$ у співвідношенні (4) сумісна вірогіднісна функція реальних та уявних частин асимптотично наближається до

$$p_{re,im}(A(re), A(im)) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{[A^{(re)}]^2 + [A^{(im)}]^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (5)$$

$$\text{де } \sigma^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{|a_k|^2}{2} \quad (6)$$

Це розподілення є циркулярним Гаусовим розподілення густини, а амплітуда циркулярна комплексна Гаусова випадкова змінна.

Інтенсивність (I) і фаза(θ) в спекл-полі пов'язані з реальною та уявною частинами амплітуди, співвідношеннями[1]:

$$I = [A^{(re)}]^2 + [A^{(im)}]^2$$

$$\theta = \arctan \frac{A^{(im)}}{A^{(re)}} \quad (7)$$

тому контраст спекл-поля може бути подано значенням

$$V = \frac{\sigma_1}{\langle I \rangle} \quad (16)$$

Сумісний розподіл щільності вірогідності фази та інтенсивності може бути подана у формі

$$p_{I\theta}(I, \theta) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{I}{2\sigma^2}\right\} & I \geq 0 \\ 0 & -\pi \leq \theta \leq \pi \\ 0 & \text{інші значення} \end{cases} \quad (8)$$

так, що щільність вірогідності функції інтенсивності

$$p_I(I) = \int_{-\pi}^{\pi} p_{I\theta}(I, \theta) d\theta = \begin{cases} \frac{1}{2\sigma^2} \exp\left\{-\frac{I}{2\sigma^2}\right\} & I \geq 0 \\ 0 & \text{усі інші} \end{cases} \quad (9)$$

Функція щільності вірогідності для фази є

$$p_\theta(\theta) = \int_0^\infty p_{I\theta}(I, \theta) dI = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} & -\pi \leq \theta < \pi \\ 0 & \text{усі інші} \end{cases} \quad (10)$$

$$p_{I\theta}(I, \theta) = p_I(I) p_\theta(\theta) \quad (11)$$

Останнє рівняння доводить, що фаза та інтенсивність є статистично незалежними у будь-якій точці поверхні

Щільність вірогідності функцій розподілу амплітуди та інтенсивності у спекл-полі демонструється на Рис. 2.

Можна показати, що у n -й момент інтенсивності подається у формі

$$\langle I^n \rangle = n! \langle I \rangle^n \quad (12)$$

$$\text{Середнє значення} \quad \langle I \rangle = 2\sigma^2, \quad (13)$$

$$\text{є моментом інерції} \quad \langle I^2 \rangle = 2\langle I \rangle^2 \quad (14)$$

$$\text{і дорівнює дисперсії} \quad \sigma_I^2 = \langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2 = \langle I \rangle^2 \quad (15)$$

Стандартне відхилення σ_I розподілу інтенсивності дорівнює середній інтенсивності,

Це завжди одиниця для повністю поляризованого когерентного спекл поля. Нарешті, вірогідність $P(I)$, що інтенсивність перевищує задану межу, виражено як

$$p(I) = \exp\left\{-\frac{I}{\langle I \rangle}\right\} \quad (17)$$

Суперпозиція інтенсивності зміщених спекл-полів має практичну зацікавленість, тому що саме таке положення ми маємо в електронній спекл-зсувній інтерферометрії (ЕСЗІ). Постійна інтенсивність когерентного фону подається як постійний фазовий доданок $\sqrt{I_s}$ з фіксованою фазою і може бути прирівняний 0.

Об'єднана вірогіднісна функція дійсної та уявної частин амплітуди буде мати вигляд

$$p_{re,im}(A^{(re)}, A^{(im)}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{[A^{(re)} - \sqrt{I_s}]^2 + [A^{(im)}]^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (18)$$

Результуючою об'єднаної вірогідності функцій інтенсивності й фази буде

$$p_{I\theta}(I, \theta) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{I + I_s - 2\sqrt{I \cdot I_s} \cos \theta}{2\sigma^2}\right\} & I \geq 0 \\ 0 & -\pi \leq \theta < \pi \\ 0 & \text{усі інші} \end{cases} \quad (19)$$

Так, що щільність вірогідності одиничної функції інтенсивності

$$p_I(I) = \begin{cases} \frac{1}{\langle I_s \rangle} \exp\left\{-\frac{I + I_s}{2\langle I_s \rangle}\right\} J_0\left(2\sqrt{\frac{I I_s}{\langle I_s \rangle}}\right) & I \geq 0 \\ 0 & \text{усі інші} \end{cases} \quad (20)$$

де $\langle I_s \rangle = 2\sigma^2$ та J_0 - нульовий порядок функції Бесселя першого роду [1].

Тоді, щільність вірогідності функції фази подається у вигляді

$$p_{\theta}(\theta) = \begin{cases} \frac{e^{-r}}{2\pi} + \frac{1}{\sqrt{\frac{r}{\pi} \cos \theta \exp(-r \sin^2 \theta) \Phi(\sqrt{2r} \cos \theta)}} & -\pi \leq \theta < \pi \\ 0 & \text{усі інші} \end{cases} \quad (21)$$

$$\text{де } \theta(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^v e^{-\frac{t^2}{2}} dt \quad (22)$$

$$\text{та } r = \frac{1}{\langle I_N \rangle} \quad (23)$$

є параметрами "променевого співвідношення" [2].

Видність (контраст) спекл-поля визначається як:

$$C = \frac{\sqrt{1+2r}}{1+r} \quad (24)$$

В електронній спекл-польовій інтерферометрії променеве співвідношення оптимізоване й досягає максимального значення для пікселів в обчислювальному процесі. Відповідне значення r трохи більше одиниці. В цьому випадку функція розподілення рівня інтенсивності (рівняння 20), є функцією подібною до одиничного спекл-поля з максимумом зміщенням до великих значень інтенсивності. Однак, є тільки маленьке угруповання пікселів для яких значення інтенсивності більше, і для яких виконується повна низько-динамічна кореляція інтерференційних смуг. Треба відмітити, що коли є опорний промінь, розмір спеклів збільшується приблизно в двічі.

2. Електронний спекл інтерферометр

Відео система

В електронній спекл інтерферометрії поле смуг утворюється у електронній частині комп'ютера. Як вхідний апаратний засіб використовується CCD камера, це прилад з зарядовим зв'язком, який конвертує значення інтенсивності в зображенні в електричний сигнал. Відношення же між інтенсивністю та електричним сигналом повинні бути лінійні, щоб уникнути похибок квантування. Сигнал запускають на спеціальну плату пристрою захвату зображення, який може зберігати придбане зображення та виконувати

різні арифметичні дії. Сучасні пристрої захвату оздоблені спеціалізованими графічними процесорами які можуть додавати та віднімати структури зображень з телевізійною частотою.

В цьому розділі увага буде сконцентрована на двох типах інтерференційних смуг що формуються в електронних спекл-інтерферометричних (ЕСІ) системах: адитивних та отриманих відніманням.

Загальна здатність усіх ЕСІ систем – це порівняння двох телевізійних структур для здобуття інформації відносно кореляції спекл полів.

Засіб та порядок обробки залежить від методу який використовується. Однак, загальна схема для ЕСІ процесів має вигляд (Рис.3). Цифрові значення інтенсивності об'єктного поля знаходиться у пам'яті грабера. Наступні поля інтенсивності вже змінених полів (пройшла зміна досліджуваного об'єкту) додаються чи віднімаються від того, що знаходиться у пам'яті

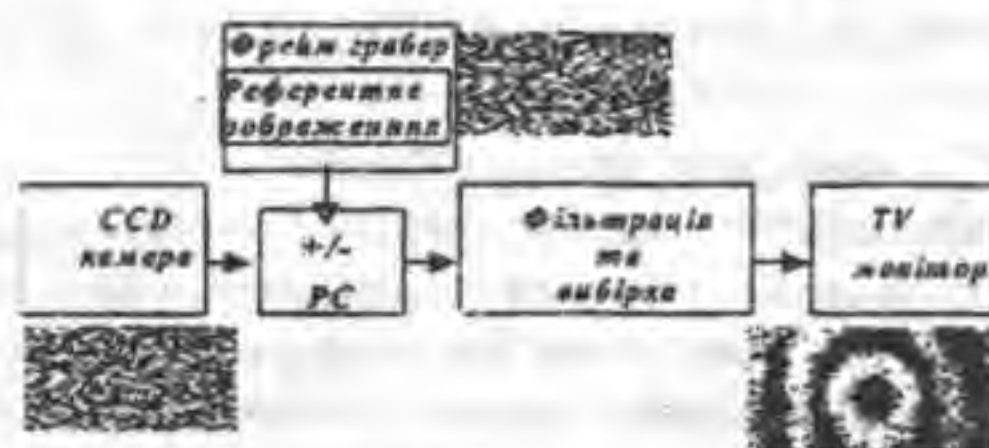


Рис. 3 Схематичний електронний процес у ЕСІ системах.

грабера в реальному часі.

Деякі методи використовують одночасно дві довжини хвилі чи подвійний імпульс, але наведена модель може розцінюватись як загальна.

Кореляційні інтерференційні смуги отримані відніманням відео сигналу

Допустимо, що ми розглядаємо два зображення I_0 та I_1 зареєстровані до і після зміни параметрів поверхні досліджуваного об'єкту. При умові, що буферизований сигнал є пропорційним до інтенсивності падаючого на детектор випромінення, вони можуть бути записані у формі:

$$\begin{aligned} I_0 &= I_o + I_r + 2\sqrt{I_o I_r} \cos \psi, \\ I_1 &= I_o + I_r + 2\sqrt{I_o I_r} \cos(\psi + \Delta \phi) \end{aligned} \quad (25)$$

де I_0 та I_r інтенсивності об'єктного та опорного пучків, відповідно, ψ - фаза, яка відповідає за спекл-фон, і $\Delta\phi$ фаза яка відповідає за виміряну зміну кількості (стану поверхні).

Різниця між зображенням що зберігалось у пам'яті комп'ютера та зображенням захопленим „грабером” набуває форми

$$I_1 - I_0 = 4\sqrt{I_0 I_r} \sin(\psi + \frac{1}{2} \Delta\phi) \sin \frac{1}{2} \Delta\psi \quad (26)$$

Отримане зображення представлене як негатив з додатними значеннями. Для уникання відображення від'ємних значень як чорні, сигнал повинен бути виправлений. Покладаючи, що яскравість на контрольному екрані монітора є пропорційна відеосигналу, найбільш вживане виправлення бере абсолютне значення диференційної інтенсивності, яка приводить до виразу

$$B = 4K\sqrt{I_0 I_r} \left| \sin(\psi + \frac{1}{2} \Delta\phi) \right| \left| \sin \frac{1}{2} \Delta\psi \right| \quad (27)$$

де K є коефіцієнт пропорційності.

Яскравість на екрані монітора промодульована темними інтерференційними смугами на фоні спекл поля загального фону. Темні інтерференційні смуги з 0 інтенсивністю, відповідають положенню де фазовий член $\frac{1}{2} \Delta\psi$ помножений на 2π . Світлі смуги з максимальною інтенсивністю $4K\sqrt{I_0 I_r}$ показують положення де результат був помножений на π . Ця операція, зазвичай, супроводжується фільтрацією низькочастотного шуму та підвищенням контрасту кореляційних смуг.

Кореляційні інтерференційні смуги отримані додаванням відеосигналу

У випадку адитивної кореляційної картини рівняння (25) додаються й результуючий відеосигнал буде

$$I_1 + I_0 = 2I_0 + 2I_r + 4\sqrt{I_0 I_r} \cos(\psi + \frac{1}{2} \Delta\phi) \cos \frac{1}{2} \Delta\psi \quad (28)$$

Для адитивних інтерференційних смуг кореляції області максимальної кореляції мають

максимальний спекл контраст, а області з низкою кореляцією мають низький спекл контраст. Ступінь кореляційного зв'язку двох зображень визначаються як варіації спекл видності (визначеної як середньоквадратичне відхилення сигналу) й не може бути виявлена безпосередньо. Області максимального та мінімального контрасту визначаються із виразів:

$$\begin{aligned} \delta_{\text{max}} &= 2\sqrt{\sigma_0^2 + \sigma_r^2 + 2I_0 I_r} \quad \text{для} \quad \Delta\phi = 2n\pi, \\ \delta_{\text{min}} &= 2\sqrt{\sigma_0^2 + \sigma_r^2} \quad \text{для} \quad \Delta\phi = (2n+1)\pi \end{aligned} \quad (29)$$

де σ_0 та σ_r стандартне середньоквадратичне відхилення інтенсивності в зображеннях I_0 та I_r , відповідно.

Обробка адитивних зображень більш ускладнена. По-перше, потрібно провести фільтрацію верхніх частот (для видалення постійного фону спекл поля), яка супроводжується виправленням абсолютного значення, яке показує інтерференційну смугу кореляції.

$$B = K\sqrt{\sigma_0^2 + \sigma_r^2 + 2I_0 I_r \cos \frac{1}{2} \Delta\psi} \quad (30)$$

Езагалі метод віднімання картин першої та другої експозиції дає кращу видність інтерференційних смуг ніж метод додавання, оскільки мінімуми мають нульову інтенсивність.

Обробка зображень картин спекл голограм

Обробка зображень спеклів була темою багатьох досліджень[13,14]. Спекл картинам притаманні такі характеристики, як велика складова шуму та різноступенева модуляція самих спеклів. Ці характеристики можуть приводити до недостатності даних у деяких областях (розриви значень фазової карти в результаті впливу випадкових завод) та мати суттєвий вплив на якість та точність результатів.

Середньоквадратична похибка результатів Електронної Спекл Зсувної Інтерферометрії (ЕСЗІ) вища ніж отримана іншими методами інтерферометрії. Зображення спеклів зазвичай потребують обширної попередньої і наступної обробки. Попередня обробка спекл картини типу "фільтрування низько рівня" може приводити до викривлення кінцевих результатів. Кінцева обробка, яка застосовується у методах обробки спекл картин це медіанна фільтрація низького

рівня для отримання гладких результатів. У областях де результати відсутні, застосовують різні інтерполяційні і екстраполяційні алгоритми.

З причин статистичного походження спеклів їх модуляція інтенсивності може не прогнозовано змінюватись від пікселя до пікселя [12]. Кількість "поганих пікселів", тобто пікселів в яких фазова компонента є помилковою відносно загальної картини спекл поля, завдячуючи низькій сигнальній динаміці, може бути скорочено тільки належним вибором відносної інтенсивності утворюючого спекл поля пучка. Такі пікселі повинні видалятися з зображення, для запобігання інформаційного викривлення, та замінюватися на інтерпольовані значення. Ця операція потребує спеціального обчислювального кроку, в якому "законність" пікселя оцінена, а відхилені виключені з подальшої обробки і занотовані для операції інтерполяції. Інтерполяція даних що відсутні, частіше за все, використовує площинні поверхні чи поверхні більш високого порядку у відповідності з ваговим методом найменших квадратів, який використовує у якості вагового множника модуляційні значення в околі точки що інтерполюється. Подібний підхід застосовують для згладжування розгорнутих фазових карт та обчислення похідних.

Походження фазових викривлень пов'язано існуванням хиткості оточуючого середовища - пил у повітрі, девіація робочої довжини хвилі, наявність вібрацій й т.п. Кращим методом їх усунення - чітке керування експериментальними умовами, зменшення часу отримання та накопичування даних, активна стабілізація довжини хвилі та інтерференційної смуги.

Одним з методів що набув широкого використання - усереднення інтерференційної смуги [14-18]. Цей підхід вимагає застосування найкращих апаратних засобів ЕОМ (містких фрейм-граберів) та великий час обробки даних. Співвідношення сигнал-шум збільшується пропорційно $\sqrt{N}$ для N усереднених зображень (точок) [12].

Інша проблема з якою стикаються тільки у спекл інтерферометрії - це декореляція спеклів. Обертання і рух поверхні твердого тіла можуть суттєво впливати на контраст інтерференційних смуг, що приводить до сигналу з низькою динамікою і виникненням труднощів при його обробці. Спекли приводять до суттєвих зменшень просторової роздільної здатності інтерферограм, накладають обмеження на щільність інтерференційних смуг, тобто на

максимальні градієнти кількості, що визначаються. У більшості ЕСЗІ систем ця межа становить приблизно 10 пікселів на інтерференційну смугу, в залежності від їх модуляції. Ця межа набагато гірша ніж в інтерферометрії плаского хвильового фронту.

Інша проблема пов'язана із спекл інтерферометрією - це деполаризація світла, що відбивається від поверхні об'єкту. Це теж суттєво знижує динамічну якість інтерференційних смуг.

Усі ці питання, висувують до обробки даних отриманих у спекл-інтерферометрії особливі підвищені вимоги. Спеціальне програмне забезпечення призначене для обробки зображень у методах спекл-інтерферометрії повинно враховувати означені проблеми.

Проблеми у цифровій спекл польовій інтерферометрії

Цифрові апаратні засоби домінують у процесах обробки зображень у сучасних ЕСЗІ системах. Цей підхід має деякі переваги, але й зосереджує похибки пов'язані із специфікою цифрової обробки.

Спекл-польові зразки мають області де інтенсивність низка. Це веде до нульової кореляційної модуляції сигналу в цих областях. Квантування значень інтенсивності і після числової обробки може представляти великі помилки, через нестійкість чисельного рішення цих пунктів. Вони повинні бути ідентифіковані протягом стадії попередньої обробки обчислень їхніх нових значень, які екстраполюються від правильних (припустимих) пікселів, що оточують область. Звичайно це робиться, скануючи об'єкт для меж з інтенсивністю нижче ніж поріг набору і маскуючи їх від подальшої оцінки.

Вся обробка зображення типу фільтрації виконується цифровими засобами, звичайно, застосовуючи числові оператори скручування з належним ядром. Це зроблено, переміщенням вікна з фільтром утримуючим визначені (питомі) вагові множники, призначені на кожний з пікселів, припускаючи і інтегрування інтенсивності в межах цього вікна. Цей тип операції може давати помилки близько до границі зразка (поля зображення), коли частина вікна переміщення перевищує розміри зразка. Треба бути обережним, використовуючи ці конструкції, фільтруючі методи, щоб не пропустити ці проблеми.

Більшість камер із зарядовим зв'язком мають роздільну здатність відмінну від одиниці. Це пов'язано із різним значенням пікселів в вертикальному та горизонтальному напрямках, для більшості камер це співвідношення дорівнює

- 3:4. Різну роздільну здатність у вертикальному та горизонтальному напрямках, треба враховувати при обробці, тому що це приводить до різних форматів зображень.

Список використаних джерел

1. J. W. Goodman. Statistical properties of laser speckle patterns //In Laser Speckle and Related Phenomena, ed. J. C. Dainty, Springer-Verlag, Berlin. -1975.
2. R. S. Sirohi, ed.. Speckle Metrology, Marcel Dekker Inc., New York. -1993.
3. H. A. Vrooman and A. A. M. Maas, Image processing algorithms for the analysis of phase-shifted speckle interference patterns //Appl. Opt. - 1991. -30- P.1636-1641.
4. J. H. Bruning, Fringe scanning interferometers //In Optical Shop Testing, John Wiley and Sons, New York -1978 - P.409-438.
5. J. C. Wyant. Use of an ac heterodyne lateral shear interferometer with real-time wavefront correction system //Appl. Opt. - 1974.-14.-P. 2622-2626.
6. E.P. Udalov, V. I. Lavrenuck, Novel approach to determine residual stresses by using of holographic interferometer //18th Symposium on Experimental Mechanics of Solids, Jachranka near Warsaw, Poland, 14-16 October 1998 -P. 438-442.
7. E.P. Udalov, A. Oliynik Determination of all stress tensor components on the object surfaces using holographic interferometer //The volume "Current Research on Holography and interferometry methods for object properties measurements" is received by SPIE. -2003 -N 5134. -P.12-21.
8. Держипольська Л.А., Гнатівський О.В., Удалов Є.П. Моделювання роботи цифрового голографічного корелятора за умови фазових перешкод в робочому пучку //Вісник кийського університету, серія: фізико-математичні науки - 2007 - в2. -С.314-320
9. Держипольська Л.А., Гнатівський О.В., Удалов Є.П., Єжов П.В. "Новий підхід до вимірювання фазових збурень об'єктів за допомогою інтерферометричного панорамного корелятора //Вісник кийського університету, серія: фізико-математичні науки -2009 - в1. - С. 239-244.
10. George W. Stroke, An introduction to coherent optics and holography// Academic Press, New York London, -1966. -270p.
11. Derzhypolska L.A., Gnatovskiy O.V., Holographic interferometry under phase distortions // Semiconductor Physics. Quantum Electronics and Optoelectronics. - 2006. - V9, №3. - P. 56-59.
12. J. N. Bullers and J. A. Leendertz, Holographic and video techniques applied to engineering measurements, // J. Meas. Control. - 1971. -4.- P. 349-354.
13. O.Schwomma, //German patent. - 1972. - no.298830.
14. Macovski, D. Ramsey and L. F. Scheaffer, Time lapse interferometry and contouring using television systems // Appl. Opt. . 1971.- 10. -P. 2722-2727.
15. R. Jones and C. Wykes, Holographic and Speckle Interferometry // Cambridge, University Press. -1989.
16. Almoro, P.; Pedrini, G.; Osten W., Complete wavefront reconstruction using sequential intensity measurements of a volume speckle field // Appl. Opt. -2006. - 45.-P.8596-8605.
17. Baumbach, T.; Kopylow, C.; Jüptner, W.; Osten, W., Formvergleich zweier Objekte an unterschiedlichen Standorten mit digitaler Holografie // Technisches Messen.-2006.- 73.-P. 120-131.
18. Baumbach, T.; Osten, W.; von Kopylow, C.; Jüptner, W., Remote metrology by comparative digital holography // Appl. Opt. -2006. -45.-P. 925-934.

Надійшла до редколегії 10.04.2009

Підписано до друку 22.10.2009. Формат 70x100¹/16.
Папір офсетний. Гарнітура Times New Roman.
Ум. друк. арк. 28,05.
Наклад 350 прим. Зам. № 277.

ДП «Інформаційно-аналітичне агентство»
вул. Еспланадна 4–6, м. Київ, 01601, Україна
тел/факс 287-03-79, 289-77-62
E-mail: iaa@dstati.kiev.ua

