



ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Випуск № 2

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ТАРАСА
ШЕВЧЕНКА**

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ

ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



15875JB

філія (вул. Сеченова)

Ц: 40.00

ВИПУСК №2 2010

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
випуск №2, 2010**

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;
- Гаращенко 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

ISSN 1812-5409

ISBN 978-617-571-022-7

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Вашпанова Т.Ю., Безкоровайна Л.Л. LGT-сітка поверхні та її властивості	7
Хусаїнов Д.Я., Діблік Й., Ружичкова М., Лукачева Я. Стабілізація, рівномірна за запізнюванням аргументу, руху в рівняннях коливання із післядією методом функцій Ляпунова	12
Puza B., Kuzmych O.I., Khusainov D.Ya. Estimation of solution of the system with switching consisting of nonlinear regulation equations	18

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Андрущенко В.О., Борисейко О.В., Немченко Д.С., Улітко І.А. Експериментальне вивчення ефективності перетворення енергії на резонансних коливаннях п'єзокерамічного стержня з розрізними електродами при керованому електричному збудженні	25
Вовченко О.М. Адвекція рідини при колапсі точкових вихорів	30
Вишневський О.А., Железняк О.О., Давидов О.С. Зміни геометричної форми поверхні контактуючих твердих тіл під дією виникаючого тертя	34
Вятчанінов О.В. Сумовні зі степенем p рекурентні послідовності в банаховому просторі	40
Дудзінський Ю.М., Жукова А.В. Спектр акустичного сигналу струминних гідродинамічних вимпромінювачів при гідростатичному тиску	45
Ефімова Т.Л. Дослідження вільних неосесиметричних коливань ортотропних та неоднорідних циліндрів з застосуванням метода сплайн-апроксимації	49
Ковальчук Б.П., Лимарченко О.С. Зародження кругової хвилі на вільній поверхні рідини в циліндричному резервуарі підвішеному на маятниковому підвісі	53
Косткін К.К. Стійкість вихрового ланцюжка	57
Курилко О.В. Топологічний хаос у течії в двовимірній прямокутній порожнині	61
Лукомський Д.В., Селезов І.Т. Виникнення нестійкості форми судини зі скінченною товщиною стінки при проходженні по ній пульсової хвилі	65
Куца Н.В., Попов В.В. Чисельне розв'язування крайової задачі з нахиленою похідною	71
Фекета П.В., Перестюк О.М. Стійкість інваріантного многовида нелінійної імпульсної системи диференціальних рівнянь, визначеної в прямому добутку тора і евклідового простору	73

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Антосяк П.П. Узагальнення медіанного підходу на випадок нечітких індивідуальних переваг	81
Афонін А.О. Про спрямовану парамодуляцію в методі елімінації моделей	87
Бомба А.Я., Ярошак С.В. Метод квазіконформних відображень моделювання нелінійних процесів витіснення у деформівних середовищах	91
Булигін В.С. Метод дискретних особливостей у задачі дифракції електромагнітної хвилі на ідеально провідній поверхні обертання	97
Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання взаємних процесів фільтраційної консолідації тіла греблі та розмиву ґрунту в її основі в умовах тепло-солепереносу	105
Глибовець М.М., Остапенко О.Ю. Аналіз тестових завдань на основі статистичної обробки результатів тестування	111
Горбачук В.М., Гаркуша Н.І. Необхідні умови першого порядку для задач дворівневої оптимізації	116
Матвієнко В.Т., Шапран І.В. Алгоритм оптимізації модальних регуляторів	120
Машенко С.О. Індивідуальна раціональність індивідуально-оптимальних рівноваг	124
Мензатов Л.Ш., Лебедєв Є.О. Максимізація прибутку та мінімізація ризику для мереж Ерланга	130
Москальков М.М., Жураєв І.Н. Дослідження різницевих схем для рівняння гіперболічного типу другого порядку з узагальненими розв'язками	136
Паращук К.Ф. Мінімаксні оцінки векторів із тензорного добутку гільбертових просторів	142
Парфірова Т.С. Ациклічні композиційні програми та їх властивості	148
Потієнко М.В. Міждисциплінарний підхід до моделювання пам'яті як базової функції людського мозку	156
Рутицька В.В., Степанов О.В. Про розв'язання суперечності між інвестиційними оцінками NPV та IRR для конфліктуєчих проектів	160
Савран Р.О. Розробка стеганоалгоритму стійкого до методів стеганоаналізу	166
Скобелєв В.Г. Оцінка кількості гамільтонових циклів у регулярних графах спеціального типу	169

Стешенко Г.М. Дослідження існування і єдності розв'язку для параболічних систем з сингулярними правими частинами	172
Шарапов М.М. Рекурентний розв'язок задачі Еддінгтона	180
Ямборак В.В. Типова структура довгострокової пам'яті	184

РАДІОФІЗИКА

Голобородько Н.С., Голобородько А.О., Кузьменко К.М. Фазові зміни оптичної хвилі при відбиванні від локальних неоднорідностей поверхні	191
Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Електростатичний потенціал у системі напівпровідник - вакуум - метал до та після контакту	195
Находкін М.Г., Куліш М.П., Родіонова Т.В., Синяньський О.М. Фасетування вершин двійників в зернах полікремнієвих плівок	201
Нечипорук О.Ю., Скрипка С.Л., Чирков О.О. Перестроювання частоти мета структур	206
Обелець О.К., Прокопенко О.В. Мікрохвильові властивості вищих мод чвертьхвильового резонатора поверхневої електромагнітної хвилі	210
Овечко В.С. Розклад фур'є-спектру радіосигналу за елементарними хвильовими пакетами	216
Пархоменко Д. А., Колєнов С.О. Анізотропна акустооптична взаємодія у 2D фотонному кристалі поблизу фотонної та фононної заборонених зон	219

СУЧАСНА ФІЗИКА

Барабаш Ю.М., Заболотний М.А., Куліш М.П., Дмитренко О.П., Костіна А., Сидельникова Ю. Радіаційно стимульована динаміка конформаційного стану молекул NADH у приповерхневих шарах дистилату води	225
Боровий М.О., Гололобов Ю.П., Ісаєнко Г.Л., Сальник А.В. Вплив атомів домішки Fe на структурні фазові переходи в кристалах $TlGaSe_2$	231
Броварець О.О., Говорун Д.М. Чи продукує 5-бромурацил та його аналоги точкові помилки реплікації ДНК? Результати квантово-механічного аналізу	239
Бурлій П.В., Мельничук Є.Є., Жабітенко О.М., Козаченко В.В. Фототермоакустичний ефект в п'єзоелектричній пластині	243
Вакуленко О.В., Кондратенко С.В., Головинський С.Л., Гринь І.А., Повздовжня фотопровідність та фотолюмінесценція гетероструктур $In_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs$ з $InGaAs$ квантовими точками	247
Гаджилов М.В., Захаренко М.І. Граничні умови і повний топологічний заряд точкових особливостей в магнетиках	253
Гречко Л.Г., Гічан О.І., Лерман Л.Б., Білокриницька Л.М. Деякі фізико-математичні моделі розвитку онкологічних пухлин	257
Гречко Л.Г., Грищук О.Ю. Деякі фізико-математичні моделі розвитку онкологічних пухлин	261
Казо І.Ф., Мавланова О.Д., Весна Г.В. Морфологія поверхні керамік системи $TiC-B_4C$	263
Конончук Г.Л., Стукаленко В.В., Терентьева Ю.Г. Скануючий інтерферометр Фабрі-Перо: інтерференція різночастотних коливань	267
Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. Термоелектричний адсорбційний ефект в порошку активованого вугілля	271
Мельниченко М.М., Лученко А.І., Кулик С.П., Свеженцова К.В. Скануюча тунельна спектроскопія плівок наноструктурованого кремнію	275
Ніколаєнко Т.Ю., Войтешенко І. С., Булавін Л.А., Говорун Д.М. Визначення коефіцієнтів жорсткості для колективних ступенів вільності біологічних молекул	279
Пацай Б.Д., Теселько П.О., Цмоць В.М. Природа парамагнітних центрів, які утворюються в кристалах Cz $p-Si$ після високотемпературної обробки	283
Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Оптичні властивості тонких плівок лазерних барвників нанесених на металеве дзеркало	287
Рудніков Є.Г., Альохін О.Д., Остапчук Ю.Л. Термодинамічні потенціали та термодинамічні характеристики речовини поблизу критичної точки	293
Тоцький І. М., Казо І. Ф., Попов О. Ю., Макара В. А. Розподіл мікротвердості двофазних композитних систем	297
Храпійчук Г.В., Чалий О.В. Вплив бародифузії на активний транспорт іонів через клітинну мембрану	303
Шайкевич І.А., Ломакіна О.В., Мельниченко Л.Ю., Шибіко Я.А. Спектральні залежності еліпсометричних параметрів тонких плівок перехідних металів при збудженні поверхневих поляритонів	307

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 514.752.432

Вашпанова Т.Ю., аспірант ОНУ
ім. І.І. Мечникова, Безкоровайна Л.Л., к.ф.-м.н.,
доц. каф. геометрії і топології ОНУ ім. І.І.
Мечникова.

LGT-сітка поверхні та її властивості

В даній роботі введено поняття LGT - сітки.
Доведено, що регулярна LGT - сітка існує на
будь-якій C^3 - поверхні без омбілічних точок.
Знайдені деякі властивості LGT - ліній.

Ключові слова: LGT-лінії, LGT - сітка,
індикатриса геодезичного скруту.

*E-mail: tatyana_top@mail.ru
Статтю представив

§1. Головні напрями геодезичного скруту

Нехай у тривимірному евклідовому просторі
 E_3 регулярна поверхня S класу C^3 задана
рівнянням

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(x^1, x^2), \quad (1.1)$$

де $\mathbf{r}$ радіус-вектор точки поверхні,

(x^1, x^2) - криволінійні координати цієї точки.

Розглянемо на поверхні довільну регулярну лінію
 L , що проходить через задану точку $M \in S$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(x^1(s), x^2(s)), \quad (1.2)$$

де s - натуральний параметр. Відомо, що для L
мають місце дериваційні рівняння лінії на
поверхні (див., наприклад [1]):

$$\frac{ds}{ds} = k_s \mathbf{n} - \sigma_s \mathbf{l}, \quad \frac{d\mathbf{n}}{ds} = \tau_s \mathbf{l} - k_s \mathbf{s}, \quad \frac{d\mathbf{l}}{ds} = \sigma_s \mathbf{s} - \tau_s \mathbf{n}. \quad (1.3)$$

Тут $\mathbf{s}$ - орт дотичної до L , $\mathbf{n}$ - орт нормалі до S ,
 $\mathbf{l}$ - орт тангенціальної нормалі в точці M до L .
Вектори $\mathbf{s}, \mathbf{n}, \mathbf{l}$ - взаємно перпендикулярні.
Величини k_s і σ_s називаються відповідно
нормальною і геодезичною кривиною лінії L на
поверхні, τ_s - геодезичним скрутом цієї лінії.

Формулу для геодезичного скруту кривої
можна подати у вигляді [2]:

Vashpanova T.Y., graduate of Odessa State
University, Bezkorovajna L.L., associate professor
of Odessa State University.

LGT-network of a surface and its properties

In the present work a definition of a LGT -
network was given. It is proved that the regular
LGT - network exists on any C^3 - surface without
umbilical points. Some properties of LGT - lines
was been found.

Key Words: LGT-lines, LGT - network, indicatrix
of geodesic torsion.

$$\tau_s = \frac{\rho_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta}{g_{\gamma\mu} dx^\gamma dx^\mu}, \quad (1.4)$$

де $g_{\gamma\mu} dx^\gamma dx^\mu$ і $\rho_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta$ - перша та
четверта основні квадратичні форми
поверхні S відповідно,

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (b'_\beta c_{\alpha i} + b'_\alpha c_{\beta i}) \quad (1.5)$$

$b'_\alpha = b_{\alpha k} g^{ik}$, $g^{\alpha\beta} = c^{\alpha\gamma} c^{\beta k} g_{\gamma k}$, $b_{\alpha i}$ - коефіцієнти
другої основної квадратичної форми, $c_{\alpha i}$ -
дискримінантний тензор поверхні S
($c_{11} = c_{22} = 0, c_{12} = -c_{21} = \sqrt{g}, g = g_{11}g_{22} - g_{12}^2$).

Надалі всі індекси набуватимуть значень 1, 2.
Формулу (1.4) за умови $dx^2 \neq 0$ у
розгорнутому вигляді запишемо так:

$$\tau_s = \frac{\rho_{11} \left(\frac{dx^1}{dx^2} \right)^2 + 2\rho_{12} \frac{dx^1}{dx^2} + \rho_{22}}{g_{11} \left(\frac{dx^1}{dx^2} \right)^2 + 2g_{12} \frac{dx^1}{dx^2} + g_{22}},$$

Звідси випливає, що геодезичний скрут є
функцією точки поверхні і напрямку.

Таким чином, в даній точці поверхні
геодезичний скрут τ_s залежить від напрямку
кривої, тому для всіх кривих, що лежать на
поверхні та мають в даній точці спільну дотичну,

величина геодезичного скруту τ_s зберігає однакове значення. Ця величина називається також *геодезичним скрутом поверхні* у напрямі s .

Означення 1.1. Напрямок в даній точці поверхні, у якому геодезичний скрут набуває екстремального значення, будемо називати *головним напрямом геодезичного скруту*.

Визначимо головні напрями геодезичного скруту. Для цього учинимо так. Продиференціюємо рівність $\rho_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta = \tau_s \cdot g_{\gamma\mu} dx^\gamma dx^\mu$ спочатку по dx^1 , потім по dx^2 , вважаючи, що похідні від τ_s по цих змінних дорівнюють нулеві.

Матимемо

$$\begin{cases} (\rho_{11} - g_{11} \cdot \tau_s) dx^1 + (\rho_{12} - g_{12} \cdot \tau_s) dx^2 = 0, \\ (\rho_{12} - g_{12} \cdot \tau_s) dx^1 + (\rho_{22} - g_{22} \cdot \tau_s) dx^2 = 0. \end{cases} \quad (1.6)$$

З цих рівностей можна визначити головні напрями геодезичного скруту і відповідні екстремальні значення геодезичного скруту. Виключимо τ_s з (1.6), тоді отримаємо рівняння для головних напрямів геодезичного скруту:

$$(\rho_{11}g_{12} - \rho_{12}g_{11}) dx^{12} + (\rho_{11}g_{22} - \rho_{22}g_{11}) dx^1 dx^2 + (\rho_{12}g_{22} - \rho_{22}g_{12}) dx^{22} = 0. \quad (1.7)$$

Введемо до розгляду тензор

$$h_{\alpha\beta} = (\rho_{\alpha i} c_{\beta j} + \rho_{\alpha j} c_{\beta i}) g^{ij}, \quad (1.8)$$

якому можна надати вигляду

$$h_{\alpha\beta} = 2(Hg_{\alpha\beta} - b_{\alpha\beta}), \quad (1.9)$$

де H - середня кривина поверхні S .

За допомогою тензора $h_{\alpha\beta}$ рівняння (1.7)

запишемо в інваріантній формі:

$$h_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta = 0. \quad (1.10)$$

Очевидно, умова $h_{\alpha\beta} = 0$ рівносильна умові

$$\frac{b_{11}}{g_{11}} = \frac{b_{12}}{g_{12}} = \frac{b_{22}}{g_{22}}, \quad (1.11)$$

яка характеризує омбілічні точки поверхні (див. [3]). Отже, в омбілічних точках і тільки в них, довільний напрям поверхні є головним напрямом геодезичного скруту. В подальшому ці точки будемо виключати з розгляду.

Має місце наступна

Теорема 1.1. У будь-якій точці регулярної S^3 -поверхні, за виключенням омбілічних точок, існує два різних дійсних головних напрями геодезичного скруту, до того ж вони завжди ортогональні.

Доведення. Не обмежуючи загальності міркувань, віднесемо поверхню до ортогональної системи координат $g_{12} = 0$ і складемо дискримінант квадратного рівняння (1.7)

$$D = (\rho_{11}g_{22} - \rho_{22}g_{11})^2 + 4\rho_{12}^2 g_{11}g_{22}. \quad (1.12)$$

Очевидно, в неомбілічній точці $D > 0$, отже рівняння має два дійсних різних корені, які визначають головні напрями геодезичного скруту.

Для доведення ортогональності головних напрямів геодезичного скруту з (1.7) за формулами Вієта при $\rho_{11}g_{12} - \rho_{12}g_{11} \neq 0$ в довільних координатах знайдемо

$$\begin{aligned} \frac{dx^1}{dx^2} + \frac{\delta x^1}{\delta x^2} &= \frac{\rho_{22}g_{11} - \rho_{11}g_{22}}{\rho_{11}g_{12} - \rho_{12}g_{11}}, \\ \frac{dx^1}{dx^2} \cdot \frac{\delta x^1}{\delta x^2} &= \frac{\rho_{12}g_{22} - \rho_{22}g_{12}}{\rho_{11}g_{12} - \rho_{12}g_{11}}. \end{aligned}$$

Скориставшись цими формулами, обчислимо:

$$\begin{aligned} dr \cdot \delta r &= (r_1 dx^1 + r_2 dx^2)(r_1 \delta x^1 + r_2 \delta x^2) = \\ &= dx^2 \cdot \delta x^2 \left(r_1 \cdot r_1 \cdot \frac{dx^1}{dx^2} \cdot \frac{\delta x^1}{\delta x^2} + r_1 \cdot r_2 \left(\frac{dx^1}{dx^2} + \frac{\delta x^1}{\delta x^2} \right) + r_2 \cdot r_2 \right) = \\ &= dx^2 \cdot \delta x^2 \left(g_{11} \frac{dx^1}{dx^2} \cdot \frac{\delta x^1}{\delta x^2} + g_{12} \left(\frac{dx^1}{dx^2} + \frac{\delta x^1}{\delta x^2} \right) + g_{22} \right) = \\ &= dx^2 \cdot \delta x^2 \left(\frac{g_{11}(\rho_{22}g_{11} - \rho_{11}g_{22})}{\rho_{11}g_{12} - \rho_{12}g_{11}} + \frac{g_{12}(\rho_{12}g_{22} - \rho_{22}g_{12})}{\rho_{11}g_{12} - \rho_{12}g_{11}} + g_{22} \right) = 0 \end{aligned}$$

Теорему доведено.

§2. Головні геодезичні скрути. Середній та повний геодезичні скрути

Означення 2.1. Екстремальні значення геодезичного скруту в даній точці поверхні будемо називати *головними геодезичними скрутами*.

Екстремальні значення геодезичного скруту в даній точці визначимо, коли виключимо dx^1, dx^2 з системи рівнянь (1.6):

$$\begin{vmatrix} \rho_{11} - g_{11}\tau_s & \rho_{12} - g_{12}\tau_s \\ \rho_{12} - g_{12}\tau_s & \rho_{22} - g_{22}\tau_s \end{vmatrix} = 0.$$

В розгорнутому вигляді

$$\begin{aligned} (g_{11}g_{22} - g_{12}^2)\tau_s^2 - (\rho_{11}g_{22} + \rho_{22}g_{11} - 2\rho_{12}g_{12})\tau_s + \\ + (\rho_{11}\rho_{22} - \rho_{12}^2) = 0. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Отримали квадратне алгебраїчне рівняння відносно τ_s .

Позначивши через τ_1, τ_2 - корені цього рівняння, які водночас є головними геодезичними скрутами, за теоремою Вієта матимемо

$$2\tilde{H} = \tau_1 + \tau_2 = \frac{\rho_{11}g_{22} - 2\rho_{12}g_{12} + \rho_{22}g_{11}}{g_{11}g_{22} - g_{12}^2}, \quad (2.2)$$

$$\tilde{K} = \tau_1 \cdot \tau_2 = \frac{\rho_{11}\rho_{22} - \rho_{12}^2}{g_{11}g_{22} - g_{12}^2}. \quad (2.3)$$

Величини $\tilde{H}$ і $\tilde{K}$ є інваріантами поверхні, їх можна виразити у тензорному вигляді:

$$2\tilde{H} = \rho_{\alpha}^{\alpha}, \quad (2.4)$$

$$2\tilde{K} = c_{\alpha\beta}c^{\lambda\gamma}\rho_{\lambda}^{\alpha}\rho_{\gamma}^{\beta}. \quad (2.5)$$

Функції $\tilde{H}$ і $\tilde{K}$ будемо називати *середнім і повним геодезичними скрутами* поверхні відповідно.

Відмітимо деякі властивості зазначених інваріантів.

Теорема 2.1. Середній геодезичний скрут $\tilde{H}$ на будь-якій регулярній поверхні тотожно дорівнює нулю.

Доведення. Для доведення підставимо компоненти тензора $\rho_{\alpha\beta}$ в рівність (2.2). В довільній системі координат отримаємо, що $2\tilde{H} = 0$.

Теорему доведено.

Теорема 2.2. Повний геодезичний скрут $\tilde{K}$ можна подати через ейлерову різницю E у вигляді:

$$\tilde{K} = -E. \quad (2.6)$$

Доведення. Підставимо компоненти тензора $\rho_{\alpha\beta}$ в рівність (2.3). Після деяких нескладних перетворень в довільній системі координат отримаємо:

$$\begin{aligned} \tilde{K} &= \frac{\rho}{g} = \frac{1}{g^2}(b_{12}g_{11} - b_{11}g_{12})(b_{22}g_{12} - b_{12}g_{22}) - \\ &- \frac{1}{4g^2}(b_{22}g_{11} - b_{11}g_{22})^2 = -H^2 + \frac{b}{g} = K - H^2 = -E. \end{aligned}$$

Теорему доведено.

§3. Поняття LGT- сітки поверхні

Означення 3.1. Лінію на поверхні, напрям якої в кожній точці збігається з головним напрямом геодезичного скруту будемо називати *лінією геодезичного скруту* (LGT - лінією).

LGT - лінії слід шукати з диференціального рівняння (1.7), яке в

свою чергу, очевидно, розпадається на два диференціальні рівняння (омбілічні точки виключаємо):

$$\frac{dx^1}{dx^2} = f_1(x^1, x^2), \quad \frac{\delta x^1}{\delta x^2} = f_2(x^1, x^2). \quad (3.1)$$

Кожне з цих диференціальних рівнянь (3.1) визначає регулярне однопараметричне сімейство ліній на поверхні. Отже, на поверхні існує дійсна регулярна сітка LGT - ліній, яку будемо називати *сіткою ліній геодезичного скруту* (LGT-сіткою).

Сітка ліній, дискримінант сіткового тензора якої від'ємний, називається *гіперболічною сіткою*.

В даному випадку дискримінант сіткового тензора

$$h = h_{11}h_{22} - h_{12}^2 = -4gE < 0.$$

Звідси випливає, що LGT - сітка є сіткою гіперболічного типу. Таким чином, мають місце

Теорема 3.1. На будь-якій регулярній C^3 - поверхні без омбілічних точок існує дійсна регулярна LGT - сітка.

Теорема 3.2. Необхідною і достатньою умовою того, щоб координатна сітка поверхні збігалася з LGT - сіткою, є рівності:

$$g_{12} = 0, \rho_{12} = 0 \quad (3.2)$$

Доведення. Необхідність. Нехай LGT - сітка є координатною. Тоді $dx^1 = 0$ або $dx^2 = 0$. Підставивши ці рівності в диференціальне рівняння LGT - сітки, отримаємо однорідну систему алгебраїчних рівнянь відносно двох невідомих g_{12}, ρ_{12} :

$$\begin{cases} g_{12}\rho_{11} - g_{11}\rho_{12} = 0, \\ g_{12}\rho_{22} - g_{22}\rho_{12} = 0. \end{cases}$$

Визначник цієї системи $\Delta = \rho_{22}g_{11} - \rho_{11}g_{22} \neq 0$ (оскільки омбілічні точки виключаємо). Таким чином, система має єдиний розв'язок

$$g_{12} = 0, \rho_{12} = 0$$

Достатність. Виконуються рівності (3.2), то рівняння (1.7) набуває вигляду:

$$(\rho_{22}g_{11} - \rho_{11}g_{22})dx^1dx^2 = 0.$$

Оскільки $\rho_{22}g_{11} - \rho_{11}g_{22} \neq 0$, то дістанемо, що $dx^1 = 0$ або $dx^2 = 0$. Звідси випливає, що LGT - лінії утворюють координатну сітку.

Теорему доведено.

Теорема 3.3. Регулярна LGT - сітка збігається з сіткою асимптотичних ліній для мінімальних поверхонь і тільки для них.

Доведення. Для того, щоб рівняння LGT - сітки та сітки асимптотичних ліній визначали один і той же геометричний образ, необхідно і достатньо, щоб виконувались умови:

$$h_{\alpha\beta} = \lambda b_{\alpha\beta},$$

які запишемо у вигляді:

$$\frac{h_{11}}{g_{11}} = \frac{h_{12}}{g_{12}} = \frac{h_{22}}{g_{22}}$$

$$\text{або} \quad \frac{g_{11}}{b_{11}} H = \frac{g_{12}}{b_{12}} H = \frac{g_{22}}{b_{22}} H. \quad (3.3)$$

У випадку немінімальної поверхні ($H \neq 0$) отримаємо умову, яка характеризує омбілічні точки. А їх ми виключили з розгляду. Для мінімальних поверхонь і тільки для них рівність (3.3) виконується тотожно.

Теорему доведено.

Теорема 3.4. На будь-якій поверхні без омбілічних точок регулярна LGT - сітка не може збігатися з сіткою ліній кривини.

Доведення. Для того, щоб рівняння LGT - сітки та сітки ліній кривини визначали один і той же геометричний образ, необхідно і достатньо, щоб виконувались умови:

$$h_{\alpha\beta} = \lambda \rho_{\alpha\beta}$$

або

$$\frac{h_{11}}{\rho_{11}} = \frac{h_{12}}{\rho_{12}} = \frac{h_{22}}{\rho_{22}}. \quad (3.4)$$

Підставивши формули (1.5) в рівності (3.4), після нескладних перетворень, отримаємо умови (1.11), які ми виключили з розгляду.

Теорему доведено.

§4. Індикатриса геодезичного скруту

Зафіксуємо на поверхні S точку P і в дотичній площині побудуємо косокутну декартову систему координат так, щоб вісі P_x, P_y були відповідно

дотичними до x^1, x^2 - ліній в цій точці. Тоді координатними ортами будуть вектори:

$$k_1 = \frac{r_1}{|r_1|}, \quad k_2 = \frac{r_2}{|r_2|}.$$

Оскільки $E = r_1^2 = |r_1|^2, G = r_2^2 = |r_2|^2$, то

$$r_1 = \sqrt{E} \cdot k_1, \quad r_2 = \sqrt{E} \cdot k_2.$$

Візьмемо в точці P нормальний переріз γ_n з внутрішніми параметричними рівняннями

$$x^1 = x^1(s), x^2 = x^2(s),$$

де s - натуральний параметр.

Як відомо, при такій параметризації дотичний вектор

$$k = r = \frac{dr}{ds} = r_1 \frac{dx^1}{ds} + r_2 \frac{dx^2}{ds}$$

є ортом. Нехай τ_s - геодезичний скрут в точці

$P \in S$ і $R_\tau = \frac{1}{\tau_s}$ - радіус геодезичного скруту.

Відкладемо на дотичній прямій з напрямком

k точку Q таку, що $|PQ| = \sqrt{R_\tau}$. Тоді

$$\begin{aligned} |PQ| &= \sqrt{|R_\tau|} \cdot k = \sqrt{|R_\tau|} \left(r_1 \frac{dx^1}{ds} + r_2 \frac{dx^2}{ds} \right) = \\ &= \sqrt{|R_\tau|E} \cdot \frac{dx^1}{ds} k_1 + \sqrt{|R_\tau|G} \cdot \frac{dx^2}{ds} k_2. \end{aligned}$$

Змінюючи нормальний переріз в точці P , будемо змінювати напрям k , R_τ і отримаємо в дотичній площині геометричне місце точок кінців відрізків векторів PQ , яке будемо називати *індикатрисою геодезичного скруту* в точці $P \in S$.

Запишемо рівняння індикатриси геодезичного скруту в косокутній декартовій системі P_{xy} . З попереднього розкладу маємо

$$PQ = (x, y) \Rightarrow$$

$$x = \sqrt{|R_\tau|E} \cdot \frac{dx^1}{ds}, y = \sqrt{|R_\tau|G} \cdot \frac{dx^2}{ds}. \quad (4.1)$$

З іншого боку

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_\tau} = \tau_s = \frac{IV}{I} &= \frac{\rho_{11} (dx^1)^2 + 2\rho_{12} dx^1 dx^2 + \rho_{22} (dx^2)^2}{ds^2} = \\ &= \rho_{11} \left(\frac{dx^1}{ds} \right)^2 + 2\rho_{12} \frac{dx^1}{ds} \cdot \frac{dx^2}{ds} + \rho_{22} \left(\frac{dx^2}{ds} \right)^2. \end{aligned}$$

Звідси за формулою (4.1) одержимо

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_\tau} &= \rho_{11} \frac{x^2}{|R_\tau|E} + 2\rho_{12} \frac{xy}{\sqrt{EG}|R_\tau|} + \rho_{22} \frac{y^2}{|R_\tau|G}, \\ \frac{\rho_{11}}{g_{11}} x^2 + \frac{2\rho_{12}}{\sqrt{g_{11}g_{22}}} xy + \frac{\rho_{22}}{g_{22}} y^2 &= \pm 1. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Рівняння (4.2) - це рівняння індикатриси геодезичного скруту. З нього видно, що вона є кривою другого порядку. Малий дискримінант цієї кривої має вигляд

$$\delta = -\frac{Eg}{g_{11}g_{22}} < 0,$$

де E - ейлерова різниця. Звідси випливає, що індикатриса геодезичного скруту є кривою другого порядку гіперболічного типу. Отже, має місце така

Теорема 4.1 На будь-якій поверхні без омбілічних точок індикатриса геодезичного скруту задається рівнянням (4.2) і є гіперболою.

§5. Приклади сіток ліній геодезичного скруту та індикатрис геодезичного скруту на поверхні

Нехай поверхня прямого гелікоїда задана рівнянням

$$r = \{x \cos y, x \sin y, y\}.$$

Обчислимо

$$g_{11} = 1, g_{12} = 0, g_{22} = x^2 + 1, b_{11} = b_{22} = 0, \\ b_{12} = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}}, \rho_{22} = 0, \rho_{11} = -\frac{1}{x^2 + 1}, \rho_{22} = 1,$$

$$h_{11} = h_{22} = 0, h_{12} = \frac{2}{\sqrt{x^2 + 1}}, 2H = 0,$$

$$K = \bar{K} = -\frac{1}{(x^2 + 1)^2}, 2\bar{H} = 0.$$

Для даної поверхні LGT - лінії та асимптотичні лінії збігаються і мають вигляд:

$$x = \text{const} \text{ або } y = \text{const}.$$

Отже, для прямого гелікоїда: LGT - сітка збігається з координатною сіткою (див. Теорема 3.2); LGT - сітка збігається з сіткою асимптотичних ліній (див. Теорема 3.3.).

Рівняння індикатрис геодезичного скруту у точці $P(1,1)$ для прямого гелікоїда мають вигляд:

$$\frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2} = 1, \frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2} = -1. \quad (5.1)$$

Отже, індикатрисами геодезичного скруту для прямого гелікоїда є криві (5.1), які, очевидно, є гіперболами.

Еліптичний параболоїд задамо рівнянням:

Список використаних джерел

1. Векун И.Н. Обобщенные аналитические функции [изд. 2-е, перераб. и доп.] / Олейник О.А., Шабат Б.В. Москва: Наука, 1988. – 512 с.

$$r = \left\{ x \cos y, x \sin y, \frac{x^2}{2} \right\}.$$

Обчислимо

$$g_{11} = x^2 + 1, g_{12} = 0, g_{22} = x^2, b_{11} = \frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}},$$

$$b_{22} = \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + 1}}, b_{12} = 0, \rho_{22} = \rho_{11} = 0, \rho_{12} = \frac{x^3}{2(x^2 + 1)},$$

$$h_{11} = \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + 1}}, h_{22} = -\frac{x^4}{\sqrt{(x^2 + 1)^3}}, h_{12} = 0,$$

$$K = \frac{1}{(x^2 + 1)^2}, \bar{K} = -\frac{x^4}{4(x^2 + 1)^3}, 2\bar{H} = 0, 2H = \frac{2 + x^2}{\sqrt{(x^2 + 1)^3}}.$$

Диференціальне рівняння LGT- сітки для еліптичного параболоїда має вигляд:

$$dx^2 - \frac{x^2}{1 + x^2} dy^2 = 0.$$

Звідси знаходимо два сімейства рівнянь LGT- ліній для даної поверхні:

$$y = \sqrt{1 + x^2} + \frac{1}{2} \ln \left| \frac{2 + x^2 - 2\sqrt{1 + x^2}}{x^2} \right| + c_1,$$

$$y = -\sqrt{1 + x^2} - \frac{1}{2} \ln \left| \frac{2 + x^2 - 2\sqrt{1 + x^2}}{x^2} \right| + c_2,$$

де c_1, c_2 - довільні сталі.

Рівняння індикатрис геодезичного скруту у точці $P(1,1)$ для еліптичного параболоїда мають вигляд:

$$y = \frac{\sqrt{8}}{x}, \quad y = -\frac{\sqrt{8}}{x} \quad (5.2)$$

Таким чином, індикатрисами геодезичного скруту для еліптичного параболоїда є криві (5.2), які, також є гіперболами.

2. Безкоровайна Л.Л. Ареальні нескінченно малі деформації і врівноважені стани пружної оболонки: Навчальний посібник. Одеса: Астропринт, 1999. – 168 с.
3. Каган В.Ф. Основы теории поверхностей. - М.-Л.: Гостехиздат.-Т.І.-1947.-512 с.

Надійшла до редколегії

УДК 517.929.4

Хусаїнов Д.Я.¹, д.ф.-м.н., проф., Діблік Й.²,
д.ф.-м.н., проф., Ружичкова М.³, к.ф.-м.н.,
проф., Лукачева Я.⁴, асп.

D.Ya. Khusainov, prof., J.Diblik, prof, Ruzhickova,
prof., Lukacova Ja., Ph.S.

Uniform in an argument delay motion stabilization for oscillation delay equations by using Lyapunov functions method

The article contains the information about systems of second order linear delay differential equations. Uniform stability conditions were proved. System stabilization results after introducing of an inverse solution were given.

Key Words: delay differential equation, stabilization, Lyapunov function.

Стабілізація, рівномірна за запізнюванням аргументу, руху в рівняннях коливання із післядією методом функцій Ляпунова

В роботі розглянуто системи, що описані лінійними диференціальними рівняннями другого порядку із запізнюванням. Доведено умови рівномірної стійкості. Наведено результати з стабілізації системи за рахунок введення оберненого зв'язку.

Ключові слова: диференціальне рівняння із запізнюванням, стабілізація, функція Ляпунова.

*E-mail: dkh@unicyb.kiev.ua, diblik@feec.vutbr.cz, miroslava.ruzickova@fpv.utc.sk,
jana.lukacova@fpv.uniza.sk

Статтю представив д.т.н. Гаращенко Ф.Г.

Resume

In this article is considered the oscillatory process described by the scalar differential equation of the second order with constant coefficients with delay. The problem of stabilization at the expense of feedback introduction is considered. Stability conditions are defined with use of a method of functions of Lyapunov.

Introdaction

At research of dynamic systems of the various type by one of the most used is Lyapunov's second method. It allows not only to receive the statement about stability, but also to calculate some characteristics of transients. At research of systems of the differential-difference equations this method is used in two directions. First, it is a classical method of finite-dimensional functions with B.S.Razumihina's additional condition [1].

This condition consists in use at an estimation of a total derivative of a condition that the prehistory of a state of system is in the area limited to a surface of level on which the derivative is calculated. Secondly, it is the method of functionals of Lyapunov-Krasovsky wich means that the segment of a trajectory of movement is considered as a point in functional space [2-4]. In given article the method of finite-dimensional Lyapunov's functions is used. The linear stationary system with constant delay is preliminary investigated. Conditions of asymptotic stability, uniform on the delay, similar received in [5] are received. Further it is considered oscillatory systems of the second order with constant delay. With use of the received results the problem of stabilization of oscillatory system solves.

¹ This research was supported by the project FRVS 1293/2010 of the Ministry of Rducation, Youth and Sports of Czech Republik

² The research was supported by the Grant VEGA 1/0090/09 of the Grant Agency of Slovak Republik and by the Grant APVV-0700 of the Slovak Research and Development Agency

³ The research was supported by the Grant VEGA 1/0090/09 of the Grant Agency of Slovak Republik and by the Grant APVV-0700 of the Slovak Research and Development Agency

⁴ The research was supported by the Grant VEGA 1/0090/09 of the Grant Agency of Slovak Republik and by the Grant APVV-0700 of the Slovak Research and Development Agency

© Хусаїнов Д.Я., Діблік Й., Ружичкова М., Лукачева Я., The research was supported by the Grant VEGA 1/0090/09 of the Grant Agency of Slovak Republik and by the Grant APVV-0700 of the Slovak Research and Development Agency 2010

1. Conditions of asymptotic stability of linear systems with delay

We will preliminary consider system of the linear uniform differential equations with constant coefficients and one constant delay of a general view

$$\begin{aligned} \dot{z}(t) &= Az(t) + Bz(t-\tau), \quad t \geq 0, \quad z(t) \in R^n, \\ z(t) &= \varphi(t), \quad -\tau \leq t \leq 0. \end{aligned} \quad (1.1)$$

We will receive stability conditions of system (1.1), uniform on delay, i.e. for the any $\tau > 0$. At research we will use the method of finite-dimensional Lyapunov's functions of a square-law kind $V(z, t) = e^\gamma z^T H z$ with some positively defined matrix H , which we will define further. Obtain the statements B.S. Razumihina's condition [1] is used. Methods of the proof of the asymptotic stability are put in a basis of the proof of results, formulated in [5].

Let C – is some positively defined matrix, and H – matrix which is the solution of the matrix equation of Lyapunov.

$$(A+B)^T H + H(A+B) = -C. \quad (1.2)$$

As appears from the theory of stability of linear systems, if matrix $A+B$ is asymptotic stable, then at any positively defined matrix C the matrix H will be also positively defined [5].

Here and further we will use the following vector and matrix norms

$$\begin{aligned} \|z(t)\| &= \left\{ \sum_{i=1}^n z_i^2(t) \right\}^{1/2}, \quad \|z(t)\|_r = \max_{-\tau \leq s \leq 0} \|z(t+s)\|, \\ |A| &= \left\{ \lambda_{\max}(AA^T) \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

$\lambda_{\max}(\bullet)$, $\lambda_{\min}(\bullet)$ – are extreme eigenvalues of corresponding symmetric, positively defined matrices. We will designate through $\partial V_i^{\alpha, \gamma}$ – a surface of level of function of Lyapunov $V(z, t) = e^\gamma z^T H z$, and $V_i^{\alpha, \gamma}$ – an area which it limits, i.e.

$$\begin{aligned} \partial V_i^{\alpha, \gamma} &= \{(z, t): e^\gamma z^T H z = \alpha\}, \\ V_i^{\alpha, \gamma} &= \{(z, t): e^\gamma z^T H z < \alpha\}. \end{aligned}$$

As appears from inequalities of square-law forms [6], for Lyapunov's function $V(z, t) = e^\gamma z^T H z$ it will be true.

$$e^\gamma \lambda_{\min}(H) |z(t)|^2 \leq V(z(t), t) \leq e^\gamma \lambda_{\max}(H) |z(t)|^2. \quad (1.4)$$

We will preliminary prove the following statement.

Lemma 1.1. Let exists $\alpha > 0$, that at $t \geq 0$ inclusion $(z(t), t) \in V_i^\alpha$ will be true. Then for the solution $z(t)$ the inequality will be true

$$|z(t)| < \sqrt{\frac{\alpha}{\lambda_{\min}(H)}} e^{-\frac{1}{2}t}, \quad t > 0. \quad (1.5)$$

Proof. If inclusion $(z(t), t) \in V_i^{\alpha, \gamma}$ will be true, then as appears from inequalities (1.4)

$$e^\gamma \lambda_{\min}(H) |z(t)|^2 \leq V(z(t), t) < \alpha.$$

From here follows (1.5).

Lemma 1.2. Let for derivative of function $V(z, t) = e^\gamma z^T H z$ along movement $z(t)$ at $t > 0$ condition is satisfied

$$\frac{d}{dt} V(z(t), t) < -\beta e^\gamma |z(t)|^2, \quad \beta > 0, \quad \gamma > 0. \quad (1.6)$$

Then for $z(t)$ the inequality is fair

$$\begin{aligned} |z(t)| &< \sqrt{\varphi(H)} |z(0)| \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{\beta}{\lambda_{\max}(H)} + \gamma \right] t \right\}, \\ \varphi(H) &= \frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}, \quad t \geq 0. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Proof. We will rewrite the right part of the inequality (1.4) in a form

$$-e^\gamma |z(t)|^2 \leq -\frac{1}{\lambda_{\max}(H)} V(z(t), t).$$

Having substituted the received expression in the condition (1.6) of lemmas 1.2, we will receive that for Lyapunov's total derivative of function will be true

$$\frac{d}{dt} V(z(t), t) < -\frac{\beta}{\lambda_{\max}(H)} V(z(t), t), \quad \beta > 0, \quad \gamma > 0.$$

Solving the received matrix inequality, we will write down

$$\begin{aligned} V(z(t), t) &< V(z(0), 0) \exp \left\{ -\frac{\beta}{\lambda_{\max}(H)} t \right\}, \quad \beta > 0, \\ \gamma &> 0. \end{aligned}$$

Again using an inequality (1.4), we will receive

$$\begin{aligned} e^\gamma \lambda_{\min}(H) |z(t)|^2 &\leq V(z(t), t) < V(z(0), 0) \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{\beta}{\lambda_{\max}(H)} t \right\} \leq \\ &\leq \lambda_{\max}(H) |z(0)|^2 \exp \left\{ -\frac{\beta}{\lambda_{\max}(H)} t \right\}. \end{aligned}$$

From here we have

$$|z(t)|^2 < \frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)} |z(0)|^2 \exp \left\{ -\left[\frac{\beta}{\lambda_{\max}(H)} + \gamma \right] t \right\}$$

and an inequality (1.7) from lemmas (1.1).

Following conditions of asymptotic stability take place.

Theorem 1.1. Let the matrix $A+B$ is asymptotic stable and there is positive defined matrix H , at

which such conditions are satisfied
 $\theta(0) = \lambda_{\min}(-A^T H - HA) - 2|HB|(1 + \sqrt{\varphi(H)}) > 0$.
(1.8)

Then the system (1.1) is asymptotic stable at arbitrary delay $\tau > 0$, and for its solution the following estimation of convergence is fair

$$\|x(t)\| \leq \sqrt{\varphi(H)} \|x(0)\|_r \exp\left\{-\frac{1}{2}\gamma^* t\right\},$$

$$\gamma^* = \frac{\gamma^{**}\theta(0)}{\gamma^{**}\lambda_{\max}(H) + \theta(0)}, \quad (1.9)$$

$$\theta(0) = \lambda_{\min}(-A^T H - HA) - 2|HB|(1 + \sqrt{\varphi(H)}),$$

$$\gamma^{**} = \frac{2}{\tau} \ln \left[\frac{\lambda_{\min}(-A^T H - HA) - 2|HB|}{2|HB|\sqrt{\varphi(H)}} \right].$$

Proof. For the proof we will use the Lyapunov's second method with function of a square-law kind $V(z, t) = e^{\gamma t} z^T H z$, where H – the symmetric positively certain matrix which is the solution of the matrix equation of Lyapunov (1.2). Let $z(t)$ – is arbitrary solution of system (1.1). Then at any $\gamma > 0$, as appears from bilateral inequalities (1.4), at $-\tau \leq t \leq 0$ will be true

$$e^{\gamma t} \lambda_{\min}(H) \|z(t)\|^2 \leq V(z(t), t) \leq \lambda_{\max}(H) \|z(0)\|_r^2,$$

i.e. $(z(t), t) \in V_{\alpha}^{\gamma}$, where $\alpha > \lambda_{\max}(H) \|z(0)\|_r$.

We will show that it will be true also and at $t > 0$. Let, by contradiction, it is not so, and at some $t = T > 0$ will be $(z(T), T) \in \partial V_{\alpha}^{\gamma}$. We will show that it is impossible.

We will calculate a total derivative of function of Lyapunov $V(z, t)$ along solution of system (1.1). We receive

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(z(t), t) &= \gamma e^{\gamma t} z^T(t) H z(t) + \\ &+ e^{\gamma t} [A z(t) + B z(t - \tau)]^T H z(t) + \\ &+ z^T(t) H [A z(t) + B z(t - \tau)] = \gamma e^{\gamma t} z^T(t) H z(t) + \\ &+ e^{\gamma t} z^T(t) [(A + B)^T H + H(A + B)] z(t) + \\ &+ 2e^{\gamma t} [z(t - \tau) - z(t)] B^T H z(t). \end{aligned}$$

Let the matrix $A + B$ is asymptotic stable and C is positive defined matrix. Using Lyapunov's matrix equation (1.2) and spectral matrix norm, we receive the following inequality

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(z(t), t) &\leq -e^{\gamma t} [\lambda_{\min}(C) - \lambda_{\max}(H)] z(t)^2 + \\ &+ 2e^{\gamma t} |HB| \|z(t)\| \|z(t) + z(t - \tau)\|. \end{aligned}$$

We will estimate the second composed. As, under the assumption, at $t = T$ there is a first exit on a level

surface $\partial V_{\alpha}^{\gamma}$, that, as appears from inequalities of square-law forms, for Lyapunov's function $V(z, t) = e^{\gamma t} z^T H z$ will be true

$$e^{\gamma(T-\tau)} \lambda_{\min}(H) \|z(T - \tau)\|^2 \leq V(z(T - \tau), T - \tau) < V(z(T), T) \leq e^{\gamma T} \lambda_{\max}(H) \|z(T)\|^2.$$

From here

$$\|z(T - \tau)\| < \sqrt{\varphi(H)} e^{\frac{1}{2}\gamma\tau} \|z(T)\|, \quad \varphi(H) = \frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}.$$

And for Lyapunov's total derivative function $V(z, t)$ will be fair

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(z(T), T) &< -e^{\gamma T} \times \\ &\times \left\{ \lambda_{\min}(C) - \gamma \lambda_{\max}(H) - 2|HB| \left[1 + e^{\frac{1}{2}\gamma\tau} \sqrt{\varphi(H)} \right] \right\} \|z(T)\|^2 \end{aligned}$$

Therefore, if the inequality is carried out

$$\begin{aligned} \beta(\gamma) &= \lambda_{\min}(C) - \gamma \lambda_{\max}(H) - \\ &- 2|HB| \left[1 + e^{\frac{1}{2}\gamma\tau} \sqrt{\varphi(H)} \right] > 0, \end{aligned} \quad (1.10)$$

than for Lyapunov's total derivative function will be fair

$$\frac{d}{dt} V(z(T), T) < -e^{\gamma T} \beta(\gamma) \|z(T)\|^2, \quad \beta(\gamma) > 0,$$

Lyapunov's function along solutions will not increase and also the assumption $(z(T), T) \in \partial V_{\alpha}^{\gamma}$ will be incorrect. Thus at all $t \geq 0$ will be $(z(t), t) \in \partial V_{\alpha}^{\gamma}$ i.e. the inequality (1.5) is carried out. From here

$$\|z(t)\| < \sqrt{\varphi(H)} e^{\frac{1}{2}\gamma t}, \quad t > 0,$$

as it was required to show. We will find the maximum value $\gamma^0 > 0$, at which $\beta(\gamma^0) = 0$, is carried out, i.e.

$$\lambda_{\min}(C) - 2|HB| \left[1 + e^{\frac{1}{2}\gamma^0\tau} \sqrt{\varphi(H)} \right] = \gamma^0 \lambda_{\max}(H).$$

To find the exact solution $\gamma = \gamma^0$ of this equation is not possible. We will consider reception of the confidant solutions $\gamma = \gamma^*$, at which $0 < \gamma^* < \gamma^0$ will be true. For this purpose we will change function

$$\theta(\gamma) = \lambda_{\min}(C) - 2|HB| \left[1 + e^{\frac{1}{2}\gamma\tau} \sqrt{\varphi(H)} \right]$$

by piece of the straight line passing through points $(0, \theta(0))$ and $(\gamma^{**}, 0)$, where γ^{**} – is a point in which function $\theta(\gamma)$ is equal to zero, i.e.

$$\lambda_{\min}(C) - 2|HB| \left[1 + e^{\frac{1}{2}\tau} \sqrt{\varphi(H)} \right] = 0.$$

The solution of this equation will be

$$\gamma^* = \frac{2}{\tau} \ln \left[\frac{\lambda_{\min}(C) - 2|HB|}{2|HB|\sqrt{\varphi(H)}} \right],$$

and the straight line, which is joining points $(0, \theta(0))$ and $(\gamma^*, 0)$, looks like

$$\bar{\theta}(\gamma) = \theta(0) \left[1 - \frac{\gamma}{\gamma^*} \right].$$

Thus instead of the equation

$$\theta(\gamma) = \gamma \lambda_{\max}(H)$$

We will consider the equation

$$\bar{\theta}(\gamma) = \gamma \lambda_{\max}(H)$$

Its solution will be

$$\gamma^* = \frac{\gamma^* \theta(0)}{\gamma^* \lambda_{\max}(H) + \theta(0)},$$

$$\theta(0) = \lambda_{\min}(C) - 2|HB| \left(1 + \sqrt{\varphi(H)} \right).$$

And, owing to convexity of function $\theta(\gamma)$,

$0 < \gamma^* < \gamma^0$ it will be true.

Thus we have received an inequality (1.9). The theorem 1.1 is proved.

2. Stabilization of oscillatory system by control without delay

We will use the results received in the previous section to a problem of stabilization of the equation of the second order

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t - \tau) = u(t), \tau > 0, x(t) \in R^1, t \geq 0. \quad (2.1)$$

The stabilization control we will search in the form of a linear feedback from current co-ordinate and its speed in the current moment of time, i.e. in a form

$$u(t) = -c_1 x(t) - c_2 \dot{x}(t).$$

Definition 2.1. The equation (2.1) is called as stabilized in a class of linear functions without delay if there will be a control $u^*(t) = -c_1 x(t) - c_2 \dot{x}(t)$, at which the equation

$$\ddot{x}(t) + c_2 \dot{x}(t) + c_1 x(t) + \omega^2 x(t - \tau) = 0 \quad (2.2)$$

will be asymptotic stable.

We will rewrite the equation of the second order (2.2) in the form of system of the differential equations of the first order.

$$\dot{x}(t) = y(t), \dot{y}(t) = -c_1 x(t) - c_2 y(t) - \omega^2 x(t - \tau).$$

Or in form

$$\dot{z}(t) = Az(t) + Bz(t - \tau), A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -c_1 & -c_2 \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\omega^2 & 0 \end{bmatrix}, z(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Matrix $A + B$ looks like

$$A + B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -(c_1 + \omega^2) & -c_2 \end{bmatrix}.$$

Its characteristic equation

$$\det(A + B - \lambda I) = \lambda^2 + c_2 \lambda + (c_1 + \omega^2) = 0.$$

A condition of asymptotic stability of a matrix $A + B$ is

$$c_2 > 0, c_1 + \omega^2 > 0. \quad (2.4)$$

Matrix equation (1.2) looks like

$$\begin{bmatrix} 0 & -(c_1 + \omega^2) \\ 1 & -c_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -(c_1 + \omega^2) & -c_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{12} & c_{22} \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Condition of positive definiteness of a matrix C is execution of system of inequalities

$$c_{11} > 0, c_{11}c_{22} - c_{12}^2 > 0. \quad (2.6)$$

Having opened the matrix equation (2.5), we will receive system of the equations

$$\begin{aligned} -2(c_1 + \omega^2)h_{12} &= -c_{11}, \\ h_{11} - c_2 h_{12} - (c_1 + \omega^2)h_{22} &= -c_{12}, \\ 2(h_{12} - c_2 h_{22}) &= -c_{22}. \end{aligned}$$

The solution of this system will be

$$\begin{aligned} h_{11} &= \frac{1}{2c_2} [c_{11} + c_{22}(c_1 + \omega^2)] + \frac{c_{11}c_{22}}{2(c_1 + \omega^2)} - c_{12}, \\ h_{12} &= \frac{c_{11}}{2(c_1 + \omega^2)}, h_{22} = \frac{1}{2c_2} \left[\frac{c_{11}}{c_1 + \omega^2} + c_{22} \right]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

As appears from the theory of stability of linear systems [6], if the matrix $A + B$ is asymptotic steady, then at arbitrary positive defined matrix C the matrix H with elements (2.7) also will be positively defined.

Theorem 2.1. Let parameters c_1, c_2 satisfy to conditions (2.4), and parameters c_{11}, c_{12}, c_{22} , to an inequality (2.6). If the inequality is true

$$\begin{aligned} (c_{11} + c_{22}) + \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2} > \\ > 4\omega^2 \sqrt{h_{11}^2 + h_{22}^2} (1 + \sqrt{\varphi(H)}), \end{aligned} \quad (2.8)$$

than the system (2.1) is stabilized at arbitrary delay $\tau > 0$, and for its solutions the inequality will be true

$$\|z(t)\| \leq \sqrt{\varphi(H)} \|z(0)\| \exp\left\{-\frac{1}{2}\gamma^* t\right\}, \quad t > 0, \quad (2.9)$$

where

$$\|z(t)\| = \sqrt{x^2(t) + \dot{x}^2(t)},$$

$$\varphi(H) = \frac{(h_{11} + h_{22}) + \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}}{(h_{11} + h_{22}) - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}},$$

$$\gamma^* = \frac{\gamma^{**}\theta(0)}{\gamma^{**}[(h_{11} + h_{22}) + \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}] + 2\theta(0)},$$

$$\gamma^{**} = \frac{2}{\tau} \ln \left\{ \frac{(c_{11} + c_{22}) - \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2}}{4\omega^2 \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2}} - \sqrt{\varphi(H)} \right\} \frac{1}{\sqrt{\varphi(H)}},$$

$$\theta(0) = \frac{1}{2} \left[(c_{11} + c_{22}) - \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2} \right] - 2\omega^2 \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2} (1 + \sqrt{\varphi(H)}), \quad (2.10)$$

coefficients h_{11} , h_{12} , h_{22} are defined by dependences (2.7).

Proof. For statement obtain we will take advantage of results of the theorem 1.1. We will check up the execution of conditions (1.8) It is possible to calculate that

$$HB = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\omega^2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\omega^2 h_{12} & 0 \\ -\omega^2 h_{22} & 0 \end{bmatrix},$$

$$|HB| = \sqrt{\lambda_{\max}[(HB)(HB)^T]} = \omega^2 \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2},$$

$$\lambda_{\max}(H) = \frac{1}{2} \left[(h_{11} + h_{22}) + \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2} \right],$$

$$\lambda_{\min}(H) = \frac{1}{2} \left[(h_{11} + h_{22}) - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2} \right],$$

Stabilization is oscillating

$$\lambda_{\min}(C) = \frac{1}{2} \left[(c_{11} + c_{22}) - \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2} \right].$$

If it is possible to take stabilizing control in a form $u^*(t) = -c_1 x(t) - c_2 x'(t)$ with the coefficients, satisfying to conditions (2.6) then the estimation of convergence of solutions looks like (2.9) with coefficients defined in (2.10).

Remark 2.1. We will consider a special case when the matrix C has a diagonal view, i.e. $C = \text{diag}\{c, c\}$. Then the solution of the Lyapunov's matrix equation will be the matrix H with elements

$$h_{11} = \frac{c}{2(c_1 + \omega^2)} \frac{(c_1 + \omega^2)(1 + c_1 + \omega^2) + c_2^2}{c_2},$$

$$h_{12} = \frac{c}{2(c_1 + \omega^2)}, \quad h_{22} = \frac{c}{2(c_1 + \omega^2)} \frac{1 + c_1 + \omega^2}{c_2}.$$

If to put $c = 2(c_1 + \omega^2)$, then received

$$h_{11} = \frac{(c_1 + \omega^2)(1 + c_1 + \omega^2) + c_2^2}{c_2}, \quad h_{12} = 1,$$

$$h_{22} = \frac{1 + c_1 + \omega^2}{c_2},$$

$$|HB| = \omega^2 \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2} = \omega^2 \sqrt{1 + \left(\frac{1 + c_1 + \omega^2}{c_2} \right)^2},$$

$$\lambda_{\min}(C) = 2(c_1 + \omega^2),$$

$$\lambda_{\max}(H) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{c_2} \left[(c_1 + \omega^2 + 1)^2 + c_2^2 \right] + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{1}{c_2^2} \left[(c_1 + \omega^2 + 1)(c_1 + \omega^2 - 1) + c_2^2 \right]^2 + 4} \right\},$$

$$\lambda_{\min}(H) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{c_2} \left[(c_1 + \omega^2 + 1)^2 + c_2^2 \right] - \right.$$

$$\left. - \sqrt{\frac{1}{c_2^2} \left[(c_1 + \omega^2 + 1)(c_1 + \omega^2 - 1) + c_2^2 \right]^2 + 4} \right\},$$

$$\varphi(H) = \frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}.$$

And conditions of stabilization have more simple form

$$c_1 > \omega^2 \left\{ \sqrt{1 + \left(\frac{1 + c_1 + \omega^2}{c_2} \right)^2} (1 + \sqrt{\varphi(H)}) - 1 \right\}. \quad (2.11)$$

it is easy to see that for stabilization of coefficients of oscillation ω^2 should be small enough.

3.1. Stabilization of oscillatory system by control with delay

Again we will consider a problem of stabilization of the equation of the second order (2.1)

This time stabilizing control we will search in the form of a linear feedback from current co-ordinate and its speed during the previous moment of time, i.e. in a form.

$$u(t) = -c_1 x(t - \tau) - c_2 \dot{x}(t - \tau).$$

Definition 3.1. The equation (2.1) is called as stabilized in a class of linear functions with delay if

there will be a control $u^*(t) = -c_1 x(t-\tau) - c_2 \dot{x}(t-\tau)$,
at which the equation

$$\ddot{x}(t) + c_2 \dot{x}(t-\tau) + (c_1 + \omega^2)x(t-\tau) = 0 \quad (3.1)$$

will be asymptotic stable. We will rewrite the equation of the second order (3.1) in the form of system of the differential equations of the first order

$$\dot{x}(t) = y(t), \quad \dot{y}(t) = -(c_1 + \omega^2)x(t-\tau) - c_2 y(t-\tau).$$

Or in a form

$$\dot{z}(t) = Az(t) + Bz(t-\tau), \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -(c_1 + \omega^2) & -c_2 \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

matrix $A+B$ has the same form

$$A+B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -(c_1 + \omega^2) & -c_2 \end{bmatrix}.$$

A condition of asymptotic stability of a matrix $A+B$ is an execution of inequalities (2.4) Let C – some positive defined matrix, and H – a matrix which is the solution of the matrix equation of Lyapunov (2.5). The matrix H with elements from (2.7) will be its solution.

Theorem 3.1. Let parameters c_1, c_2 satisfy to conditions (2.4), and parameters c_{11}, c_{12}, c_{22} , to an inequality (2.6). If the inequality is carried out

$$(c_{11} + c_{22}) + \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2} >$$

$$> 4\sqrt{(c_1 + \omega^2)^2 + c_2^2} \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2} (1 + \sqrt{\varphi(H)}), \quad (3.3)$$

than the system (2.1) is stabilized at arbitrary delay $\tau > 0$, and for its solution the inequality will be true

$$\|z(t)\| \leq \sqrt{\varphi(H)} \|z(0)\| \exp\left\{-\frac{1}{2}\gamma^* t\right\}, \quad t > 0, \quad (3.4)$$

where

$$\|z(t)\| = \sqrt{x^2(t) + \left(\dot{x}(t)\right)^2},$$

$$\varphi(H) = \frac{(h_{11} + h_{22}) + \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}}{(h_{11} + h_{22}) - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}},$$

$$\gamma^* = \frac{\gamma^{**}\theta(0)}{\gamma^{**}\left[(h_{11} + h_{22}) + \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}\right] + \theta(0)},$$

$$\gamma^{**} = \frac{2}{\tau} \ln \left\{ \frac{(c_{11} + c_{22}) - \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2}}{4\omega^2 \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2} \sqrt{\varphi(H)}} - \frac{\sqrt{(c_1 + \omega^2)^2 + c_2^2}}{\omega^2 \sqrt{\varphi(H)}} \right\},$$

$$\theta(0) = \frac{1}{2} \left[(c_{11} + c_{22}) - \sqrt{(c_{11} - c_{22})^2 + 4c_{12}^2} \right] -$$

$$- 2\sqrt{(c_1 + \omega^2)^2 + c_2^2} \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2} (1 + \sqrt{\varphi(H)}) \quad (3.5)$$

coefficients h_{11}, h_{12}, h_{22} are defined by dependences (2.7).

Proof. Unlike the previous section, the matrix B , defining delay co-ordinates, looks like

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -(c_1 + \omega^2) & -c_2 \end{bmatrix}.$$

In this case

$$HB = \begin{bmatrix} -h_{12}(c_1 + \omega^2) & -h_{12}c_2 \\ -h_{22}(c_1 + \omega^2) & -h_{22}c_2 \end{bmatrix},$$

$$|HB| = \sqrt{(c_1 + \omega^2)^2 + c_2^2} \sqrt{h_{12}^2 + h_{22}^2}.$$

And conditions of stabilization look like (3.3).

The list of the used literature

1. Razumikhin B.S. Stability hereditary systems. M: Science, 1988.- 112 p.(in Russian)
2. Krasovsky N.N. Some of the problems of the theory of stability of movement.- M, Fizmatgiz, 1959.-212 p. (in Russian)
3. Elsgolts L.E., Norkin S.B. Introduction in the theory of the differential equations with deviating argument.- M, Science, 1971.- 296 p. (in Russian)
4. Jack K. Hale. The theory of functionally differential equations.- M: World, 1984.- 421 p. (in Russian)
5. Khusainov D.Ya., Shatyko A.V. Method of Lyapunov functions at research of stability of functional differential systems.- Kiev, Kiev university, 1977.- 236 p. (in Russian)
6. Gantmaher F.R. The theory of matrixes.- M: Science, 1967.- 575 p. (in Russian).

УДК 517.929

B. Puza, Assoc. Prof. RNDr., CSc,
O.I.Kuzmych, Assoc. Prof., PhD,
D.Ya. Khusainov, Prof. DSc.

Estimation of solution of the system with
switching consisting of nonlinear regulation
equations

We consider the system with time switching described by a set of nonlinear equations with nonlinearity of sector view. This is special case of the hybrid dynamical systems. Using Lyapunov function method we obtain the estimation of solutions in the ending moment of time. The subsystems can be stable and unstable.

Keywords: nonlinear differential equation, estimation of solution, system with switching.

Presented by Prof. DSc. Garaschenko F.G.

E-mail: puza@math.muni.cz, lenamaks79@mail.ru, dkh@unicyb.kiev.ua

Introduction

Many processes in the complex systems of automatic programmatic control, are related with stability condition. As a rule a control function is a function of one variable, is presented by linear combination of phase variables. It has a given view of curve, being in the first and third fourths of coordinate plane. Stability of the regulation system, with the function of control, being in the given sector, was named absolute stability. The first works, related to the concept of absolute stability, are published in [1-2]. Researching of absolute stability problems leads in two directions. First of them, so-called «frequency method», got development in [3-4]. The second direction with using of Lyapunov function method, being the universal method of research of the nonlinear dynamic systems presented in works [5-7].

We note that real technical systems, functioning with the same modes of dynamics takes a place rarely. As a rule, there are several modes of functioning and transition from one mode to other occurs under reaching definite conditions. Such system in most general case, was named «hybrid system» [8]. Such linear hybrid systems with time switching were researched in [9].

©B. Puza, O.I.Kuzmych, D.Ya. Khusainov, 2010

Б. Пужа, к.ф.-м.н.,
О.І. Кузьмич, к.ф.-м.н.,
Д.Я. Хусаїнов, д.ф.-м.н., проф.

Оцінка розв'язків систем із перемиканнями,
що складена із нелінійних рівнянь
регулювання

Розглядається система з перемиканнями, кожна з яких описується нелінійним диференціальним рівнянням з не лінійністю секторного вигляду. За допомогою методу функцій Ляпунова отримана оцінка розв'язків в кінцевий момент часу. Припускається, що системи можуть бути як стійкими, так і нестійкими.

Ключові слова: нелінійні диференціальні рівняння, оцінка розв'язку, система з перемиканнями.

The special case of the hybrid systems be the nonlinear regulating systems with time switching. In this paper the system with time switching which described by nonlinear regulating subsystems are considered. Using the estimations for separate subsystems, obtained using the method of Lyapunov functions, and using the condition of continuity of solution in the points of switching, we obtain the estimation of the hybrid system solution at the final moment [9]. The estimations of solution are obtained using the Lyapunov function of Lurje-Postnikov type [1,2]. Final estimation we obtain by composition of perturbations for the separate subsystems.

1. The estimation of solution if the condition of asymptotic stability be hold.

We consider scalar differential equation, describing by nonlinear regular system

$$\dot{x} = -ax + bf(\sigma(x)), \quad \sigma(x) = cx, \quad (1.1)$$

where $a > 0$, b , c are constant values, $f(\sigma)$ – continuous function, satisfied to the condition of Lipschitz and to the so-called «condition of sector»

$$f(\sigma)[k\sigma - f(\sigma)] > 0, \quad k > 0. \quad (1.2)$$

For research of the regular system (1.1) we use the function of Lyapunov

$$V(x) = x^2 + \beta \int_0^{\sigma(x)} f(s) ds, \quad \sigma(x) = cx, \quad \beta > 0. \quad (1.3)$$

We denote

$$S_1[\beta, \nu] = \begin{bmatrix} 2a & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c & \frac{\nu}{k} - \beta bc \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

Theorem 1.1. Let there are values $\beta > 0$ and $\nu > 0$, such that

$$2a\left(\frac{\nu}{k} - \beta bc\right) - \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c\right]^2 > 0. \quad (1.5)$$

holds. Then the system (1) is absolutely stable and for its solution $x(t)$ holds the exponential estimation of solution

$$|x(t)| \leq \sqrt{\varphi(\beta)} |x(0)| e^{-\varsigma_1(\beta, \nu)(t-t_0)}, \quad (1.6)$$

$$\varphi(\beta) = 1 + \frac{1}{2}\beta kc^2, \quad \varsigma_1(\beta, \nu) = \frac{\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2},$$

$$\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu]) = \frac{1}{2} \left\{ \left(2a + \frac{\nu}{k} - \beta bc \right) - \sqrt{\left(2a - \frac{\nu}{k} + \beta bc \right)^2 + 4 \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \right]^2} \right\}. \quad (1.7)$$

Proof. Function (1.3) satisfies next bilateral estimations

$$x^2(t) \leq V(x(t)) \leq \left[1 + \frac{1}{2}\beta kc^2 \right] x^2(t). \quad (1.8)$$

We calculate the complete derivate of Lyapunov function (1.3) along solution of equation (1.1):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(x(t)) &= 2x(t) [-ax(t) + bf(\sigma(t))] + \\ &+ \beta f(\sigma(t))c [-ax(t) + bf(\sigma(t))] \\ &\quad \sigma(t) = cx(t). \end{aligned}$$

We rewrite the last expression as a quadratic form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(x(t)) &= (x(t), f(\sigma(t))) \times \\ &\times \begin{bmatrix} -2a & b - \frac{1}{2}\beta ac \\ b - \frac{1}{2}\beta ac & \beta bc \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Taking into account $\sigma(t) = cx(t)$ and using S -procedure, for arbitrary $\nu > 0$ we get

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(x(t)) &= -(x(t), f(\sigma(t))) \times \\ &\times \begin{bmatrix} 2a & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c & \frac{\nu}{k} - \beta bc \end{bmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} x(t) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} - \nu f(\sigma(t)) \left[\sigma(t) - \frac{1}{k} f(\sigma(t)) \right]. \end{aligned}$$

Let parameters $\beta > 0$, $\nu > 0$ such that matrix $S_1[\beta, \nu]$ positively definite. As follows from the criterion of Silvester, it is necessary and sufficiently, that inequalities

$$a > 0, \quad 2a\left(\frac{\nu}{k} - \beta bc\right) - \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c\right]^2 > 0$$

be hold.

Then, taking into account the condition of the Theorem 1 about finding of function $f(\sigma)$ in the sector, for the estimation of complete derivate we get the inequality

$$\frac{d}{dt} V(x(t)) \leq -\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu]) x^2(t), \quad (1.9)$$

where

$$\begin{aligned} \lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu]) &= \frac{1}{2} \left\{ \left(2a + \frac{\nu}{k} - \beta bc \right) - \right. \\ &\left. - \sqrt{\left(2a - \frac{\nu}{k} + \beta bc \right)^2 + 4 \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \right]^2} \right\}. \quad (1.10) \end{aligned}$$

We rewrite the right part of bilateral inequalities (1.8) in the form

$$-x^2(t) \leq -\frac{1}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} V(x(t))$$

and we substitute it in the inequality (1.9). We get

$$\frac{d}{dt} V(x(t)) \leq -\frac{\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} V(x(t)).$$

Solving the obtained differential inequality, we get

$$V(x(t)) \leq V(x(t_0)) \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} (t - t_0) \right\}.$$

Again we use the bilateral inequalities (1.8) of Lyapunov function

$$\begin{aligned} x^2(t) \leq V(x(t)) \leq V(x(t_0)) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} (t - t_0) \right\} \leq \\ \leq \left[1 + \frac{1}{2}\beta kc^2 \right] x^2(t_0) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} (t - t_0) \right\}. \end{aligned}$$

We get

$$\begin{aligned} |x(t)| \leq \sqrt{\varphi(\beta)} |x(0)| e^{-\varsigma_1(\beta, \nu)(t-t_0)}, \\ \varphi(\beta) = 1 + \frac{1}{2}\beta kc^2, \quad \varsigma_1(\beta, \nu) = \frac{\lambda_{\min}(S_1[\beta, \nu])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2}. \end{aligned}$$

Transforming the characteristic equation

$$\begin{aligned} \det\{S_1(\beta, \nu) - \lambda I\} = \\ = \begin{vmatrix} 2a - \lambda & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c & \frac{\nu}{k} - \beta bc - \lambda \end{vmatrix} = 0 \end{aligned}$$

we find the minimum eigenvalue of matrix $S_1(\beta, \nu)$, i.e. we had defined the expressions (1.6), (1.7).

Remark 1.1. In formula (1.6) which determining the terms of absolute stability, we have the values $\beta > 0$ and $\nu > 0$. It can be calculated the values $\beta_0 > 0$ and $\nu_0 > 0$, which inequality (1.6) is «maximally» executed. We denote

$$\Phi(\beta, \nu) = 2a \left(\frac{\nu}{k} - \beta bc \right) - \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \right]^2. \quad (1.11)$$

The problem of finding of optimal values $\beta_0 > 0$ and $\nu_0 > 0$ leads to the problem of conditional extremum of function depending of two variables with restriction conditions in the first quadrant of the coordinate plane.

2. Estimation of solution if the terms of absolute stability be not hold.

Let it can not be to find (or does not exist) such values $\beta > 0$, $\nu > 0$, such that matrix $S_1[\beta, \nu]$ also be positively definite. In this case we use the Lyapunov function with exponential multiplier

$$V(x, t) = e^{\gamma t} \left\{ x^2(t) + \beta \int_0^{\sigma(x)} f(s) ds \right\}, \quad \beta > 0. \quad (2.1)$$

We denote

$$S_2[\beta, \nu, \gamma] = \begin{bmatrix} 2a - \gamma & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c & \frac{\nu}{k} - \beta bc \end{bmatrix}.$$

Theorem 2.1. Let there are not parameters $\beta > 0$ and $\nu > 0$ (or not found) such that matrix $S_1[\beta, \nu]$ also positively definite. If values $\beta > 0$ and $\gamma < 0$ satisfy terms

$$\begin{aligned} 1) \quad 0 < \beta < \frac{\nu}{kbc}, \text{ if } bc > 0 \\ \text{and } \beta > 0 - \text{arbitrary, if } bc \leq 0; \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$2) \quad \gamma < 2a - \frac{\left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \right]^2}{\frac{\nu}{k} - \beta bc} \quad (2.3)$$

then for solutions $x(t)$ of the systems (1.1) the exponential estimation of solution

$$|x(t)| \leq \sqrt{\varphi(\beta)} |x(0)| e^{-\varsigma_2(\beta, \nu, \gamma)(t-t_0)} \quad (2.4)$$

holds where

$$\begin{aligned} \varphi(\beta) = 1 + \frac{1}{2}\beta kc^2, \quad \varsigma_2(\beta, \nu) = \frac{\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} + \gamma, \\ \lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma]) = \frac{1}{2} \left\{ \left(2a - \gamma + \frac{\nu}{k} - \beta bc \right) - \right. \\ \left. - \sqrt{\left(2a - \gamma + \frac{\nu}{k} - \beta bc \right)^2 + 4 \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \right]^2} \right\}. \end{aligned}$$

Proof. The function (2.1) satisfies

$$e^{\gamma t} x^2(t) \leq V(x(t), t) \leq e^{\gamma t} \left[1 + \frac{1}{2}\beta kc^2 \right] x^2(t). \quad (2.3)$$

We calculate the complete derivate of this function along solution of the system (1.1). It has a form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} V(x(t), t) = -e^{\gamma t} (x(t), f(\sigma(t))) \times \\ \begin{bmatrix} 2a & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)c & \frac{\nu}{k} - \beta bc \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} - \end{aligned}$$

$$-e^{\eta} \varphi(\sigma(t)) \left[\sigma(t) - \frac{1}{k} f(\sigma(t)) \right] + \\ + \gamma e^{\eta} \left\{ x^2(t) + \beta \int_0^{\sigma(x)} f(s) ds \right\}.$$

Or, taking into account the "sector condition", we rewrite the expression in the form

$$\frac{d}{dt} V(x(t), t) = -e^{\eta} (x(t), f(\sigma(t))) \times \\ \times \begin{bmatrix} 2a - \gamma & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)k \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)k & \frac{\nu}{k} - \beta bc \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ f(\sigma(t)) \end{pmatrix} + \\ + \gamma \beta e^{\eta} \int_0^{\sigma(x)} f(s) ds.$$

According to the condition of the Theorem 2, matrix $S_1[\beta, \nu]$ is not positive definite. Therefore matrix $S_2[\beta, \nu, \gamma]$ at $\gamma > 0$, the more so there are not be positively definite. We find values $\beta > 0$, $\gamma < 0$, such that $S_2[\beta, \nu, \gamma]$ be positively definite matrix. The criterion of Silvester gives us the next conditions

$$\frac{\nu}{k} - \beta bc > 0, \quad 2a - \gamma > 0, \\ (2a - \gamma) \left(\frac{\nu}{k} - \beta bc \right) - \left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)k \right]^2 > 0.$$

From here we get the following:

- 1) the first inequality leads to the condition: $\gamma < 2a$;
- 2) the second inequality leads to the condition: $0 < \beta < \frac{\nu}{kbc}$, if $bc > 0$ and $\beta > 0$ - arbitrary, if $bc \leq 0$;
- 3) the third inequality leads to the condition:

$$\gamma < 2a - \frac{\left[b - \frac{1}{2}(\beta a - \nu)k \right]^2}{\frac{\nu}{k} - \beta bc}.$$

Therefore at implementation of terms (2.2), (2.3) of the Theorems 2.1 we get inequality

$$\frac{d}{dt} V(x(t), t) = -e^{\eta} \lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma]) x^2(t) + \\ + \gamma \beta e^{\eta} \int_0^{\sigma(x)} f(s) ds.$$

And, taking into account that $\beta > 0$, $\gamma < 0$ we get

$$\frac{d}{dt} V(x(t), t) = -e^{\eta} \lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma]) x^2(t). \quad (2.4)$$

We rewrite the right part of inequality of quadratic forms as follows

$$-e^{\eta} x^2(t) \leq -\frac{1}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} V(x(t), t)$$

and we put it into (2.4). We get

$$\frac{d}{dt} V(x(t), t) = -\frac{\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} V(x(t), t).$$

We integrate the last differential inequality

$$V(x(t), t) \leq V(x(t_0), t_0) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} (t - t_0) \right\}.$$

And again using the bilateral inequalities for the function of Lyapunov we get

$$e^{\eta} x^2(t) \leq V(x(t), t) \leq V(x(t_0), t_0) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} (t - t_0) \right\} \leq \\ \leq \left[1 + \frac{1}{2}\beta kc^2 \right] e^{\eta_0} x^2(t_0) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} (t - t_0) \right\}.$$

And from it we obtain

$$|x(t)| \leq |x(t_0)| \sqrt{\varphi(\beta)} e^{\frac{1}{2}\varsigma_2(\beta, \nu, \gamma)(t-t_0)}, \quad (2.5)$$

where

$$\varsigma_2(\beta, \nu, \gamma) = \frac{\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma])}{1 + \frac{1}{2}\beta kc^2} + \gamma,$$

and $\varphi(\beta)$ is definite in (1.7).

We calculate the value $\varsigma_2(\beta, \nu, \gamma)$. Exposing characteristic equation

$$\det\{S_2[\beta, \nu, \gamma] - \lambda I\} = \\ = \begin{vmatrix} 2a - \gamma - \lambda & -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)k \\ -b + \frac{1}{2}(\beta a - \nu)k & \frac{\nu}{k} - \beta bc - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

we get

$$\lambda_{\min}(S_2[\beta, \nu, \gamma]) = \frac{1}{2} \left(\left(2a - \gamma + \frac{\nu}{k} - \beta bc \right) - \right.$$

$$= \sqrt{\left(2a - \gamma + \frac{v}{k} - \beta bc\right)^2 + 4\left(b - \frac{1}{2}(\beta a - v)c\right)^2}.$$

3. Estimation of dynamics of the hybrid system consisting of nonlinear regulation equations.

We research the hybrid dynamic system, which consists of nonlinear regulation subsystems function on the fixed intervals $T_i = [t_{i-1}, t_i]$, $i = \overline{1, N}$ described by the systems of nonlinear differential equations

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -a_i x(t) + b_i f_i(\sigma_i(t)), \\ \sigma_i(t) &= c_i^T x(t), \quad t \geq 0. \end{aligned} \quad (3.1)$$

where $x(t) \in R^1$, $a_i, b_i, c_i \in R^n$, $f_i(\sigma)$ – continuous functions, satisfied to the condition of Lipschitz and to so-called «condition of sector» (1.2).

We calculate the estimate of solution in the moment of time $t = t_N$.

We denote

$$\theta_i(\beta_i, v_i, \gamma_i) = \begin{cases} \zeta_{1,i}(\beta_i, v_i), & \text{if there exist } \beta_i, v_i, \gamma_i : S_i[\beta_i, v_i] \\ & \text{positive definite,} \\ \zeta_{2,i}(\beta_i, v_i, \gamma_i), & \text{if there aren't exist } \beta_i, v_i, \gamma_i : S_i[\beta_i, v_i] \\ & \text{positive definite.} \end{cases} \quad (3.2)$$

Theorem 3.1. For the final state of the hybrid system (3.1) in the moment $t = t_N$ the estimation

$$\begin{aligned} |x(t_N)| &\leq |x(t_0)| \times \\ &\times \prod_{i=1}^N \sqrt{\varphi_i(\beta_i)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \theta_i(\beta_i, v_i, \gamma_i)(t_i - t_{i-1})\right\} \end{aligned} \quad (3.3)$$

holds.

Proof. We consider the first time interval $t_0 \leq t \leq t_1$. If there are values β_1, v_1 , such that matrix $S_1[\beta_1, v_1]$ positively definite, in the moment of time $t = t_1$ we have the estimation

$$|x(t)| \leq \sqrt{\varphi_1(\beta_1)} |x(0)| e^{-\theta_1(\beta_1, v_1, \gamma_1)(t-t_0)}.$$

If such values do not exist, always will exist β_1, v_1 and γ_1 , such that at $t = t_1$ the estimates

$$|x(t)| \leq \sqrt{\varphi_1(\beta_1)} |x(0)| e^{-\zeta_{2,1}(\beta_1, v_1, \gamma_1)(t-t_0)}$$

holds. Taking into account the denotations (3.2), we get, that in the moment $t = t_1$

$$|x(t_1)| \leq \sqrt{\varphi_1(\beta_1)} |x(0)| e^{-\theta_1(\beta_1, v_1, \gamma_1)(t_1-t_0)}, \quad (3.4)$$

holds.

We consider the second time interval $t_1 \leq t \leq t_2$. Repeating the analogical reasoning, we get

$$|x(t_2)| \leq \sqrt{\varphi_2(\beta_2)} |x(t_1)| e^{-\theta_2(\beta_2, v_2, \gamma_2)(t_2-t_1)}$$

for the time moment $t = t_2$.

And taking into account inequality (3.4), we write down

$$\begin{aligned} |x(t_2)| &\leq \sqrt{\varphi_2(\beta_2)} \sqrt{\varphi_1(\beta_1)} \times \\ &\times |x(t_0)| e^{-\theta_2(\beta_2, v_2, \gamma_2)(t_2-t_1)} e^{-\theta_1(\beta_1, v_1, \gamma_1)(t_1-t_0)}. \end{aligned}$$

Repeating a process farther, we obtain the formula (3.3).

List of references

1. Lur'e A.I. Some nonlinear tasks of theory of automatic control. – M.-Jl. Gostekhizdat, 1951. – 251 p.
2. Ayzerman M.A., Gantmakher F.R. Absolute stability of regulation systems. – M., Izd.AN USSR, 1963. – 261 p.
3. Gel'fand A.Kh., Leonov G.A., Yakubovich V.A. Stability of the nonlinear systems with ununique state of equilibrium. – M., Nauka, 1978. – 400 p.
4. Nonlinear systems. Frequency and matrix inequalities // Under A.Kh.Gelig, G.A.Leonov, A.L.Fradkov – M.: Fizmatlit, 2008. – 608 p.
5. Barbashin E.A. Method of Lyapunov functions. – M., Nauka, 1970. – 240 p.
6. Martynyuk A.A. Stability of motion of complex systems. – Kiev, Naukova dumka, 1975. – 352p.
7. Korenevs'kiy D.G. Stability of the dynamic systems at casual perturbations of parameters. Algebraic criteria. – Kiev, Naukova dumka, Institute of mathematics of URSR, 1989. – 208 p.
8. Branicky Michael S. Stability of Switched and Hybrid Systems. In: Proc. 3-rd IEEE CDC, 1994, pp.3498-3503.
9. Khusainov D.Ya., Kuzmych O.I. Estimations of stability of logic-dynamical systems with time switchings // Bulletin of University of Kyiv, Series: Physics & Mathematics – 2005. – №1. – p. 230-237.

Acted to the editorial board 12.06.10

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

UNITED STATES OF AMERICA

DEPARTMENT OF THE INTERIOR

LAND OFFICE

WASHINGTON, D. C.

УДК 539.3

Володимир О. Андрущенко, пров. інженер,
Олександр В. Борисейко, к.ф.-м.н., доцент,
Дарина С. Немченко, магістр,
Ігор А. Улітко, к.ф.-м.н

Експериментальне вивчення ефективності перетворення енергії на резонансних коливаннях п'єзокерамічного стержня з розрізними електродами при керованому електричному збудженні.

Розглянуто задачу про поздовжні коливання п'єзокерамічного стержня з товщиною поляризацією. Визначені оптимальні конфігурації електродного покриття для підвищення та пониження ефективності перетворення енергії на резонансних частотах коливань. Отримані експериментальні дані гарно узгоджуються з теоретичними результатами.

Ключові слова: п'єзокерамічний стержень, КЕМЗ, керований підвід енергії.

V.O. Andruschenko, Leading Engineer,
Olexandr V. Boriseiko, Cand.Sci. (Phys.-Math.),
Associate Professor
Daryna S. Nemchenko, MSc. Student
Igor A. Ulitko, Cand.Sci. (Phys.-Math.)

Experimental study of the energy conversion efficiency at the resonance vibrations of piezoceramic rod with sectioned electrodes under controlled electrical excitation.

Longitudinal vibrations of the piezoceramic rod with the thickness remanent polarization have been studied. Optimum configuration of the surface electrodes has been determined for the both raising and lowering of energy conversion at the resonance frequencies. Experimental data obtained are in good coincidence with theoretical results.

Key Word: piezoceramic rod, EMCF, controlled energy supply.

*E-mail: andron@univ.kiev.ua, b123@voliacable.com, dasha_nemchenko@meta.ua, ulitko@univ.kiev.ua
Статтю представив проф. Мелешко В.В.

1. Вступ

Досягнення оптимальних характеристик п'єзокерамічних перетворювачів на резонансних коливаннях є важливою задачею в багатьох пристроях сучасної ультразвукової техніки, в актуаторах та сенсорах різноманітного технічного призначення [1]. Наприклад, коли для п'єзоперетворювача заданої геометричної форми і розмірів за технічними вимогами слід проводити збудження коливань на вищих частотах певного резонансного спектру, виявляється, що очікуваний рівень перетворення енергії п'єзоелемента з суцільним електродним покриттям бічних граней є незадовільно низьким. Також неможливо здійснювати пригнічення тих чи інших небажаних частот даного спектру. Вирішення цих задач досягається за рахунок керованого підводу електричного навантаження до п'єзоелемента шляхом розділення його електродного покриття на окремі частини вузькими діелектричними прошарками, або ж неелектродованими скінченими ділянками поверхні [2,3]. При цьому, окремі частини електродного покриття навантажуються зовнішнім електричним полем у протифазі до інших, або ж не навантажуються взагалі. Такі неоднорідні електричні граничні умови на поверхні п'єзокерамічного тіла відображаються на зміні напружено-

деформівного стану всередині його об'єму. Тому практично важливими є повні дані про переміщення, напруження, електричне зміщення та струм, оскільки на їх основі проводиться визначення динамічних КЕМЗ на вибраній резонансній частоті.

Постановка задачі.

Як приклад ми розглядаємо елементарну задачу про поздовжні коливання п'єзокерамічного стержня, маючи на меті знайти таку конфігурацію поверхневих електродів, при якій неможливим стає збудження коливань на першій резонансній частоті.

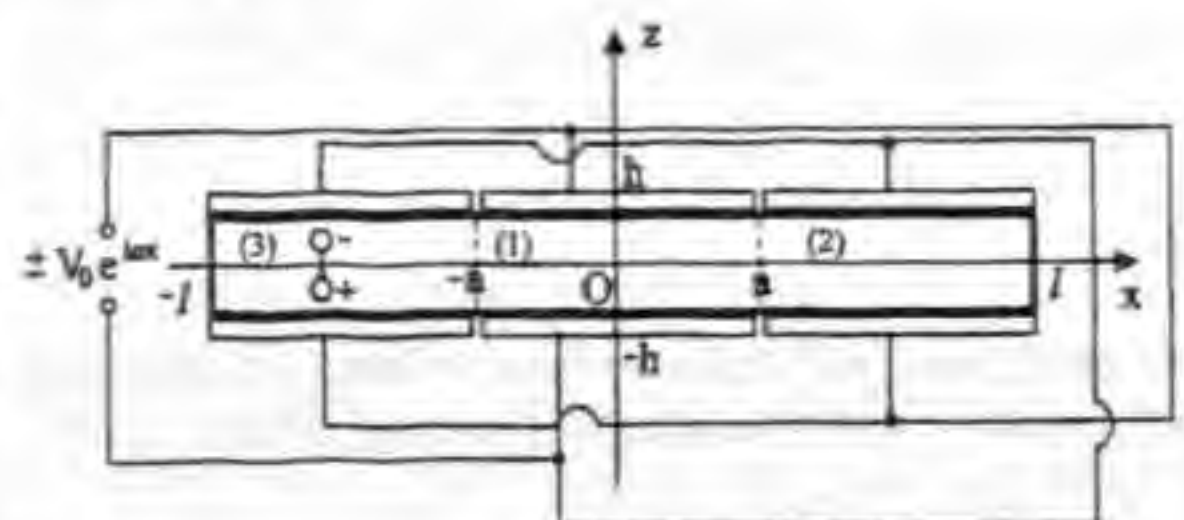


Рис.1. Схема підводу електричного навантаження для протифазного збудження коливань стержня з розрізними електродами.

П'єзокерамічний стержень має довжину $2l$ і поперечний переріз $2b \times 2h$, причому $b \ll l$, $h \ll l$. Електродовані бічні поверхні $z = \pm h$ розділені симетричними відносно площини $x = 0$ й достатньо вузькими діелектричними розрізами в точках $x = \pm a$. Стержень має товщину поперекню поляризацію у напрямку осі Oz . Коливання збуджуються гармонічною в часі різницею потенціалів $\psi^+ - \psi^- = 2V_0 e^{i\omega t}$, підведеною до електродів в області (1), та протилежною за фазою різницею потенціалів $\psi^+ - \psi^- = -2V_0 e^{i\omega t}$ в областях (2) та (3), як це показано на рис. 1. Під дією такого розподіленого електричного навантаження, згідно з розв'язками елементарних задач електропружності для прямокутника [4], в стержні реалізується стан однорідної планарної деформації. Згідно з гіпотезою плоских перерізів, частинки стержня взагалі здійснюватимуть одновимірний коливальний рух. Тому пружні переміщення стержня визначатимуться лише однією ненульовою компонентою $u_x(x, t)$. Тоді рівняння п'єзоефекту, співвідношення Коші, рівняння вимушеної електростатики та рівняння динаміки Ньютона матимуть такий простий вигляд

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= s_{11}^E \sigma_x + d_{31} E_z, & D_z &= \varepsilon_{33}^T E_z + d_{31} \sigma_x, \\ \varepsilon_x &= \frac{\partial u_x}{\partial x}, & \frac{\partial D_z}{\partial z} &= 0, & E_z &= -\frac{\partial \psi}{\partial z}, \\ \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} &= \rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

Тут позначено: s_{11}^E – пружна податливість, d_{31} – п'єзомодуль, ε_{33}^T – діелектрична проникливість, ρ – густина матеріалу п'єзокераміки.

Механічні граничні умови на кінцях стержня, а також умови неперервності переміщень і напружень на границях розділу областей формуються так

$$\sigma_x|_{x=\pm l} = 0, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)} &= \sigma_x^{(2)}, & u_x^{(1)} &= u_x^{(2)} & \text{при } x=a & \text{ та} \\ \sigma_x^{(1)} &= \sigma_x^{(3)}, & u_x^{(1)} &= u_x^{(3)} & \text{при } x=-a. \end{aligned} \quad (3)$$

Протифазність підведеної різниці потенціалів на розрізних електродах в областях $|x| < a$ та $a < |x| < l$ призводить до відмінності компонентів напруженості електричного поля. З рівнянь вимушеної електростатики (1), знаходимо

$$\begin{aligned} E_z^{(1)} &= E_0 e^{i\omega t} & \text{при } |x| < a \\ E_z^{(2)} &= E_z^{(3)} = -E_0 e^{i\omega t} & \text{при } a < |x| < l, \end{aligned} \quad (4)$$

де $E_0 = -V_0/h$.

Перетворюючи послідовно систему рівнянь електропружності (1) на основі рівняння Ньютона, для визначення переміщень $u_x(x, t)$ отримаємо звичайне хвильове рівняння

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2},$$

де $c = \frac{1}{\sqrt{\rho s_{11}^E}}$ – швидкість розповсюдження позовдовжніх акустичних хвиль у стержні.

2. Побудова розв'язку задачі.

У відповідності з електричними граничними умовами (4) для i -ї ($i=1, 2, 3$) області стержня у випадку гармонічних коливань з частотою ω покладемо

$$\begin{aligned} u_x^{(i)}(x, t) &= \hat{u}^{(i)}(x) e^{i\omega t}, & \varepsilon_x^{(i)}(x, t) &= \hat{\varepsilon}^{(i)}(x) e^{i\omega t}, \\ \sigma_x^{(i)}(x, t) &= \hat{\sigma}^{(i)}(x) e^{i\omega t}, & D_z^{(i)}(x, t) &= \hat{D}_z^{(i)}(x) e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Амплітуди переміщень, осьових деформацій і напружень, враховуючи (4), запишуться наступним чином

$$\begin{aligned} \hat{u}^{(i)} &= A_i \cos \lambda x + B_i \sin \lambda x, \\ \hat{\varepsilon}^{(i)} &= \lambda (-A_i \sin \lambda x + B_i \cos \lambda x), \\ \hat{\sigma}^{(i)} &= \frac{1}{s_{11}^E} (\hat{\varepsilon}^{(i)} \mp d_{31} E_0) = \\ &= \frac{1}{s_{11}^E} (-\lambda A_i \sin \lambda x + \lambda B_i \cos \lambda x \mp d_{31} E_0), \end{aligned} \quad (5)$$

($i=1, 2, 3$; $\lambda = \frac{\omega}{c}$).

Тут верхній знак відповідає області $|x| < a$, нижній – іншим двом областям $a < |x| < l$.

Внаслідок симетрії задачі функція переміщень є непарною за змінною x : $u_x(-x, t) = -u_x(x, t)$. Звідси випливає, що у розв'язках (5) слід покласти $A_1 = 0$ та $A_3 = -A_2$, $B_3 = -B_2$. Сталі інтегрування B_1 , A_2 та B_2 визначаються з граничних умов (2) та перших двох умов неперервності ненульових компонентів переміщень і напружень (3) у вигляді

$$\begin{aligned} B_1 &= -\frac{1 - 2 \cos \lambda(l-a)}{\lambda \cos \lambda l} d_{31} E_0, \\ A_2 &= \frac{\sin \lambda(l+a) - \sin \lambda(l-a)}{\lambda \cos \lambda l} d_{31} E_0, \\ B_2 &= \frac{\cos \lambda(l-a) - \cos \lambda(l+a) - 1}{\lambda \cos \lambda l} d_{31} E_0 \end{aligned} \quad (6)$$

3. Пригнічення основного резонансу позовдовжніх коливань стержня.

Як і у випадку стержня з суцільними електродами, резонансні частоти визначаються нулями знаменників виразів (6), тобто резонансне рів-

няння та послідовність хвильових чисел резонансу мають вигляд

$$\cos \lambda l = 0, (\lambda l)_n = (2n-1)\pi/2, n=1, 2, \dots \quad (7)$$

Проте при визначенні антирезонансних частот слід враховувати розв'язок (5), отриманий за умов протифазного збудження коливань (4). Ідентифікуючи струм у колі генератора напруг як струм зміщення на електродованих поверхнях стержня, для відшукування рівняння антирезонансних частот використаємо відому умову [4]

$$I = -\frac{d}{dt} \iint_{S_1^+} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}) dS, \quad (7)$$

де S_1^+ – площа електродованої поверхні стержня, навантажена однойменним потенціалом ψ^+ , що включає три різні частинні області, і на якій нормальна складова компоненти вектора електричної індукції $D_z = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{D})$ зазнає зміни при переході від однієї області до іншої. Так, для області (1) амплітуда $\hat{D}_z^{(1)}$ визначається за формулою

$$\begin{aligned} \hat{D}_z^{(1)} &= \varepsilon_{33}^T E_0 + d_{31} \hat{\sigma}^{(1)} = \\ &= \varepsilon_{33}^T (1 - k_{31}^2) \left(E_0 + \frac{1}{d_{31}} \frac{k_{31}^2}{1 - k_{31}^2} \frac{d\hat{u}^{(1)}}{dx} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

а в області (2) дорівнює

$$\hat{D}_z^{(2)} = \varepsilon_{33}^T (1 - k_{31}^2) \left(-E_0 + \frac{1}{d_{31}} \frac{k_{31}^2}{1 - k_{31}^2} \frac{d\hat{u}^{(2)}}{dx} \right). \quad (9)$$

Підставляючи сюди формули для переміщень $\hat{u}^{(1)}$, $\hat{u}^{(2)}$ з розв'язку (5) і обраховуючи відповідні вирази (8) та (9) інтеграли (7), отримаємо

$$\begin{aligned} \hat{I} &= \hat{I}_1 + 2\hat{I}_2 = 2\omega V_0 C_0 \left\{ \left(3\frac{a}{l} - 2 \right) + \right. \\ &+ \frac{k_{31}^2}{1 - k_{31}^2} \frac{1}{\lambda l \cos \lambda l} \left[(2 \cos \lambda l (l - a) - 1) \sin \lambda a + \right. \\ &+ 4 \sin \lambda a \cos \lambda l (\cos \lambda l - \cos \lambda a) + \\ &\left. \left. + (4 \sin \lambda l \sin \lambda a - 2)(\sin \lambda l - \sin \lambda a) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Тут $C_0 = 2\varepsilon_{33}^T (1 - k_{31}^2) lb/h$ – електростатична ємність стержня до деформації. Прирівнюючи вираз (10) до нуля, отримаємо рівняння для розрахунку антирезонансних частот

$$\begin{aligned} \left(3\frac{a}{l} - 2 \right) \lambda l \cos \lambda l + \frac{k_{31}^2}{1 - k_{31}^2} \left[(2 \cos \lambda l (l - a) - 1) \sin \lambda a + \right. \\ + 4 \sin \lambda a \cos \lambda l (\cos \lambda l - \cos \lambda a) + \\ \left. + (4 \sin \lambda l \sin \lambda a - 2)(\sin \lambda l - \sin \lambda a) \right] = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Очевидно, що корені рівняння (11) залежать від відносних розмірів ділянок електродного покриття стержня. В тому випадку, коли відповідні їм

антирезонансні частоти ω_A співпадають з частотами резонансу ω_R , відповідну нормальну моду коливань п'єзоелемента неможливо збуджувати за допомогою електричного навантаження. Дійсно, оскільки за формулою Мезона [5,6]

$$k_d^2 = \frac{\omega_A^2 - \omega_R^2}{\omega_A^2} = \frac{(\lambda l)_A^2 - (\lambda l)_R^2}{(\lambda l)_A^2}, \quad (12)$$

то, наприклад, для резонансної та антирезонансної частот основного резонансу, для того щоб мала місце рівність $(\lambda l)_{A,1} = (\lambda l)_{R,1}$, в рівнянні (11) слід покласти $\cos \lambda l = 0$, $\sin \lambda l = 1$.

Тоді для визначення шуканого положення розрізу електродів, при якому резонансні коливання зникають, отримуємо просте тригонометричне рівняння

$$5 \sin \lambda a - 2 \sin^2 \lambda a - 2 = 0. \quad (13)$$

звідки

$$\sin \lambda a = \frac{1}{2}, \quad \frac{a}{l} = \frac{1}{3}. \quad (14)$$

Отже, для пригнічення коливань на частоті основного резонансу слід поділити електродне покриття на три рівних частини.

4. Ефективність перетворення енергії на другій резонансній частоті.

Передбачуване пригнічення коливань стержня на основному резонансі в принципі має відображатися на їх інтенсивності на вищих резонансах. Щоб перевірити це, слід розглянути значення КЕМЗ за енергетичним критерієм [4]

$$k_d^2 = \frac{U_p - U_k}{U_p} \quad (15)$$

де U_p – повна внутрішня енергія п'єзоелемента з розімкнутими електродами, а U_k – з коротко замкненими електродами. Для стержня з розрізними електродами вказані енергії слід обраховувати у кожній з трьох областей окремо. Так, повна енергія i -тої частини стержня з розімкнутими електродами розраховується за формулою

$$U_p^{(i)} = \frac{1}{2} \iiint_{V_i} (\hat{\sigma}_p^{(i)} \hat{\varepsilon}^{(i)} + \hat{D}_z^{(i)} E_p^{(i)}) dV \quad (16)$$

причому величини напруженостей поля $E_p^{(i)}$ визначаються з електричної граничної умови $\iint_{S_i^+} \hat{D}_z^{(i)} dS = 0$ на i -тій частині електродованої поверхні. Для i -тих частин стержня з коротко замкненими електродами на i -тих електродах виконуються граничні умови $\psi|_{S_i^+} - \psi|_{S_i^-} = 0$, тому

$$U_k^{(1)} = \frac{1}{2} \iiint_{V_1} \hat{\sigma}_k^{(1)} \hat{e}^{(1)} dV. \quad (17)$$

Послідовно використовуючи формули (8) і (9) для $\hat{D}_z^{(1)}$, обраховуємо $\hat{E}_p^{(1)}$, і на основі розв'язку (5) і (6) визначаємо величини $\hat{\sigma}_k^{(1)}$, $\hat{\sigma}_p^{(1)}$ та $\epsilon^{(1)}$, що входять в інтеграли (16) та (17). В результаті, для внутрішньої частини стержня $|x| < a$ отримаємо

$$U_p^{(1)} - U_k^{(1)} = \frac{1}{2} \iiint_{V_1} (\hat{\sigma}_p^{(1)} - \hat{\sigma}_k^{(1)}) \hat{e}^{(1)} dV = \\ = \frac{4hb}{a} \frac{1}{s_{11}^E} \frac{k_{31}^2}{1 - k_{31}^2} B_1^2 \sin^2 \lambda a, \quad (18)$$

а для зовнішніх частин стержня $a < |x| < l$

$$U_p^{(2)} - U_k^{(2)} = \frac{1}{2} \iiint_{V_2} (\hat{\sigma}_p^{(2)} - \hat{\sigma}_k^{(2)}) \hat{e}^{(2)} dV = \\ = \frac{2hb}{l - a} \frac{1}{s_{11}^E} \frac{k_{31}^2}{1 - k_{31}^2} [A_2 (\cos \lambda l - \cos \lambda a) + \\ + B_2 (\sin \lambda l - \sin \lambda a)]^2. \quad (19)$$

Вирази для повної енергії при коротко замкнених електродах знаходяться аналогічно

$$U_k^{(1)} = \frac{1}{s_{11}^E} \frac{2hb}{a} B_1^2 (\lambda a) [(\lambda a) + 0,5 \sin 2\lambda a], \quad |x| < a, \\ U_k^{(2)} = \frac{1}{s_{11}^E} \frac{hb}{a} (\lambda a) [(A_2^2 + B_2^2) \lambda (l - a) - \\ - (A_2^2 - B_2^2) \sin \lambda (l - a) \cos \lambda (l + a) - \\ - 2A_2 B_2 \sin \lambda (l - a) \sin \lambda (l + a)], \quad a < |x| < l. \quad (20)$$

Для другої резонансної частоти коливаль, відповідної $(\lambda l)_{R,2} = 3\pi/2$ за формулами (15) – (20) був проведений розрахунок нормованого значення динамічного КЕМЗ k_d^2/k_{31}^2 в залежності від положення $x = \pm a$. Максимальне значення $k_d^2/k_{31}^2 = 0,514$ досягається при $a/l = 1/3$, тобто – у тому самому випадку поділу електродного покриття на три рівних частини, при якому пригнічується основна резонансна мода коливаль. Для порівняння, значення того ж КЕМЗ для стержня з суцільним електродним покриттям є $k_d^2/k_{31}^2 = 0,099$, тобто ефективність енергоперетворення підвищується більш ніж у 5 разів.

5. Результати експерименту.

Для оцінки аналітично отриманих результатів були проведені експерименти для тонкої довгої п'єзокерамічної пластини з ніобату титанату свинцю (НБС-3, [7]), що мала розміри $100 \times 15 \times 3$

мм. Розрізи поверхневих електродів були виконані на відстані 34 мм від країв пластини. Схема підключення експериментальної установки наведена на рис.2. Для реалізації випадку проти-фазного збудження, застосовувалася схема підключення, показана на рис.1, а для реалізації випадку однорідного електричного навантаження (стержень з суцільними електродами) всі три ділянки підключалися синфазно.

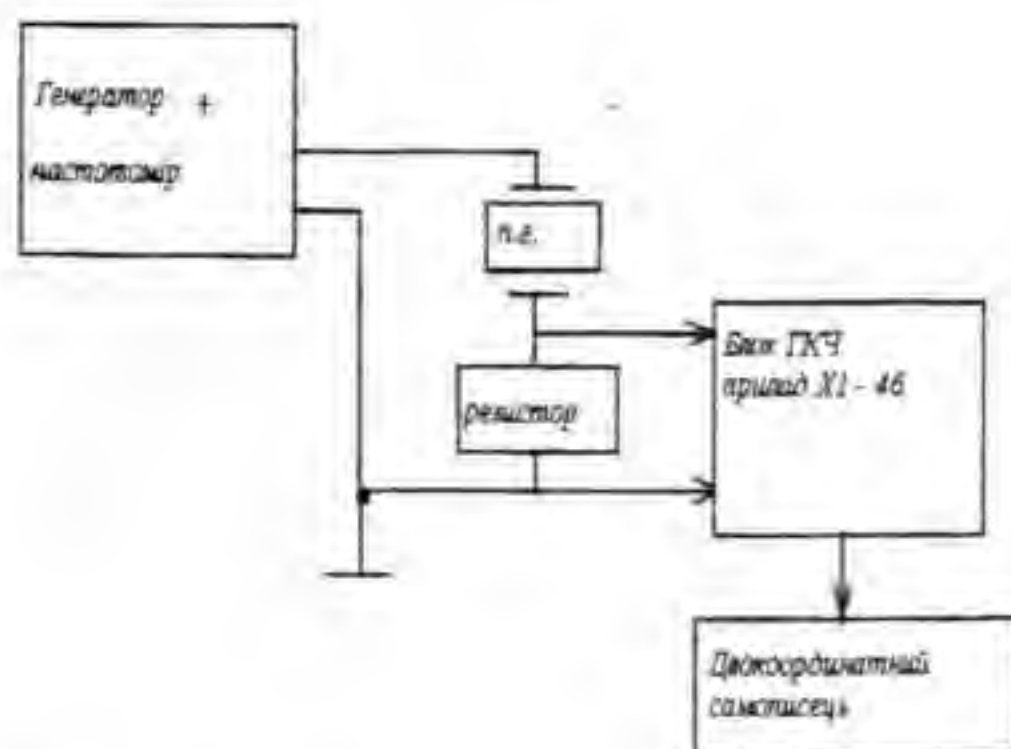


Рис.2. Схема підключення установки.

У обох випадках амплітуда вхідної різниці електричних потенціалів не перевищувала 1 В, а величина активного опору не була більшою за 100 Ом. Нами було встановлено значення основної резонансної частоти стержня на рівні 18,03 кГц, при цьому різниця між частотами резонансу та антирезонансу Δf при синфазному підключенні становила близько 900 Гц при інтенсивності струму 10 мА, а при протифазному підключенні значення Δf не перевищувало 9 Гц при амплітуді струму не більшій за 0.01 мА, тобто з різницею в 100 разів. Отже, передбачуване пригнічення основного поздовжнього резонансу повністю підтвердилося експериментально з цілком задовільною точністю.

На рис 3. показано амплітудно-частотну характеристику стержня при синфазному збудженні, а на рис. 4 показано амплітудно-частотну характеристику стержня при протифазному збудженні (розрізні електроди). Як видно, з рис. 4 основний поздовжній резонанс на частоті 18,03 кГц при протифазному збудженні практично повністю зникає, а другий резонанс при частоті 53,73 кГц суттєво підсилюється, що відповідає отриманому висновку про підвищення ефективності енергоперетворення більш ніж у 5 разів.

Слід також відмітити, що при протифазному збудженні пригнічуються і старші непарні за но-

мером резонанси поздовжніх коливань, і, навпаки, інтенсивність парних резонансів зростає.

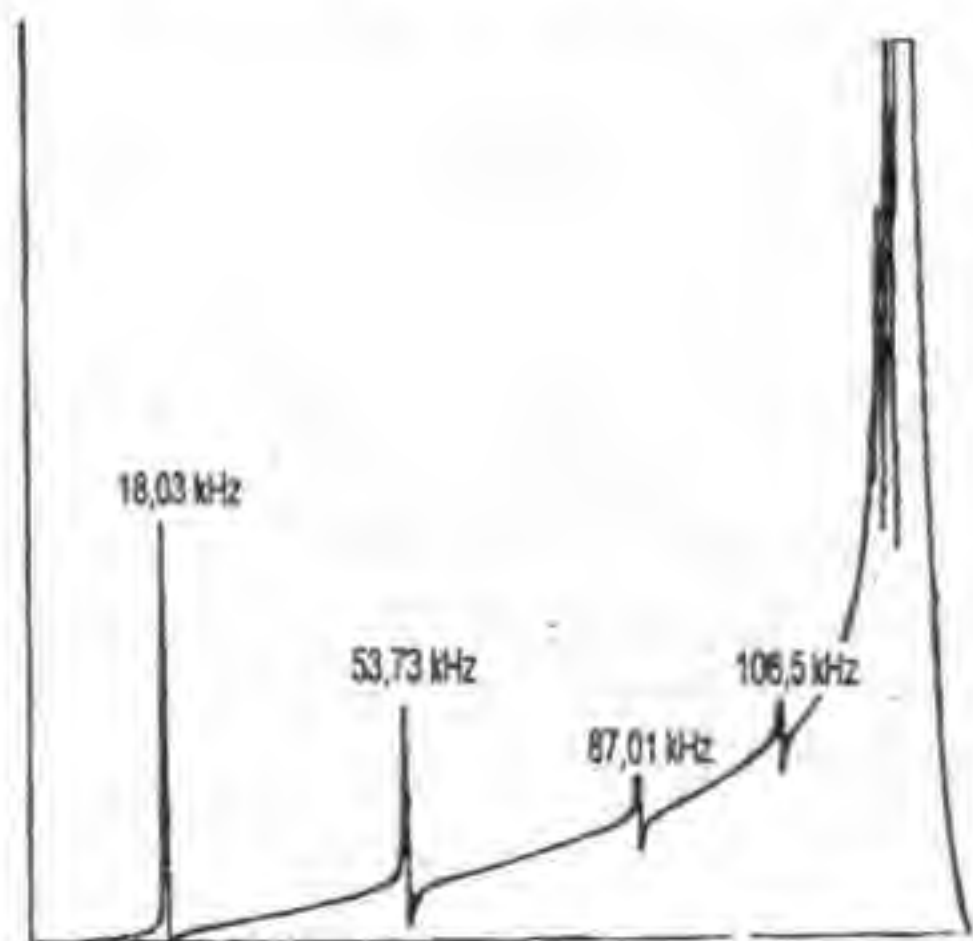


Рис. 3 Амплітудно-частотна характеристика стержня з суцільними електродами

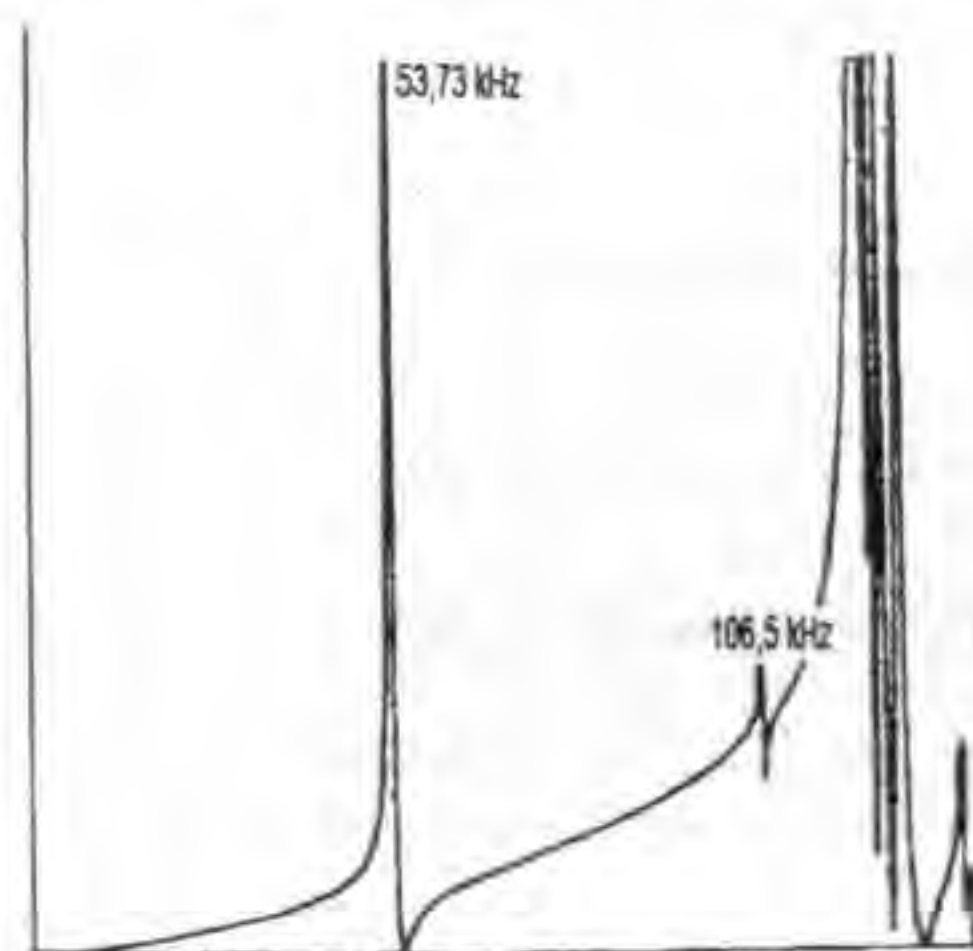


Рис. 4. Амплітудно-частотна характеристика стержня з розрізними електродами.

Так, з рис.4 видно, що сигнал на частоті 87,01 кГц третього резонансу практично відсутній і проявляється лише на амплітудно-частотній характеристиці стержня з суцільним електродним покриттям (див. рис. 3).

Задовільне пояснення цьому експериментальному результаті слід шукати при сумісному аналізі рівнянь резонансу (7) та антирезонансу (11). Можна показати, що резонансні та антирезонансні частоти для непарних номерів мод коливань співпадають при протифазному збудженні і згідно з формулою Мезона (12) та подальшим визначенням КЕМЗ за енергетичним критерієм (15) вказані моди не можуть збуджуватися при навантаженні електричним полем.

Висновки.

В статті розглянуто елементарну задачу про поздовжні коливання п'єзокерамічного стержня, який має розрізи поверхневих електродів. До частин електродного покриття підводиться різне за знаком фази електричне збудження. Встановлено умови, за яких інтенсивність першого основного резонансу є мінімальною, а максимальне значення динамічного КЕМЗ досягається на другій резонансній частоті. В експериментах з довгою прямокутною п'єзопластиною виявлено, що розділення електродного покриття вузькими розрізами на три майже рівних частини призводить до збільшення інтенсивності другого резонансу принаймні у п'ять разів, при цьому коливання на першій резонансній частоті практично відсутні.

Список використаних джерел

1. Piezoelectric materials in devices / Ed. N. Setler, EPFL Swiss Federal Inst. Tech. – Lausanne: 2002. – 518 p.
2. Карлаш В.Л., Ключинченко В.А., Крамаров Ю.А., Улитко А.Ф. Исследование радиальных колебаний тонких пьезокерамических дисков при неравномерном электрическом нагружении // Прикладная механика. – 1977. – 17. – № 8. – С. 56-62.
3. Борисейко О.В. Планарні коливання п'єзокерамічного диску при протифазному збудженні // Вісник Київського ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2001. – № 3. – С. 89-94.
4. Гринченко В.Т., Улитко А.Ф., Шульга Н.А. Электроупругость // Механика связанных полей в элементах конструкций. 5 / Отв. ред. А.Н. Гузь, АН УССР, Ин-т механики. – К.: Наук. Думка, 1989. – 280 с.
5. Мезон У. П. Пьезоэлектрические кристаллы и их применение в ультразвуке. – М.: Изд-во иностр. лит., 1952. – 447 с.
6. Берлякур Д., Керран Д., Жаффе Г. Пьезоэлектрические и пьезомагнитные материалы и их применение в преобразователях // Физическая акустика / Под. ред. У. Мэзона. – М.: Мир, 1966. – 1, ч. А. – С. 204-326.
7. Смажневская Е.Г., Фельдман И.Б. Пьезоэлектрическая керамика. – М.: Советское радио, 1971. – 320с.
8. Лавриненко В.В. Карташов И.А., Вишневский В.С. Пьезоэлектрические двигатели. – М.: Энергия, 1980. – 111с.

Надійшла до редколегії 29.04.2010 р.

УДК 532.5

Олександр М. Вовченко, аспірант

Адвекція рідини при колапсі точкових вихорів

Розглядається самоподібний колапс трьох точкових вихорів. Адвекція ідеальної нестисливої рідини при колапсі вихрової конфігурації обчислена методами контурної динаміки. Нестійкість колапсу досліджена для малих збурень початкових умов.

Ключові слова: колапс вихорів, адвекція, контурна динаміка.

E-mail: oleksandr.vovchenko@gmail.com

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., професор Мелешко В.В.

1 Вступ

Вивчення переносу властивостей рідини разом з її частками (звичайно, яке носить загальну назву адвекція) є практичною задачею з широким застосуванням до різномасштабних явищ від течій океану до мікротечій [6]. У багатьох випадках при дослідженні потоків їх можна розглядати як наближено нестисливі та двовимірні. Зокрема, при вивченні великомасштабних геофізичних течій вертикальні переміщення в горизонтальних потоках можуть бути важливими, але вертикальні швидкості порівняно малі по відношенню до горизонтальних. Тому навіть у тривимірних великомасштабних течіях двовимірні нестисливі моделі можуть бути корисними представленнями при вивченні поля швидкостей на фіксованих рівнях або на квазігоризонтальних поверхнях. Використовуючи модель ідеальної рідини, проведемо дослідження руху пасивних лагранжевих частинок рідини у двовимірному полі швидкостей точкових вихорів, а саме при їх колапсі. Феномен колапсу полягає у появі сингулярності в рівняннях динаміки точкових вихорів за скінченний час [3], але питання

Oleksandr M. Vovchenko, PhD student

Advection of fluid under collapsing point vortices.

Self-similar collapse of three point vortices is considered. Advection of ideal incompressible fluid by collapsing vortex configuration is studied by methods of contour dynamics. Collapse instability is investigated for small perturbations of initial conditions.

Key Words: vortex collapse, advection, contour dynamics.

про адвекцію рідини при колапсі ще не було висвітлено у науковій літературі.

2 Колапс трьох вихорів

Відомо [1], що рух точкових вихорів на необмеженій площині, описується наступним чином:

$$\dot{z}_\alpha = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\beta=1}^N \frac{\Gamma_\beta}{z_\alpha - z_\beta}, \alpha = \overline{1, N} \quad (1)$$

де Γ_α , $\alpha = \overline{1, N}$ – інтенсивності вихорів, $z_\alpha = x_\alpha + iy_\alpha$, $\alpha = \overline{1, N}$ – положення точкового вихора на комплексній площині, крапкою позначена похідна по часу, рискою позначене комплексне спряження, а штрих при сумі означає $\beta \neq \alpha$.

Рівняння руху точкових вихорів на необмеженій площині без набігаючого потоку в декартових координатах мають вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{dx_\alpha}{dt} &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{\beta=1}^N \frac{\Gamma_\beta (y_\alpha - y_\beta)}{r_{\alpha\beta}^2}, \\ \frac{dy_\alpha}{dt} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\beta=1}^N \frac{\Gamma_\beta (x_\alpha - x_\beta)}{r_{\alpha\beta}^2}, \alpha = \overline{1, N} \end{aligned} \quad (2)$$

де $r_{\alpha\beta}^2 = (x_\beta - x_\alpha)^2 + (y_\beta - y_\alpha)^2$, а штрих при сумі означає $i \neq j$. Початкова конфігурація вихорів задається рівностями $x_\alpha = x_\alpha^{(0)}$ та $y_\alpha = y_\alpha^{(0)}$ при $t = 0$. Рівняння (1) мають чотири відомі [1, 2] загальні перші інтеграли. Вони являють собою дві складові, X та Y , лінійного імпульсу, кутовий імпульс

$$X + iY = \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_\alpha z_\alpha, I = \sum_{\alpha=1}^N \Gamma_\alpha |z_\alpha|^2, \quad (3)$$

та Гамільтоніан системи точкових вихорів

$$H = -\frac{1}{2\pi} \sum_{1 \leq \alpha < \beta \leq N} \Gamma_\alpha \Gamma_\beta \log |z_\alpha - z_\beta|. \quad (4)$$

Встановлено [4], що при $N = 3$ рівняння руху допускають самоподібний рух для деяких конкретних значень інтенсивностей та початкових положень.

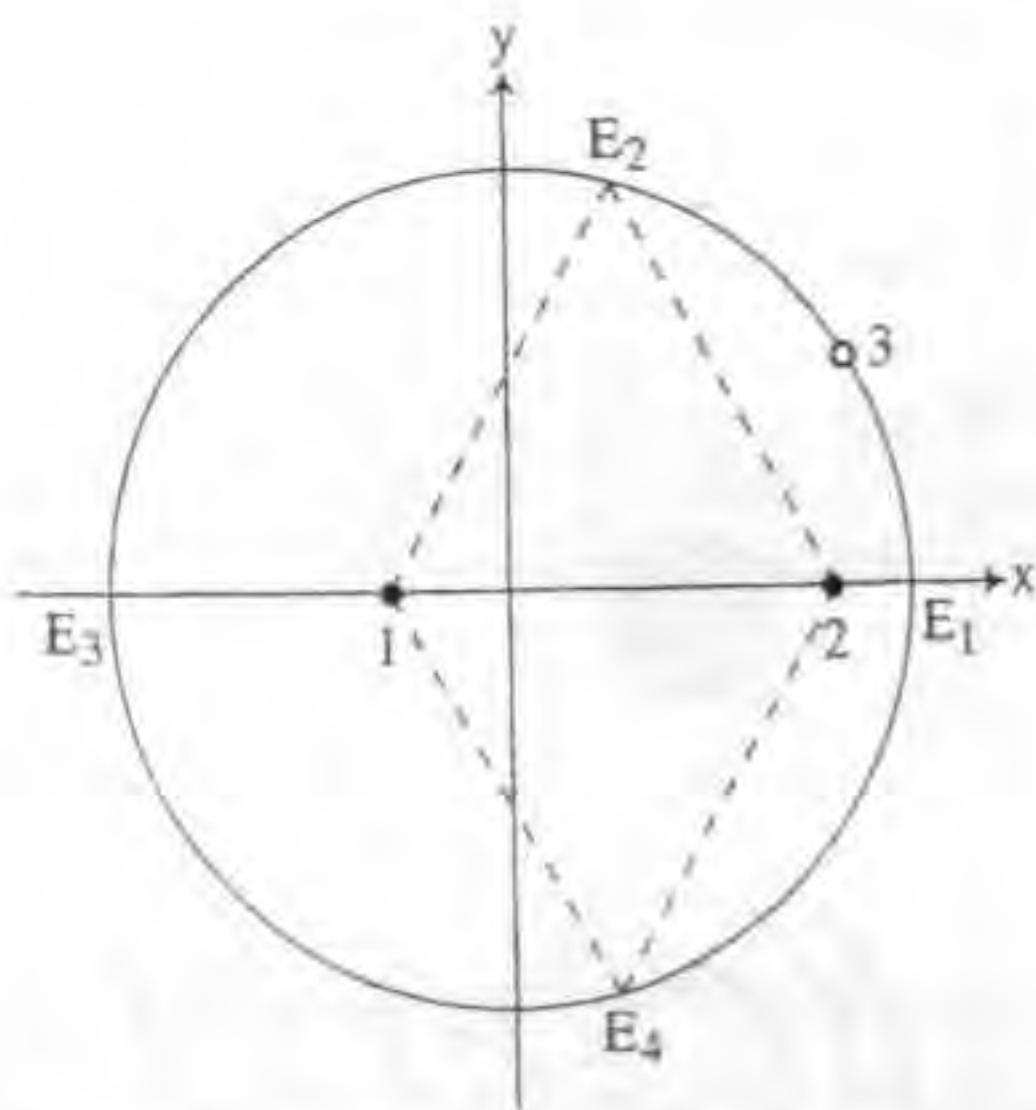


Рис. 1 Побудова початкових умов, що ведуть до самоподібного колапсу або розбігання трьох вихорів

Множина значень інтенсивностей вихорів та початкових умов, при яких можливий самоподібний рух, достатньо обмежена [3]. Рух N точкових вихорів самоподібний, якщо конфігурація вихорів зберігає форму та може змінювати розмір. Відносна рівновага такої системи буде у випадку збереження як форми так і розміру конфігурації. Самоподібні рухи точкових вихорів тісно пов'язані з відносною рівновагою. Необхідні та достатні умови

для колапсу або розбігання трьох вихорів задаються рівностями $\Gamma_1 \Gamma_2 + \Gamma_2 \Gamma_3 + \Gamma_3 \Gamma_1 = 0$ та $\Gamma_1 \Gamma_2 s_3^2 + \Gamma_2 \Gamma_3 s_1^2 + \Gamma_3 \Gamma_1 s_2^2 = 0$, де s_1, s_2, s_3 – відстані між точковими вихорями.

Початкові умови для самоподібного колапсу можуть бути побудовані за методом, що описує рис. 1. Точки 1 та 2 представляють перший та другий вихорі. Центр завихреності вихорів 1 та 2 знаходиться у початку координат, а радіус кола рівний відстані між двома вихорами, помноженій на $\sqrt{(\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3)/(\Gamma_1 + \Gamma_2)}$. Якщо помістити третій вихор у точках E_1, E_2, E_3, E_4 , отримаємо колінеарну або рівносторонню конфігурацію відносної рівноваги. Дуги $E_1 E_2$ та $E_3 E_4$ відповідають самоподібному колапсу, $E_2 E_3$ та $E_4 E_1$ – самоподібному розходженню. Траєкторії вихорів при самоподібному колапсі являють собою логарифмічні спіралі, що закручуються у центр завихреності.

Зосередимо увагу на випадку, що розглянув Грьоблі [7]. Для обчислень візьмемо початкові умови, подані в роботі Грьоблі. Початкові координати трикутника вихорів ABC наступні: $x_1 = \alpha, y_1 = 0, x_2 = -2\alpha, y_2 = 2\sqrt{3}\alpha$, та $x_3 = 0, y_3 = 3\sqrt{3}\alpha$. Інтенсивності вихорів $\Gamma_1 = -6\kappa, \Gamma_2 = -3\kappa, \Gamma_3 = 2\kappa$. Аналітичний розв'язок рівнянь руху вихорів (2), що задовольняє ці початкові умови має вигляд:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= 4\alpha(1 - t/T)^{1/2} \cos(\pi + \vartheta(t)), \\ y_1(t) &= 4\alpha(1 - t/T)^{1/2} \sin(\pi + \vartheta(t)), \\ x_2(t) &= 3\alpha\sqrt{3}(1 - t/T)^{1/2} \cos(\frac{5}{6}\pi + \vartheta(t)), \\ y_2(t) &= 3\alpha\sqrt{3}(1 - t/T)^{1/2} \sin(\frac{5}{6}\pi + \vartheta(t)), \\ x_3(t) &= \alpha(1 - t/T)^{1/2} \cos(\frac{1}{3}\pi + \vartheta(t)), \\ y_3(t) &= \alpha(1 - t/T)^{1/2} \sin(\frac{1}{3}\pi + \vartheta(t)), \end{aligned} \quad (5)$$

де T та ϑ задані так

$$T = \frac{14\pi\alpha^2}{\kappa\sqrt{3}}, \quad (6)$$

$$\vartheta(t) = \frac{5\kappa}{2\sqrt{3}} \log(1 - t/T). \quad (7)$$

3 Нестійкість самоподібного колапсу

Аналіз лінійної стійкості системи показує алгебраїчно зростаючу нестійкість самоподібного колапсу та лінійну стійкість самоподібного розходження вихорів. У роботі [3] знайдено три власні значення та три власні моди для самоподібних рухів. Проінтегруємо

чисельно рівняння (2), надавши малих збурень початковим умовам. Залишимо значення інтенсивностей вихорів незмінними, а їх початкові положення змінимо по чергово для кожного з вихорів. На рис. 3 зображені траєкторії вихорів при колапсі, а також положення збурених конфігурацій для трикутників вихорів у момент часу $t = 2T = 50,7863$. Відхиливши один з вихорів, ми порушуємо умови самоподібного руху. Тому такі збурення призводять до відхилення від траєкторій колапсу, зміни форми конфігурації вихорів. Чисельне інтегрування траєкторій точкових вихорів у цьому випадку показує їх наближення до центру завихреності при $0 < t < T$ та їх подальше віддалення при $T < t < 2T$. Окремий інтерес представляють конфігурації відносної рівноваги, їх дослідження широко представлене у періодичній літературі.

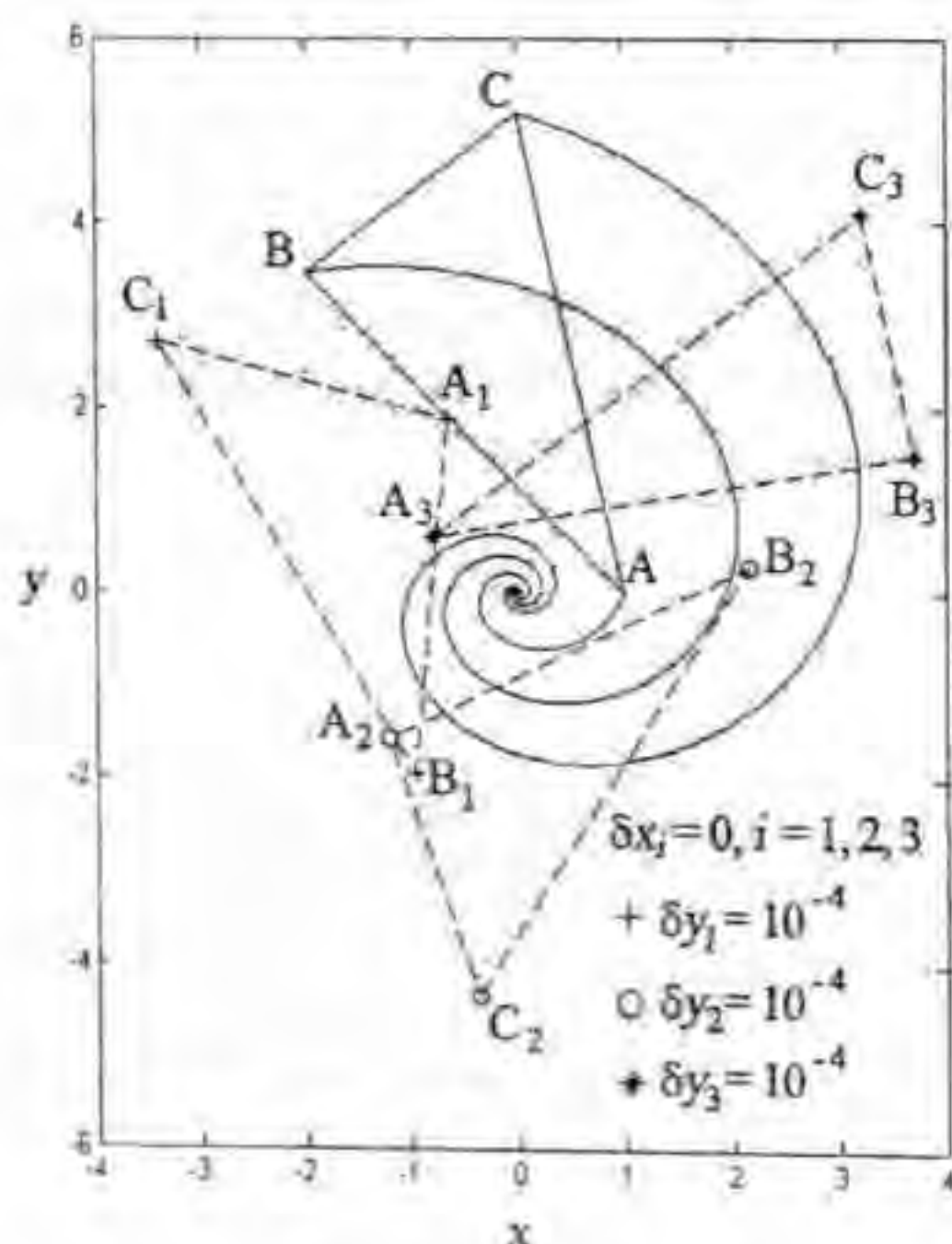


Рис. 3 Нестійкість колапсу трьох вихорів

Трикутники на рис. 3 позначають положення вихорів у момент $t = 2T$, причому трикутник $A_1B_1C_1$ відповідає малому збуренню положення вихора 1 по осі Oy : $\delta y_1 = 10^{-4}$, в той час як інші початкові координати вихорів незмінні; трикутники $A_2B_2C_2$, $A_3B_3C_3$ відповідають малій зміні положення по осі Oy вихора 2 та 3 відповідно.

4 Адвекція при колапсі вихорів

Рівняння пасивної адвекції індивідуальної лагранжевої частинки рідини у полі швидкостей точкових вихорів може бути отримана різними способами [5]. Найпростіший полягає у припущенні (за теоремою Гельмгольца), що маркер $Z = X + iY$ є вихором нульової інтенсивності. Тоді рух описується рівнянням

$$\dot{\bar{Z}} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j}{Z - z_j}, \quad (8)$$

з початковими умовами $Z = Z^0$ при $t = 0$ ($z_j = x_j + iy_j$ – положення вихорів у комплексній площині).

Проінтегруємо рівняння руху (8) для пасивних частинок рідини, розташованих у початковий момент всередині області I , при значеннях $\alpha = 1, \kappa = 1$. Траєкторії пасивних частинок обчислені методом Рунге-Кутта.

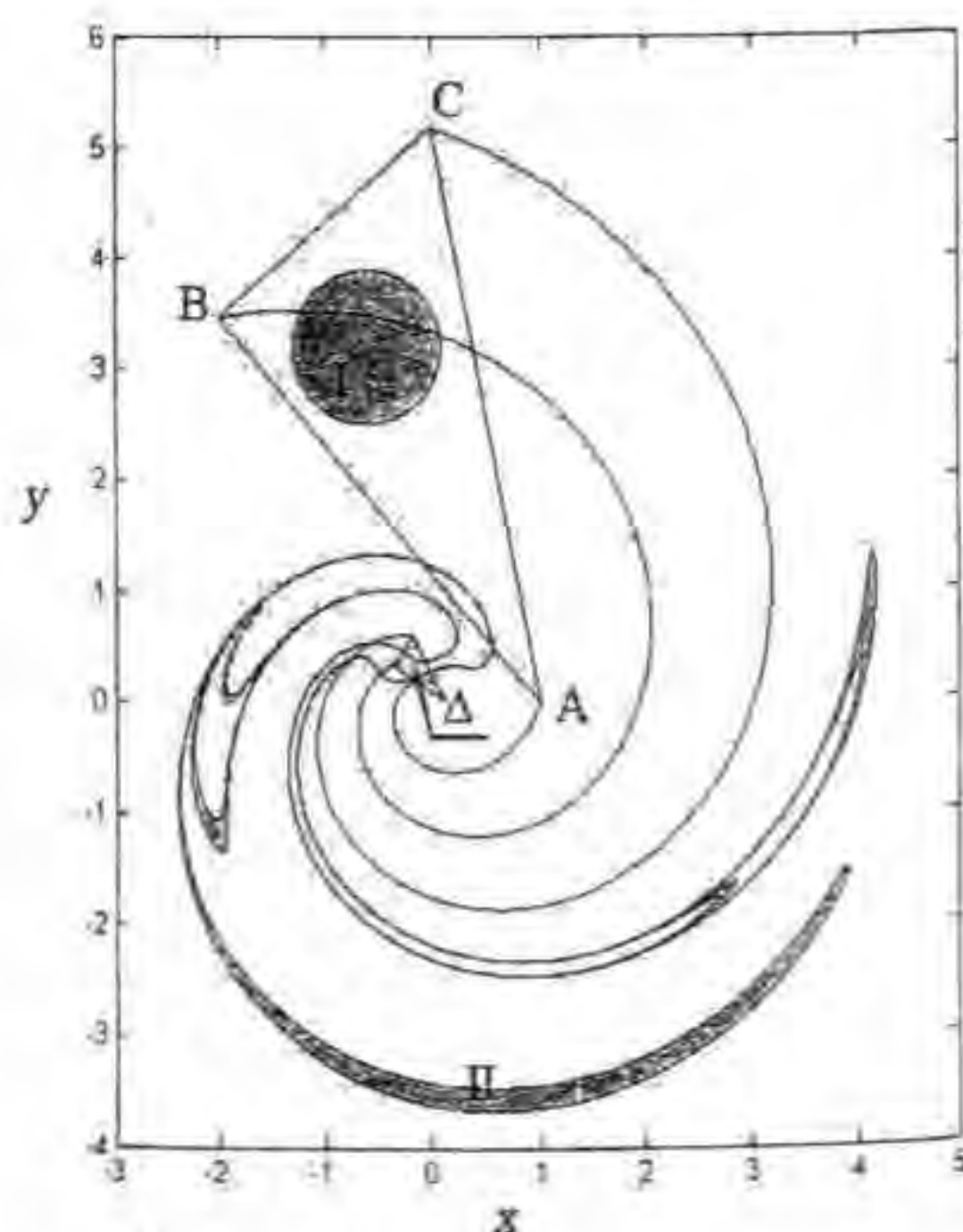


Рис. 2 Рух трикутника вихорів при колапсі та адвекція області рідини

Висока точність розрахунків отримана при використанні методів контурної динаміки шляхом контролю числа точок та відстані

між ними на кожному кроці інтегрування. Достовірність результатів підтверджується збереженням площі області, що зазнає адвекції (похибка складає величину порядку 10^{-5} од.пл.).

На рис. 2 зображено рух області рідини I , що знаходиться у початковий момент всередині трикутника вихорів. У момент часу $t = 25$ вона займає положення II (час колапсу $T = 25,39319$) та демонструє стиск та розтяг рідини у полі швидкостей точкових вихорів. Слід зазначити, що певна частина рідини залишається у трикутнику вихорів Δ .

5 Висновки

Розгляд адвекції ідеальної рідини при колапсі трьох точкових вихорів вказує на утворення складних структур з численими нашаруваннями, демонструє розтяг та згин контуру області рідини. Рідина, що у початковий момент часу знаходилась всередині трикутника вихорів повністю не покидає його протягом руху, хоча останній стягується в точку за скінченний час. Чисельна реалізація розв'язку задачі адвекції має свої обмеження, розрахунки потребують надто високої точності та великих ресурсів при підході до моменту колапсу, адже швидкості поблизу вихорів зростають до нескінченності. Самоподібний колапс – нестійка конфігурація, що виявляє дуже високу чутливість до малих збурень початкових умов. Попередні результати цієї роботи наведені у [8].

Список використаних джерел

1. Бэтчелор Дж. Введение в динамику жидкости — М.: Мир, 1973. — 760 с.

2. Мелешко В.В., Константинов М.Ю. Динамика вихревых структур. — Киев: Наукова думка, 1993. — 283 с.
3. Aref H. Self-similar motion of three point vortices. // Phys. Fluids — 2010. — 22, №5. — P. 1–12.
4. Gröbli W. Spezielle Probleme über die Bewegung Geradliniger Paralleler Wirbel Fäden. // Vierteljahrsschr. Natforsch. Ges. Zur. — 1877. — 12, 129.
5. Meleshko V.V., Konstantinov M.Yu., Gurzhi A.A., Konovaljuk T.P. Advection of a vortex pair atmosphere in a velocity field of point vortices. // Phys. Fluids — 1992. — 4, №12. — P. 2779–2797.
6. Samelson R.M., Wiggins S. Lagrangian transport in geophysical jets and waves // Springer — 2006. — 146 P.
7. Vosbeek P.W.C., van Geffen J.H.G.M., Meleshko V.V., van Heijst G.J.F. Collapse interactions of finite-sized two-dimensional vortices. // Phys. Fluids — 1997. — 9, №11. — P. 3315–3322.
8. Vovchenko O., Advection Under Collapsing Point Vortices. // Регулярная и хаотическая гидродинамика. Приложения к атмосфере и океану: Тезисы Международной конференции. — М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика» — 2010. — С. 49–50.

Надійшла до редколегії 07.06.2010

УДК 531.382:539.375.6 (045)

Вишневецький О.А., асистент
Железняк О.О., д.ф.-м.н., професор
Давидов О.С., к.ф.-м.н., доцент

Зміни геометричної форми поверхні контактуючих твердих тіл під дією виникаючого тертя.

В роботі розглянуто механізм можливого моделювання зміни форми внутрішньої поверхні циліндра при контакті з валом в умовах повільного зношування. Показано можливість використання поліномів Лежандра при зношуванні контактуючих поверхонь, а також моделювання зміни шорсткості при дії сили тертя.

Ключові слова: аналітична механіка, математичне моделювання процесу зношування, шорсткість поверхні, неголономні механічні в'язі

E-mail: eco@nau.edu.ua; www.nau.edu.ua.

Статтю представив, д. ф.- м. н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Постановка проблеми. Схема контакту спряження вал-втулка є найбільш поширена у транспортному, авіаційно-космічному, будівельному та інших видах машино-будівництва. В наслідок дії сили тертя існує зношування контактуючих поверхонь, що призводить до порушення ритму стандартної роботи машин.

Форма зношених поверхонь залежить від циклічності навантаження, швидкості обертання, твердості, пластичності, втомлюваності матеріалів та багатьох інших факторів. Проектувальників цікавить термін безвідмовної роботи техніки а також, момент початку зношування, яке призведе до виходу з ладу виробу. Для цього треба змоделювати можливі зміни форми контактуючих поверхонь при умовах, які визначають вихід з ладу машин та механізмів під впливом неголономних механічних в'язей з використанням апарату аналітичної механіки.

Аналіз останніх досліджень. Розвитку проблеми можливої зміни геометричної форми контактуючих деталей приділялось багато уваги в наукових працях. Основні фактори, що впливають на можливу зміну форми контактуючих деталей, розглянуто в роботі [1].

В роботі [2] розв'язувалася проблема зміни форми поверхні кругового циліндра, що контактує з циліндричним валом в процесі зношування, проте в ній не розглянуто варіант зміни форми після подальшого зношування матеріалів деталей.

O.A. Vyshnevskiy, Assistant Professor
O.O. Zheleznyak, D.Sci. (Phys.-Math.), Professor
O.S. Davydov, Ph.D., Associate Professor

Modification of the geometrical form of a surface of contacting rigid bodies under arising friction.

In this work the mechanism of possible modeling of modification of the cylinder interior surface form under contact with a shaft in slow wearing is considered. The possibility of Legendre polynomials use at wear process of contacting surfaces, and also modeling roughness modification under force friction are shown.

Key words: analytical mechanics, mathematical modeling of a wearing, roughness of surface, non-holonomic mechanical connections

Основні принципи моделювання процесу зношування під дією виникаючого тертя викладені в роботах [3-7], проте можна більше звернути увагу на методи математичного моделювання зношування контактуючих деталей машин.

Розрахунок надійності зношуваних пристроїв та основні характеристики зношування подано в роботах [8-9].

Особливості процесу зношування поверхонь взаємодіючих тіл при екстремальних умовах розглянуто в роботі [10], однак слід більше висвітлити питання попередження виходу з ладу машин та механізмів при зношуванні їх контактуючих поверхонь.

Невирішені частини проблеми. Важливим виглядає вирішення проблеми визначення подальшого зношування внутрішньої поверхні циліндра, у якого в перерізі після зношування утворився еліпс або овал.

В деяких механізмах спочатку закладено еліпс або овал в перерізі порожнього циліндра, тому треба дослідити зміну геометричної форми його внутрішньої поверхні під час взаємодії з циліндричним валом.

Доцільним виглядає використання поліномів Лежандра для моделювання зміни форми поверхонь взаємодіючих деталей.

Потребує подальшої розробки механізм можливого моделювання зміни шорсткості при дії сили тертя під час зношування циліндричних деталей з використанням поліномів Лежандра.

Цілі статті.

1. Показати один із можливих шляхів моделювання зміни форми геометричних поверхонь взаємодіючих деталей при наявності зношування за допомогою поліномів Лежандра.

2. Вирішити проблему визначення подальшого зношування внутрішньої поверхні циліндричних деталей, при наявності попереднього зносу.

3. Змоделювати виникаючу при зношуванні поверхні контактуючих тіл зміну форми та шорсткості з використанням поліномів Лежандра.

Виклад основного матеріалу. Розглянемо контакт спряження вал-втулка, при якому в початковий момент часу $t = 0$ внутрішня поверхня циліндра має в перерізі еліпс, зображений на рис. 1, а при $t > 0$ внаслідок контакту і відносного ковзання поверхні циліндричного валу по цій внутрішній поверхні відбувається процес її зношування.

Нехай вісь Oz декартової системи координат $Oxyz$ напрямлена вздовж осі зовнішнього циліндра. Рівняння перерізу зовнішнього порожньотілого циліндру в площині Oxy запишемо у параметричному вигляді,

$$\begin{cases} x = x_0 + a \cos \varphi \\ y = y_0 + b \sin \varphi \end{cases} \quad (1)$$

де $a > 0, b > 0$ - пів-вісі еліпса, центр (x_0, y_0) , параметр $0 \leq \varphi \leq 2\pi$

$$l = \sqrt{\left(\frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial \varphi} \cos \varphi - (a + d(\varphi, t)) \sin \varphi\right)^2 + \left(\frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial \varphi} \sin \varphi + (b + k(\varphi, t)) \cos \varphi\right)^2} \quad (4)$$

Враховуючи залежність швидкості лінійного зносу від форми початкової поверхні, яка розглянута в роботі [1]

$$-\gamma + \frac{1}{l} \left| \frac{\partial F}{\partial t} \right| = 0, \quad (5)$$

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial \varphi} \cos \varphi - (a + d(\varphi, t)) \sin \varphi\right)^2 + \left(\frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial \varphi} \sin \varphi + (b + k(\varphi, t)) \cos \varphi\right)^2}} \cdot \left| \frac{\partial x}{\partial t} \right| = \gamma_x, \\ \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial \varphi} \cos \varphi - (a + d(\varphi, t)) \sin \varphi\right)^2 + \left(\frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial \varphi} \sin \varphi + (b + k(\varphi, t)) \cos \varphi\right)^2}} \cdot \left| \frac{\partial y}{\partial t} \right| = \gamma_y. \end{cases} \quad (6)$$

Враховуючи те, що частинні похідні

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial t} \cos \varphi, \\ \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial t} \sin \varphi, \end{cases}$$

Нехай центр еліпса знаходиться у початку координат, тоді рівняння внутрішньої поверхні циліндра, що зношується, можна записати у вигляді:

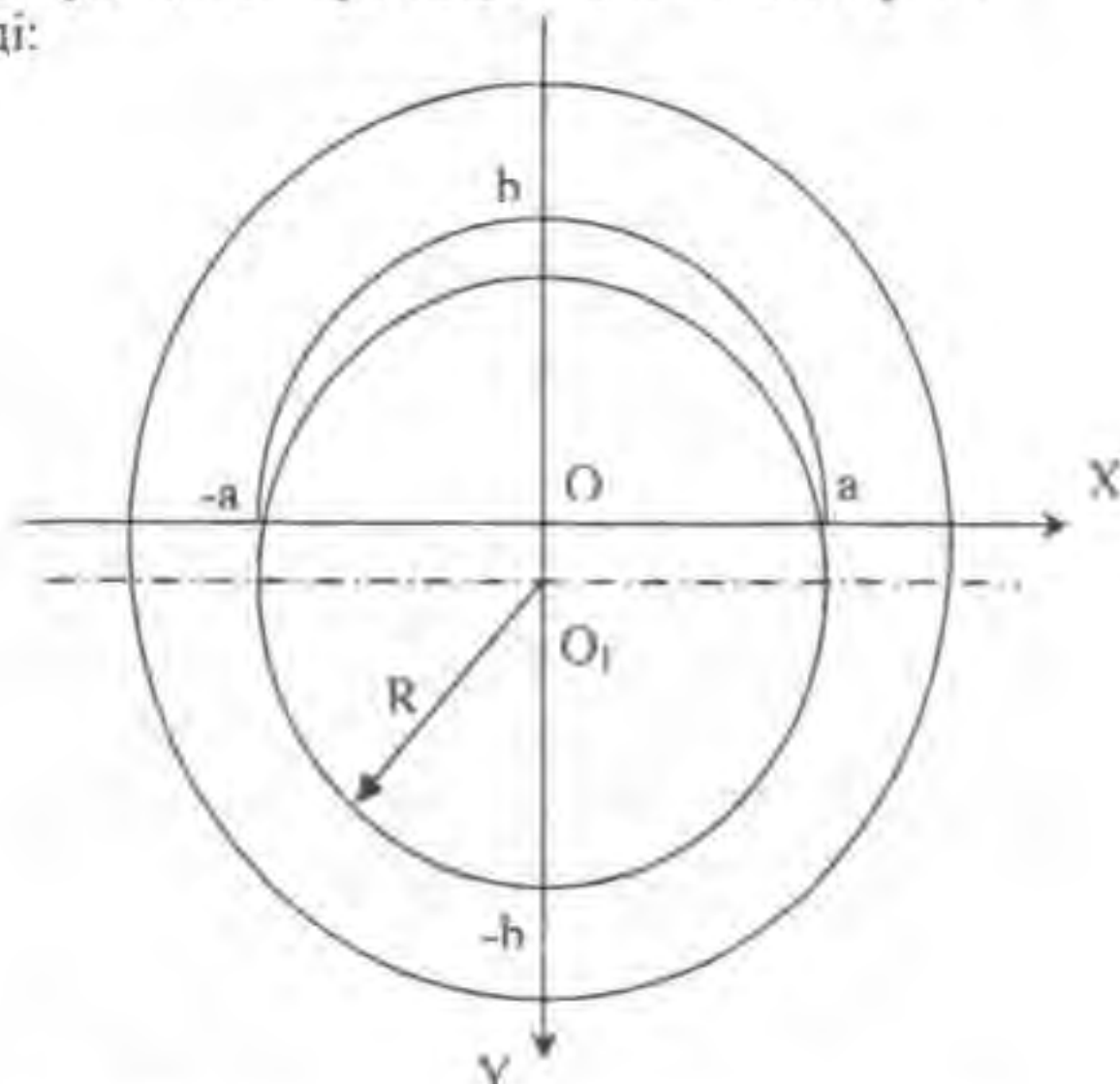


Рис. 1 Переріз кругового циліндричного валу у взаємодії з порожньотілим циліндром, перерізом якого є еліпс.

$$\begin{cases} x = (a + d(\varphi, t)) \cos \varphi, \\ y = (b + k(\varphi, t)) \sin \varphi. \end{cases} \quad (2)$$

Так як

$$l^2 = (x'_\varphi)^2 + (y'_\varphi)^2 \quad (3)$$

то можна знайти довжину дуги l

де $F(x, y, z, t) = 0$ - рівняння поверхні, що зношується, а γ - швидкість лінійного зносу, отримаємо параметричне рівняння швидкості лінійного зносу:

формула (6) залежності компонент швидкості зношування даної циліндричної поверхні по осям Ox та Oy після відповідних перетворень прийме наступний вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\left| \frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial t} \cos \varphi \right|}{\sqrt{\left(\frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial \varphi} \cos \varphi - (a + d(\varphi, t)) \sin \varphi \right)^2 + \left(\frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial \varphi} \sin \varphi + (b + k(\varphi, t)) \cos \varphi \right)^2}} = \gamma_x \\ \frac{\left| \frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial t} \sin \varphi \right|}{\sqrt{\left(\frac{\partial d(\varphi, t)}{\partial \varphi} \cos \varphi + (a + d(\varphi, t)) \sin \varphi \right)^2 + \left(\frac{\partial k(\varphi, t)}{\partial \varphi} \sin \varphi + (b + k(\varphi, t)) \cos \varphi \right)^2}} = \gamma_y \end{array} \right. \quad (7)$$

Нехай при $t = 0$ внутрішня поверхня зовнішнього порожньотілого циліндра має в перерізі овал Касіні, зображений на рис.2, а при $t > 0$, внаслідок контакту і відносного ковзання поверхні циліндричного валу по цій внутрішній поверхні, відбувається її зношування.

Нехай вісь Oz декартової системи координат $Oxyz$ напрямлена вздовж осі зовнішнього циліндра. Рівняння овалу Касіні, що має в перерізі зовнішній порожньотілий циліндр, запишемо у параметричному вигляді (8).

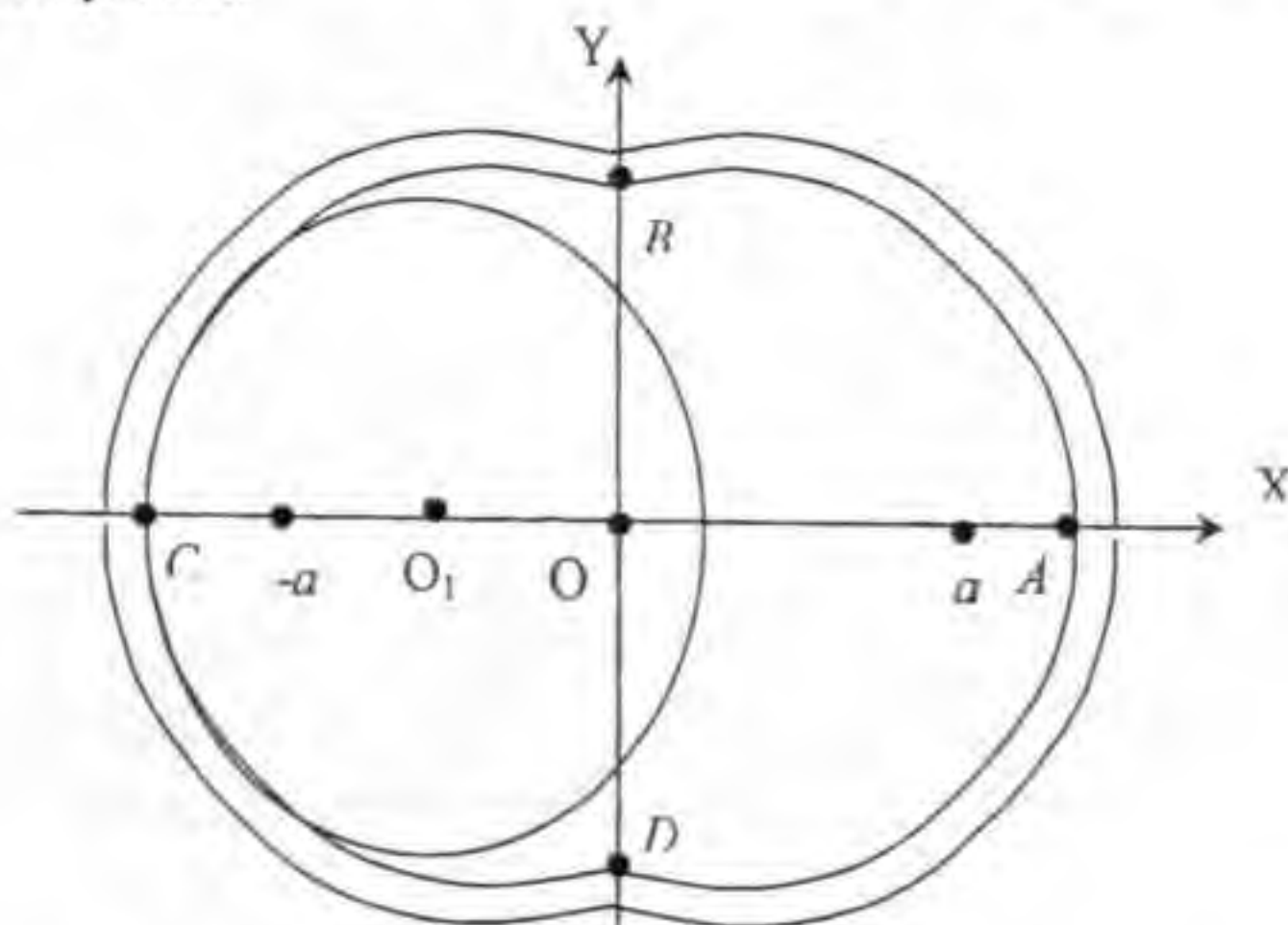


Рис.2 Переріз порожньотілого циліндру з центром у точці O та валу з центром у точці O_1 (при $a < b$ і точок $A(\sqrt{a^2 + b^2}; 0)$, $B(0; \sqrt{b^2 - a^2})$, $C(-\sqrt{a^2 + b^2}; 0)$, $D(0; -\sqrt{b^2 - a^2})$)

$$\begin{cases} x(\varphi) = \cos \varphi \sqrt{a^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - a^2 \sin^2 2\varphi}} \\ y(\varphi) = \sin \varphi \sqrt{a^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - a^2 \sin^2 2\varphi}} \end{cases} \quad (8)$$

Рівняння перерізу внутрішньої поверхні циліндру, що зношується можна записати у вигляді:

$$\begin{cases} x(\varphi) = \cos \varphi \sqrt{(a + m(\varphi, t))^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}} \\ y(\varphi) = \sin \varphi \sqrt{(a + m(\varphi, t))^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}} \end{cases} \quad (9)$$

Нехай $(a + m(\varphi, t))^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi} = p(\varphi, t)$. (10)

Тоді довжина дуги дорівнює:

$$l = \sqrt{\left(-\sin \varphi \sqrt{p(\varphi, t)} + \cos \varphi \frac{\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial \varphi}}{2\sqrt{p(\varphi, t)}} \right)^2 + \left(\cos \varphi \sqrt{p(\varphi, t)} + \sin \varphi \frac{\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial \varphi}}{2\sqrt{p(\varphi, t)}} \right)^2}$$

Формулу (5) запишемо у параметричній формі

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{\left(-\sin \varphi \sqrt{p(\varphi, t)} + \cos \varphi \frac{\partial p(\varphi, t)}{2\sqrt{p(\varphi, t)}} \right)^2 + \left(\cos \varphi \sqrt{p(\varphi, t)} + \sin \varphi \frac{\partial p(\varphi, t)}{2\sqrt{p(\varphi, t)}} \right)^2}} \cdot \left| \frac{\partial x}{\partial t} \right| = \gamma_x \\ & \frac{1}{\sqrt{\left(-\sin \varphi \sqrt{p(\varphi, t)} + \cos \varphi \frac{\partial p(\varphi, t)}{2\sqrt{p(\varphi, t)}} \right)^2 + \left(\cos \varphi \sqrt{p(\varphi, t)} + \sin \varphi \frac{\partial p(\varphi, t)}{2\sqrt{p(\varphi, t)}} \right)^2}} \cdot \left| \frac{\partial y}{\partial t} \right| = \gamma_y \end{aligned} \right. \quad (11)$$

Враховуючи те, що

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= \frac{\cos \varphi \left(2(a + m(\varphi, t)) \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \cos 2\varphi \mp \frac{(a + m(\varphi, t)) \cdot \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \sin^2 2\varphi}{\sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}} \right)}{2\sqrt{(a + m(\varphi, t))^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}}} \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= \frac{\sin \varphi \left(2(a + m(\varphi, t)) \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \cos 2\varphi \mp \frac{(a + m(\varphi, t)) \cdot \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \sin^2 2\varphi}{\sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}} \right)}{2\sqrt{(a + m(\varphi, t))^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}}} \end{aligned}$$

Залежність (5) матиме наступний вигляд:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\left(2(a + m(\varphi, t)) \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \cos 2\varphi \mp \frac{(a + m(\varphi, t)) \cdot \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \sin^2 2\varphi}{\sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}} \right) \cos \varphi}{\sqrt{4p^2(\varphi, t) + \left(\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial \varphi} \right)^2}} = \gamma_x \\ & \frac{\left(2(a + m(\varphi, t)) \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \cos 2\varphi \mp \frac{(a + m(\varphi, t)) \cdot \frac{\partial m(\varphi, t)}{\partial t} \sin^2 2\varphi}{\sqrt{b^4 - (a + m(\varphi, t))^2 \sin^2 2\varphi}} \right) \sin \varphi}{\sqrt{4p^2(\varphi, t) + \left(\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial \varphi} \right)^2}} = \gamma_y \end{aligned} \right. \quad (12)$$

Враховуючи заміну (10) і формулу (12), залежності компонент швидкості зношування даної циліндричної поверхні по осям Ox та Oy , можна записати в більш компактному вигляді.

Після відповідних перетворень отримаємо наступну систему рівнянь.

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} \cos \varphi}{\sqrt{4p^2(\varphi, t) + \left(\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial \varphi} \right)^2}} = \gamma_x \\ & \frac{\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial t} \sin \varphi}{\sqrt{4p^2(\varphi, t) + \left(\frac{\partial p(\varphi, t)}{\partial \varphi} \right)^2}} = \gamma_y \end{aligned} \right. \quad (13)$$

Для ілюстрації зміни форми порожньотілого циліндру, перерізом якого є кільце, можна використати поліном Лежандра.

Поліном Лежандра має загальний вигляд

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n (x^2 - 1)^n}{dx^n}$$

Поліном може виступати як збурюючий чинник для зміни форми поверхні взаємодіючих деталей. Так за допомогою поліному Лежандра порядку n можна з кола отримати овал у перерізі шляхом використання наступного виразу у полярній системі координат.

$$\rho = R_0(1 + mP_n(\cos \varphi)) \quad (14)$$

В результаті взаємодії поверхонь циліндричних твердих тіл, можна за допомогою поліному Лежандра другого порядку з кола в перерізі отримати овал, який за формою нагадує еліпс.

$$\rho = R_0(1 + mP_2(\cos \varphi)), \quad (15)$$

$$\text{де } P_2(\cos \varphi) = \frac{1}{2}(3\cos^2 \varphi - 1)$$

Для знаходження зв'язку параметрів R_0 і m з піввісями a і b еліпсу (1) розглянемо значення ρ при $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ і результати подамо у вигляді системи (16):

$$\begin{cases} a = R_0(1 + m), \\ b = R_0\left(1 - \frac{m}{2}\right). \end{cases} \quad (16)$$

Після розв'язання системи (16) відносно R_0 і m , отримаємо наступні результати

$$\begin{cases} m = \frac{2(a-b)}{a+2b}, \\ R_0 = \frac{a+2b}{3}. \end{cases} \quad (17)$$

Співвідношення (15), з урахуванням (17), буде мати наступний вигляд

$$\rho = \sqrt{b^2 - a^2} + \frac{\sqrt{a^2 + b^2} - \sqrt{b^2 - a^2}}{3} (5\cos^4 \varphi + 10\cos^3 \varphi - 12\cos \varphi). \quad (23)$$

Рівняння (23) описує овал, що утворюється в результаті зношування порожньотілого кругового циліндра втулкою. Формою отриманий овал нагадує овал Касіні, який задається у полярній системі координат наступною формулою ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $a, b = \text{const}$):

$$\rho = \sqrt{a^2 \cos 2\varphi \pm \sqrt{b^4 - a^2 \sin^2 2\varphi}}. \quad (24)$$

При $n=3$ залежність (14) приймає вигляд

$$\rho = R_0(1 + kP_3(\cos \varphi)), \quad (25)$$

$$\rho = \frac{a+2b}{3} \left(1 + \frac{a-b}{a+2b} (3\cos^2 \varphi - 1) \right). \quad (18)$$

Після спрощення формули (18) отримаємо залежність (19)

$$\rho = a\cos^2 \varphi + b\sin^2 \varphi \quad (19)$$

Рівняння (19) описує овал, який може утворитися при зношуванні поверхні порожньотілого кругового циліндра втулкою. Форма отриманого овалу нагадує форму еліпса, який можна задати рівнянням у полярній системі координат.

$$\rho = \sqrt{a^2 \cos^2 \varphi + b^2 \sin^2 \varphi}.$$

При $n=4$ залежність (14) можна записати у вигляді

$$\rho = R_0(1 + qP_4(\cos \varphi)), \quad (20)$$

$$\text{де } P_4(\cos \varphi) = \frac{1}{8}(35\cos^4 \varphi - 30\cos^2 \varphi + 3)$$

Для знаходження зв'язку параметрів R_0 і n з параметрами a і b овалу Касіні розглянемо значення ρ при $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ і результати подамо у вигляді системи (21)

$$\begin{cases} \sqrt{a^2 + b^2} = R_0(1 + q), \\ \sqrt{b^2 - a^2} = R_0\left(1 + \frac{3}{8}q\right). \end{cases} \quad (21)$$

Система (21) буде мати наступні розв'язки:

$$\begin{cases} q = \frac{8(\sqrt{a^2 + b^2} - \sqrt{b^2 - a^2})}{8\sqrt{b^2 - a^2} - 3\sqrt{a^2 + b^2}}, \\ R_0 = \frac{8\sqrt{b^2 - a^2} - 3\sqrt{a^2 + b^2}}{5}. \end{cases} \quad (22)$$

Залежність (20), що задана у полярній системі координат, з урахуванням параметрів поданих у вигляді системи (22), прийме наступний вигляд:

Поліном Лежандра $P_3(x)$ можна записати, як

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x). \quad (26)$$

Таким чином, співвідношення (25) матиме наступний вигляд

$$\rho = R_0 \left(1 + \frac{k}{2} (5\cos^3 \varphi - 3\cos \varphi) \right). \quad (27)$$

При $R_0 = 4$, $k = 0,5$ з формули (27) отримаємо наступну залежність

$$\rho = 4 \left(1 + \frac{1}{4} (5 \cos^3 \varphi - 3 \cos \varphi) \right). \quad (28)$$

Графік залежності (28) зображено на рис.3

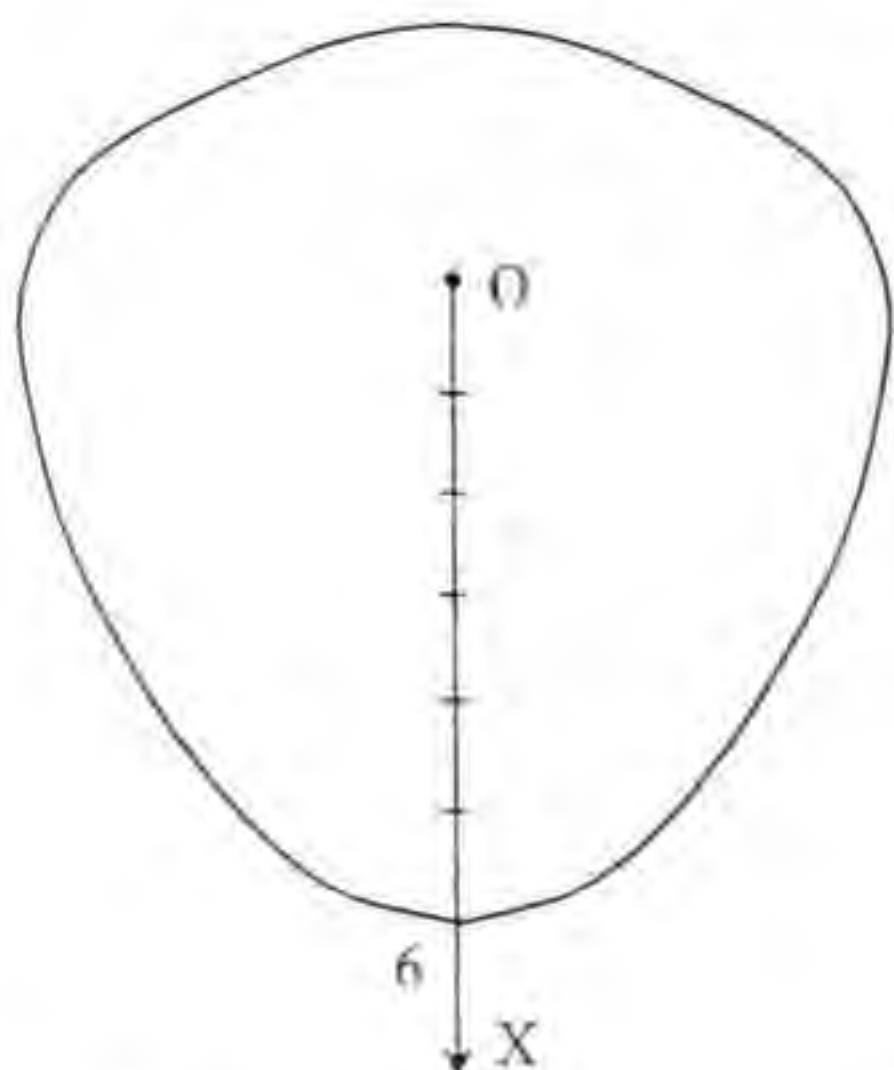


Рис.3 Графік перерізу порожньотілого циліндру при зношуванні його поверхні циліндричною втулкою (профіль поверхні можна задати за допомогою поліному Лежандра $P_3(\cos \varphi)$)

Розробимо механізм можливого моделювання виникнення шорсткості при дії сили тертя під час зношування внутрішньої поверхні циліндричних деталей з використанням поліномів Лежандра.

Список використаних джерел.

1. Когаев В.П., Дроздов Ю.Н. Прочность и износостойкость деталей машин. – М.: Высш. Шк., 1991. – 319с.
2. Галахов М.А., Усов П.П. Дифференциальные и интегральные уравнения математической теории трения. – М.: Наука, 1990. – 280с.
3. Галахов М.А., Усов П.П. Математические модели теории трения, смазки и износа // Математическое моделирование. Процессы в нелинейных средах. – М.: Наука, 1986. – 312 с.
4. Усов П.П. Внутренний контакт цилиндрических тел близких радиусов при изнашивании их поверхностей // Трение и износ. – 1985. – Т.6, № 3. – С.403-414.
5. Усов П.П., Галахов М.А. Контактные задачи с учётом износа для цилиндрических и сферических подшипников скольжения с тонким вкладышем // Машиностроение. – 1986. – № 3. – С. 81-88.

Наявність шорсткості із середньою висотою h нерівностей на внутрішній поверхні кругового циліндру, який взаємодіє з валом, можна описати формулою

$$\rho = R_0 + h \cos(q\varphi),$$

де $q = \frac{2\pi R_0}{h}$, R_0 - радіус кола, отриманого в

результаті перерізу циліндричної поверхні з площиною, що перпендикулярна до осі циліндра.

При наявності зносу внутрішньої поверхні циліндра у вигляді овалу в перерізі ортогональному до осі, наявність шорсткості можна описати рівнянням з використанням поліному Лежандра $P_n(\cos \varphi)$.

$$\rho = (R_0 + h \cos(q\varphi))(1 + mP_n(\cos \varphi))$$

Висновки. В роботі розглянуто залежність швидкості лінійного зносу поверхні порожньотілого циліндру круговим циліндричним валом від форми початкової поверхні та часу взаємодії.

Знайдені залежності компонент швидкості зношування даної циліндричної поверхні по осям Ox та Oy від кута та часу обертання.

Для описування форми зношених поверхонь деталей при певних умовах можна використовувати поліноми Лежандра, як математичну модель профілю поверхні контактуючих тіл.

Розроблено механізм можливого моделювання зміни шорсткості при дії сили тертя під час зношування циліндричних деталей з використанням поліномів Лежандра.

6. Усов П.П., Галахов М.А. Изнашивание жёстких цилиндрических тел. // Проблемы математики в физико-технических задачах. – М.: МФТИ, 1987. – С. 140-147.
7. Kubo M.J., Archard J.F. The properties of random surfaces of significance in their contact // Proc. Roy. Soc., Ser. A. – 1970. – V. 316, № 1524.
8. Хазов Б.Ф., Дидусев Б.А. Справочник по расчёту надёжности машин на стадии проектирования. – М.: Машиностроение. 1986. – 224с.
9. Когаев В.П., Махутов Н.А., Гусенков А.П. Расчёты деталей машин и конструкций на прочность и долговечность.: Справочник – М.: Машиностроение, 1985. – 224 с.
10. Дроздов Ю.Н., Павлов В.Г., Пучков В.Н. Трение и износ в экстремальных условиях: Справочник – М. Машиностроение, 1986. – 224с.

Надійшла до редакції 22.02.2010

УДК 517.98

О.В.Вятчанинов, аспірант

Сумовні зі степенем p рекурентні послідовності в банаховому просторі

У даній роботі розглядається рекурентна послідовність з операторнозначними коефіцієнтами. У залежності від властивостей операторів наведено умови її сумовності зі степенем p .

Ключові слова: замкнений оператор, сумовна зі степенем p рекурентна послідовність.

E-mail: laendol@rambler.ru

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н. М.О.Перестюк

1 Вступ

Нехай X — комплексний банахів простір з нормою $\|\cdot\|$. Зафіксуємо $p \in [1, +\infty)$ і визначимо $l_p(X)$ як простір послідовностей $\bar{x} = \{x_n : n \geq 1\}$ елементів з X , для яких $\|\bar{x}\|_p := (\sum_{n=1}^{\infty} \|x_n\|^p)^{1/p} < \infty$.

Відзначимо, що простір $l_p(X)$ з покомпонентним додаванням та множенням на комплексний скаляр і нормою $\|\cdot\|_p$ є комплексним банаховим простором.

Нехай A — замкнений оператор, що діє в X , з областю визначення $D(A)$. Розглянемо рекурентно задану послідовність

$$\begin{cases} x_0 = y_0, \\ x_{n+1} = Ax_n + y_{n+1}, \quad n \geq 0. \end{cases} \quad (1)$$

Позначимо $D^\infty = \bigcap_{n \geq 1} D(A^n)$. Введемо простір

$$W = \{u \in D^\infty \mid \|u\|_w = (\sum_{n \geq 0} \|A^n u\|^p)^{1/p} < \infty\}.$$

Надалі вважатимемо, що $W \neq \{\bar{0}\}$.

У даній статті досліджуються умови на оператор A , при виконанні яких виконується така умова.

O.V.Viatchaninov, PhD student

Summable with p -th power recurrent sequences in Banach space

The paper deals with recurrent sequence with operator coefficients.

It is shown its summability with p -th power depending on properties of operators.

Key Words: closed operator, summable with p -th power recurrent sequence.

Умова сумовності для рівняння (1).

Для довільної сумовної зі степенем p послідовності $\{y_n : n \geq 0\}$ із W відповідна їй послідовність (1) належить простору $l_p(X)$.

Аналогічний результат щодо обмеженості послідовності (1) отримано в роботі [1].

2 Рекурентна послідовність з одним операторним коефіцієнтом

Далі використовуються такі допоміжні твердження.

Лема 1. $(W, \|\cdot\|_w)$ — комплексний банахів простір.

Доведення цієї леми аналогічне доведенню леми 1 із [1].

Лема 2. Нехай A замкнений оператор. Простір $(W, \|\cdot\|)$ повний тоді і лише тоді, коли $\|\cdot\| \sim \|\cdot\|_w$, тобто

$$\forall x \in W : c_1 \|x\| \leq \|x\|_w \leq c_2 \|x\|,$$

з деякими сталими c_1, c_2 , такими, що $0 < c_1 \leq c_2$.

Доведення. Достатність доводиться аналогічно лемі 2 із [1].

Необхідність. Нехай $(W, \|\cdot\|)$ повний. Достатньо довести, що

$$\exists c_2 \geq 1 \forall x \in W : \|x\|_w \leq c_2 \|x\|.$$

Розглянемо оператор $\tilde{A}$ — звуження A на W . Тоді $\tilde{A}: W \rightarrow W$ і для довільного x із W виконується $\sum_{n \geq 0} \|A^n x\|^p < \infty$. Звідси $\sum_{n \geq 0} \|\tilde{A}^n x\|^p < \infty$, а також з урахуванням того, що $(W, \|\cdot\|)$ повний простір, за принципом рівномірної обмеженості $\{\|\tilde{A}^n\| : n \geq 0\}$ — обмежена послідовність.

Тому для спектрального радіуса $r(\tilde{A})$ оператора $\tilde{A}$ виконується нерівність $r(\tilde{A}) \leq 1$. Доведемо, що випадок $r(\tilde{A}) = 1$ неможливий.

Нехай $r(\tilde{A}) = 1$. Тоді

$$\exists \lambda \in \sigma(\tilde{A}), |\lambda| = 1, \exists \{x_m : m \geq 1\} \subset W :$$

$$\forall m \geq 1 \|x_m\| = 1, \|(\tilde{A} - \lambda \tilde{I})x_m\| \rightarrow 0, m \rightarrow \infty.$$

При фіксованому $k \geq 1$ виконується:

$$\begin{aligned} \|(\tilde{A}^k - \lambda^k \tilde{I})x_n\| &\leq \|\tilde{A}^{k-1} + \dots + \lambda^{k-2} \tilde{A} + \lambda^{k-1} \tilde{I}\| \times \\ &\times \|(\tilde{A} - \lambda \tilde{I})x_n\| \rightarrow 0, n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Звідси

$$\left| \|\tilde{A}^k x_n\| - \|\lambda^k x_n\| \right| \rightarrow 0, n \rightarrow \infty,$$

тобто для кожного $k \geq 1$ $\|\tilde{A}^k x_n\| \rightarrow 1, n \rightarrow \infty$.

Тому для довільного фіксованого $m \geq 1$ існує таке $n \geq 1$, що

$$\|\tilde{A}^k x_n\|^p > \frac{1}{2}, \quad 1 \leq k \leq 2m,$$

звідки $\sum_{k=1}^{\infty} \|\tilde{A}^k x_n\|^p \geq \sum_{k=1}^{2m} \frac{1}{2} = m$. Отже, оператор $C: W \rightarrow l_p(X)$, визначений за правилом $Cx = (x, \tilde{A}x, \dots, \tilde{A}^k x, \dots)$, є необмеженим. Також C є замкненим оператором, тому за теоремою про замкнений графік C не може бути визначеним на усьому просторі W . Протиріччя.

Оскільки $r(\tilde{A}) < 1$, то

$$\exists q \in (0, 1) \exists n_0 \in \mathbb{N} \forall n \geq n_0 :$$

$$\sum_{n \geq n_0} \|\tilde{A}^n\|^p < \sum_{n \geq n_0} q^{np} < \infty.$$

Тому

$$\forall x \in W : \|x\|_w^p \leq \left(\sum_{n \geq 0} \|\tilde{A}^n\|^p \right) \cdot \|x\|^p.$$

Лему 2 доведено.

Ідея щодо використання властивостей замкненого оператора C для доведення нерівності $r(\tilde{A}) < 1$ належить Г.Ю.Ющенко.

Нехай виконується умова сумовності для рівняння (1). Доведемо, що послідовність $\{\|\tilde{A}^n\| : n \geq 1\}$ обмежена. Нехай це не так. Тоді існує монотонно зростаюча послідовність $\{k_s : s \geq 1\} \subset \mathbb{N}$, а також послідовність $\{u_n : n \geq 1\} \subset W$, такі, що $\|u_n\| = 1$ для кожного $n \geq 1$ і

$$\begin{aligned} \|\tilde{A}^{k_1} u_1\| &> 1, \\ \|\tilde{A}^{k_s} u_s\| &> s^2 (1 + \|u_1\|_w + \frac{1}{2^2} \|u_2\|_w + \\ &+ \frac{1}{3^2} \|u_3\|_w + \dots + \frac{1}{(s-1)^2} \|u_{(s-1)}\|_w), \quad \forall s \geq 2. \end{aligned}$$

Покладемо

$$\begin{aligned} y_0 &= u_1, \\ y_{k_1+k_2+\dots+k_{n-1}+(n-1)} &= \frac{u_n}{n^2}, \quad n \geq 2, \\ y_j &= 0 \text{ для інших } j \in \mathbb{N}. \end{aligned} \quad (2)$$

Доведемо, що відповідна послідовності (2) згідно (1) послідовність $\{x_n : n \geq 0\}$ не належить простору $l_p(X)$.

Справді, $\|x_{k_1}\| > 1$ і для кожного $n \geq 2$

$$\begin{aligned} \|x_{k_1+k_2+\dots+k_n+(n-1)}\| &\geq \frac{1}{n^2} \|\tilde{A}^{k_n} u_n\| - \\ &- \|\tilde{A}^{k_1+\dots+k_{n-1}+(n-1)} u_1\| - \|\tilde{A}^{k_2+\dots+k_{n-1}+(n-2)} (\frac{u_2}{2^2})\| - \\ &- \dots - \|\tilde{A}^{k_{n-1}+k_n+1} (\frac{u_{n-1}}{(n-1)^2})\| \geq 1. \end{aligned}$$

Таким чином, у послідовності $\{x_n : n \geq 0\}$ міститься підпослідовність $\{x_{n_k} : k \geq 1\}$ така, що

$$\forall k \geq 1 : \|x_{n_k}\| \geq 1.$$

Протиріччя.

Оскільки послідовність $\{\|\tilde{A}^n\| : n \geq 1\}$ обмежена, то міркуючи, як і в лемі 2, отримаємо, що $r(\tilde{A}) < 1$ і простір $(W, \|\cdot\|)$ повний. Скориставшись також теоремою 1 із [2], робимо висновок, що справедлива така теорема.

Теорема 1. Умова сумовності для рівняння (1) виконується тоді і тільки тоді, коли:

1. простір $(W, \|\cdot\|)$ повний;
2. для звуження $\bar{A}$ оператора A на W виконується нерівність $r(\bar{A}) < 1$.

3 Узагальнення на випадок кількох операторних коефіцієнтів

Зафіксуємо $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$. Розглянемо послідовність

$$\begin{cases} x_0 = y_0, x_1 = y_1, \dots, x_{n-1} = y_{n-1}, \\ x_m = A_1 x_{m-1} + A_2 x_{m-2} + \dots + \\ + A_n x_{m-n} + y_m, m \geq n, \end{cases} \quad (3)$$

де $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ — лінійні обмежені оператори в X , $\{y_m : m \geq 0\}$ — сумовна зі степенем p послідовність із X . Для $\bar{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ покладемо $|\bar{x}| := \max\{\|x_1\|, \|x_2\|, \dots, \|x_n\|\}$. Тоді $(X^n, |\cdot|)$ — комплексний банахів простір.

Розглянемо лінійний обмежений оператор $T: X^n \rightarrow X^n$, який діє за правилом

$$T\bar{x} = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ I & \bar{0} & \bar{0} & \dots & \bar{0} \\ \bar{0} & I & \bar{0} & \dots & \bar{0} \\ \bar{0} & \bar{0} & I & \ddots & \bar{0} \\ \dots & \dots & \ddots & \bar{0} & \bar{0} \\ \dots & \dots & \dots & I & \bar{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Лема 3. Зафіксуємо набір $\{y_0, y_1, \dots, y_{n-1}\} \subset X$. Тоді послідовність

$$\begin{cases} x_0 = y_0, x_1 = y_1, \dots, x_{n-1} = y_{n-1}, \\ x_m = A_1 x_{m-1} + \dots + A_n x_{m-n}, m \geq n, \end{cases} \quad (4)$$

сумовна зі степенем p в X тоді і лише тоді, коли послідовність

$$\left\{ T^k \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ \vdots \\ y_0 \end{pmatrix} : k \geq 0 \right\} \quad (5)$$

сумовна зі степенем p в X^n .

Доведення.

За індукцією можна перевірити, що

$$T^k \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ \vdots \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{n-1+k} \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix}, k \geq 0.$$

Якщо послідовність (4) сумовна зі степенем p в X , то

$$\begin{aligned} \sum_{k \geq 0} \left| T^k \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ \vdots \\ y_0 \end{pmatrix} \right|^p &= \\ &= \sum_{k \geq 0} |\max\{\|x_{n-1+k}\|, \dots, \|x_k\|\}|^p \leq n \sum_{k \geq 0} \|x_k\|^p, \end{aligned}$$

бо кожен із елементів, на яких досягається максимум, не може мати більш, ніж n входжень в суму.

Навпаки, нехай (5) сумовна зі степенем p в X^n . Оскільки

$$\forall s \geq 0: \left| T^s \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ \vdots \\ y_0 \end{pmatrix} \right| = \max_{s \leq k \leq n-1+s} \|x_k\| \geq \|x_s\|,$$

$$\text{то } \sum_{s \geq 0} \|x_s\|^p \leq \sum_{s \geq 0} \left| T^s \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ \vdots \\ y_0 \end{pmatrix} \right|^p < \infty.$$

Лему доведено.

Визначимо таку послідовність в X^n :

$$\begin{cases} \bar{y}^{(0)} = \begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ \bar{0} \end{pmatrix}, \\ \bar{y}^{(k)} = \begin{pmatrix} y_k - \sum_{m=1}^k A_m y_{k-m} \\ 0 \\ \vdots \\ \bar{0} \end{pmatrix}, 1 \leq k \leq n-1, \\ \bar{y}^{(k)} = \begin{pmatrix} y_k \\ 0 \\ \vdots \\ \bar{0} \end{pmatrix}, k \geq n. \end{cases} \quad (6)$$

Розглянемо рекурентну послідовність

$$\bar{x}^{(0)} = \bar{y}^{(0)}, \bar{x}^{(k+1)} = T\bar{x}^{(k)} + \bar{y}^{(k+1)}, k \geq 0. \quad (7)$$

Із леми 3 випливає, що сумовність зі степенем p послідовності (3) еквівалентна сумовності зі степенем p послідовності (7) з "вхідною" послідовністю (6).

Відзначимо, що

$$\bar{x}^{(kn-1)} = T^{(k-1)n} \bar{y}_*^{(0)} + T^{(k-2)n} \bar{y}_*^{(1)} + \dots + T^{(k-3)n} \bar{y}_*^{(2)} + \dots + \bar{y}_*^{(k-1)}, \quad k \geq 2, \quad (8)$$

де

$$\bar{y}_*^{(0)} = \sum_{t=0}^{n-1} T^t \begin{pmatrix} y_{n-1-t} - \sum_{s=1}^{n-1-t} A_s y_{n-1-t-s} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\bar{y}_*^{(k)} = T^{n-1} \begin{pmatrix} y_{nk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + T^{n-2} \begin{pmatrix} y_{nk+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + \begin{pmatrix} y_{nk+n-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad k \geq 1. \quad (9)$$

Позначимо

$$W(T) := \{u \in X^n \mid \sum_{k \geq 0} |T^k u|^p < \infty\}.$$

Далі використовується така умова.

Умова сумовності для рівняння (3). Для довільної сумовної зі степенем p послідовності $\{y_m : m \geq 0\} \subset X$ такої, що послідовність (9) належить $W(T)$, визначена за правилом (3) послідовність $\{x_m : m \geq 0\}$ теж сумовна зі степенем p .

Справджується така лема.

Лема 4. Нехай послідовність (9) побудована за деякою послідовністю $\{y_k : k \geq 0\}$. Тоді ці послідовності одночасно сумовні зі степенем p .

Доведення. Нехай $\sum_{k \geq 0} \|y_k\|^p < \infty$. Покладемо

$$\bar{y}_* = \{\bar{y}_*^{(k)} : k \geq 1\},$$

$$\bar{v}_s = \left\{ T^s \begin{pmatrix} y_{nk+n-1-s} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} : k \geq 1 \right\}, \quad 0 \leq s \leq n-1.$$

Оскільки для кожного $0 \leq s \leq n-1$

$$\|\bar{v}_s\|_p^p = \sum_{k \geq 1} \left| T^s \begin{pmatrix} y_{nk+n-1-s} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right|^p \leq \|T^s\|^p \sum_{k \geq 1} \|y_{nk+n-1-s}\|^p,$$

то $\bar{v}_s \in l_p(X^n)$. Також $\bar{y}_* = \bar{v}_{n-1} + \bar{v}_{n-2} + \dots + \bar{v}_0$. Тому $\{\bar{y}_*^{(k)} : k \geq 0\}$ сумовна зі степенем p послідовність.

Нехай, навпаки, $\bar{y}_* \in l_p(X^n)$. Позначимо через P_k оператор, що діє на елемент $u \in X$ на першій координаті вектора $T^k \begin{pmatrix} u \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$, $0 \leq k \leq n-1$. Зокрема, $P_0 = I$, $P_1 = A_1$, $P_2 = A_1^2 + A_2$ і

$$\text{т.д. Тоді } T^k \begin{pmatrix} u \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_k u \\ P_{k-1} u \\ \vdots \\ P_0 u \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad \text{Враховуючи зображення (9), дістанемо, що для кожного } k \geq 1$$

$$\bar{y}_*^{(k)} = \begin{pmatrix} P_{n-1} y_{nk} + \dots + P_1 y_{nk+n-2} + P_0 y_{nk+n-1} \\ \dots \\ P_2 y_{nk} + P_1 y_{nk+1} + P_0 y_{nk+2} \\ P_1 y_{nk} + P_0 y_{nk+1} \\ P_0 y_{nk} \end{pmatrix}.$$

Для кожного фіксованого $k \geq 1$ справджуються нерівності

$$\|y_{nk}\| \leq |\bar{y}_*^{(k)}|,$$

$$\|y_{nk+1}\| \leq \|y_{nk+1} + P_1 y_{nk}\| + \|P_1 y_{nk}\| \leq |\bar{y}_*^{(k)}| (1 + \|P_1\|),$$

і т.д., тобто

$$\forall 0 \leq s \leq n-1 \exists C_s > 0 : \|y_{nk+s}\| \leq C_s |\bar{y}_*^{(k)}|.$$

Покладемо $\tilde{C} = \max\{C_1, C_2, \dots, C_{n-1}\}$. Тоді

$$\sum_{m \geq 0} \|y_m\|^p \leq \tilde{C} n \sum_{k \geq 0} |\tilde{y}_*^{(k)}|^p < \infty.$$

Лему 4 доведено.

Нехай $\{\tilde{y}_*^{(k)} : k \geq 0\}$ довільна сумовна зі степенем p послідовність із $W(T)$. Для неї однозначно визначається сумовна зі степенем p послідовність $\{y_k : k \geq 0\}$ така, що виконується (9). Більш точно, послідовність $\{y_k : k \geq 0\}$ розбивається на блоки довжини n , які формують елементи послідовності $\{\tilde{y}_*^{(k)} : k \geq 0\}$. (Наприклад, елементи $y_0, y_1, y_2, \dots, y_{n-1}$ однозначно визначають елемент $\tilde{y}_*^{(0)}$; це видно із зображення (9)). З леми 4 випливає, що існує взаємно однозначна відповідність між сумовними зі степенем p послідовностями із $W(T)$ та "вхідними" послідовностями $\{y_k : k \geq 0\}$, які задовольняють умову сумовності для рівняння (3).

Нехай виконується умова сумовності для рівняння (3) із довільною "вхідною" послідовністю $\{y_k : k \geq 0\}$. Тоді послідовність (3) сумовна зі степенем p . Це еквівалентно сумовності зі степенем p послідовності (7) із "вхідною" послідовністю (6), побудованою за $\{y_k : k \geq 0\}$. Тому сумовною зі степенем p буде, зокрема, підпослідовність (8). Якщо покласти $\tilde{t}^{(k)} = \tilde{x}^{((k+1)n-1)}$, $k \geq 0$, $T = T^n$, то внаслідок рівностей (8)

$$\begin{cases} \tilde{t}^{(0)} = \tilde{y}_*^{(0)}, \\ \tilde{t}^{(k+1)} = T\tilde{t}^{(k)} + \tilde{y}_*^{(k+1)}, \quad k \geq 0. \end{cases} \quad (10)$$

При цьому виконується таке твердження.

Лема 5. *Справджується рівність $W(T) = W(T)$.*

Доведення леми 5 тривіальне і тут не наводиться.

Також легко переконатись у правильності наступного твердження.

Лема 6. *Нехай V — лінійний обмежений оператор у комплексному банаховому просторі B зі спектральним радіусом $r(V)$. Тоді $r(V) < 1$ у тому і тільки в тому випадку, коли $r(V^n) < 1$.*

Враховуючи теорему 1, отримаємо наступне твердження.

Теорема 2. *Умова сумовності для рівняння (3) виконується тоді і тільки тоді, коли:*

1. *множина $W(T)$ є замкненою в $(X^n, \|\cdot\|)$;*
2. *для звуження $\tilde{T}$ оператора T на $W(T)$ виконується $r(\tilde{T}) < 1$.*

Висновки. У статті отримано необхідні і достатні умови сумовності зі степенем p рекурентних послідовностей (1) та (3). Твердження теореми 1 є новим і у випадку лінійного обмеженого оператора.

Список використаних джерел

1. М.Ф.Городній, О.В.Вятчанинов. Про обмеженість однієї рекурентної послідовності в банаховому просторі // УМЖ. — 2009. — том 61, N9.
2. О.В.Вятчанинов, М.Ф.Городній. Властивості розв'язків дискретної системи Вольтерри у банаховому просторі // Нелінійні коливання. — 2007. — том 10, N2.

Надійшла до редколегії 1.11.09

УДК 534.232

Юрій М. Дудзінський, д. ф.-м. н., професор

Анастасія В. Жукова, аспірант

Спектр акустичного сигналу струминних гідродинамічних випромінювачів при гідростатичному тиску

Розглянуто модель струминного гідродинамічного випромінювача протиточного типу. Досліджено залежність спектра акустичного сигналу від гідростатичного тиску. Виявлено перерозподіл енергії між гармоніками при зміні тиску. Проведено порівняння теоретичних і експериментальних результатів.

Ключові слова: гідродинамічний випромінювач (ГДВ), спектр звуку, гармоніки.

E-mail: dudzin@mail.ru

Статтю представив член редколегії д. ф.-м. н., професор Мелешко В. В.

1 Вступ

Останнім часом в ультразвукових і звукових технологіях спостерігається тенденція зниження концентрацій поверхово активних речовин, перехід на дистильовану воду, а ще переважніше – на хімічно нейтральні рідини (мінеральні масла, толуол і ін. органічні рідини) [1]. В останньому випадку робочі рідини також є діелектриками, і основну роль у руйнуванні плівок забруднювачів грає механічний вплив кавітації на поверхню твердого тіла. Однак у нейтральному середовищі необхідно підвищити ударний вплив колапсуючих парових каверн, наприклад, створюючи надлишковий статичний тиск у робочій ємності й одночасно збільшуючи інтенсивність акустичного поля [2, 3]. Інший спосіб полягає у створенні акустичних полів із двома або більше гармоніками різних частот [4 – 7]. При цьому використовуються декілька електроакустичних випромінювачів з різними резонансними частотами, кожний з яких збуджується індивідуальним генератором. Це призводить на практиці до ряду проблем і збільшує вартість апаратури, пропорційно кількості генераторів.

Перспективними є струминні гідродинамічні випромінювачі (ГДВ) акустичних хвиль, у яких частина кінетичної енергії зануреного струменя рідини перетворюється в енергію акустичних коливань [1, 3]. Умовно їх можна розділити на прямооточні [1, 8] і протиточні [3, 9]

Yuri M. Dudzinski, Doct. Sci (Phys.-Math.),
Professor

Anastasia V. Zhukova, PhD student

Spectrum of acoustic signal of jet's hydrodynamic radiators at hydrostatical pressure

The model of jet's hydrodynamic radiator of counter flow type is considered. Dependence of spectrum of acoustic signal is explored on hydrostatical pressure is researched. The redistribution of energy between harmonics at the change of pressure are founded. Comparison of theoretical and experimental results is conducted.

Key Words: hydrodynamic radiator (HDR), spectrum of sound, harmonics.

випромінювачі. Механізми гідродинамічного звукоутворення в обох системах ідентичні. До числа переваг цих джерел звуку можна віднести дешевину одержуваної енергії, простоту експлуатації, можливість роботи в агресивних середовищах, відсутність джерел високої напруги й шкідливих високочастотних електромагнітних полів. Відповідно до досліджень струминні ГДВ генерують у різних рідинах пружні імпульси експонентної форми високої інтенсивності [3, 10]. Частота нижчої (основної) гармоніки сигналу залежить від геометричних і гідродинамічних параметрів зануреної струминної оболонки [10]. Спектр цих акустичних хвиль складається з безлічі гармонійних складових, кратних і не кратних частот [11]. Цим, зокрема, можна пояснити більшу ефективність струминних ГДВ в порівнянні з резонансними електроакустичними випромінювачами, при однаковій інтенсивності акустичних полів. Представляє інтерес дослідити вплив гідростатичного тиску в рідині на спектр акустичного сигналу струминних ГДВ.

2 Модель ГДВ і постановка задачі

Розглянемо конструктивну схему ГДВ протиточного типу (рис. 1). Він складається із двох співвісних частин: колового сопла 1 і відбивача 2, що має на торці параболічну лунку. Занурений струмінь рідини колового перетину, що витікає із сопла 1 зі швидкістю v , досягає

відбивача 2 і відбивається у зворотну сторону, формуючись у струминну оболонку 3 за рахунок наявності в торці відбивача параболічної лунки 4. Струминна оболонка натікає на нижній зовнішній край сопла, у результаті чого може здобувати деяку поперечну нестійкість. Дійсно, натікаючи не симетрично на край сопла (прямокутний клин), струмінь може роздвоюватися. Одна частина струменя йде в зовнішню (відносно ГДВ) область, а інша у внутрішню область, утворюючи тороїдальний вихор 5 [12]. Завдяки цьому у внутрішній області накопичується надлишок середовища, що натискає на внутрішню поверхню струминної оболонки, змушуючи її відхилитися в зовнішню сторону й випустити цей надлишок середовища в зовнішню область. У внутрішній області має місце розвинена кавітація. Таким чином, у внутрішньої області існує двофазне середовище (рідина й парогазові мікропухирці.) Другою причиною поперечної нестійкості струминної оболонки може бути мінливість швидкості рідини, що витікає із сопла, що на практиці майже завжди має місце. Таким чином, є передумови для появи поперечних коливань струминної оболонки.

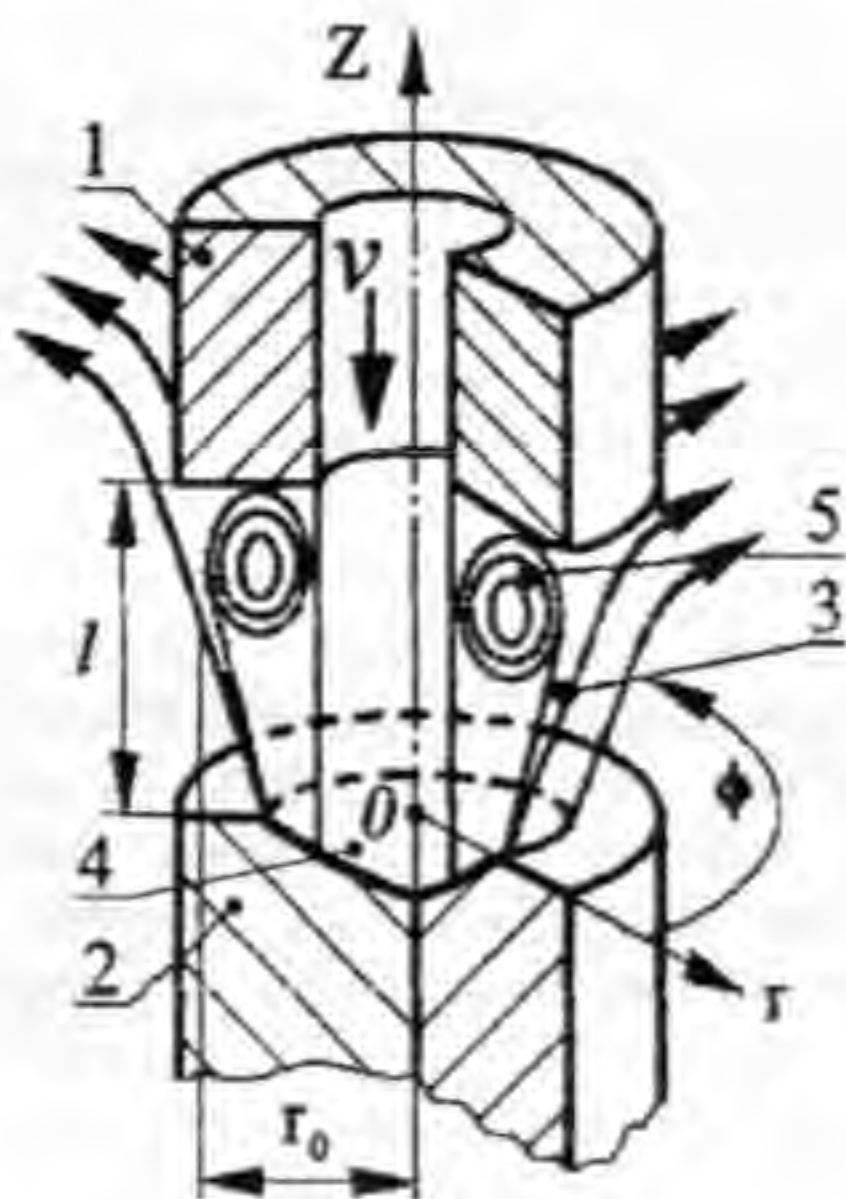


Рис. 1

В роботі [12] було розглянуто фізичну модель струминного ГДВ і оцінено механічні характеристики внутрішньої двофазної області розвинутої кавітації: процент газу, щільність, пружність, швидкість звуку. В роботі [11] було вирішено задачу вимушених коливань зануреної струминної оболонки й отримано вираження для

амплітуди коливань її вільного краю, як функцію геометричних і гідродинамічних параметрів струменя й властивостей рідини:

$$w = \frac{f_0 [\sin(kl) \operatorname{sh}(kl) + \cos(kl) - \operatorname{ch}(kl)]}{k^4 \sin(kl) \operatorname{sh}(kl)}, \quad (1)$$

$$k = \sqrt[4]{\frac{12(\rho r^2 \omega^2 - E)}{E h^2 r^2}},$$

де r, l, h – середній радіус, довжина і товщина струминної оболонки, ω – колова частота збудження, ρ, E – щільність і модуль пружності струминної оболонки [10]. В [11] було доведено, що модуль вираження (1) з достатньою точністю описує спектр звуку, генерованого ГДВ, а також проаналізовано вплив на нього геометричних параметрів струминної оболонки. В попередніх дослідженнях [8 – 10] показано, що модуль пружності струминної оболонки залежить від властивостей рідини й надлишкового статичного тиску (у порівнянні з атмосферою):

$$E = \frac{K_\infty}{3(1-2\nu)} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \chi_i (P^* + \Delta P_{\text{ст}})^i, \quad (2)$$

де P^* – межа міцності рідини на розрив (для води 0.51 МПа, для трансформаторного масла 0.39 МПа), $\Delta P_{\text{ст}}$ – надлишковий статичний тиск у герметичній ємності, χ_i – коефіцієнти, які практично не змінюються в широкому діапазоні температур [9, 11], але залежать від включень (мілко дисперсні тверді частинки, розчинений газ, зародки кавітаційних пухирців і ін.).

3 Аналіз результатів досліджень

З урахуванням (2), спектральна функція (1) має залежність від надлишкового статичного тиску. Тому було експериментально досліджено спектра акустичних сигналів струминних ГДВ при наявності в рідині тиску і порівняно з результатами розрахунків. ГДВ з відомою геометрією зануреної струминної оболонки містився у герметичній ємності, у якій можливо регулювати гідростатичний тиск $\Delta P_{\text{ст}}$, що вимірювався за допомогою манометру. Після встановлення $\Delta P_{\text{ст}}$ зміною витрати рідини насоса підбиралась оптимальна швидкість струменя на виході сопла $v_{\text{опт}}$ (рис. 1). При цьому рівень генерованого звуку, що вимірювався каліброваним гідрофоном, має максимальний

рівень. Сигнал з гідрофону надходив до вольметра, осцилоскопа й аналізатора спектру звукових і ультразвукових частот.

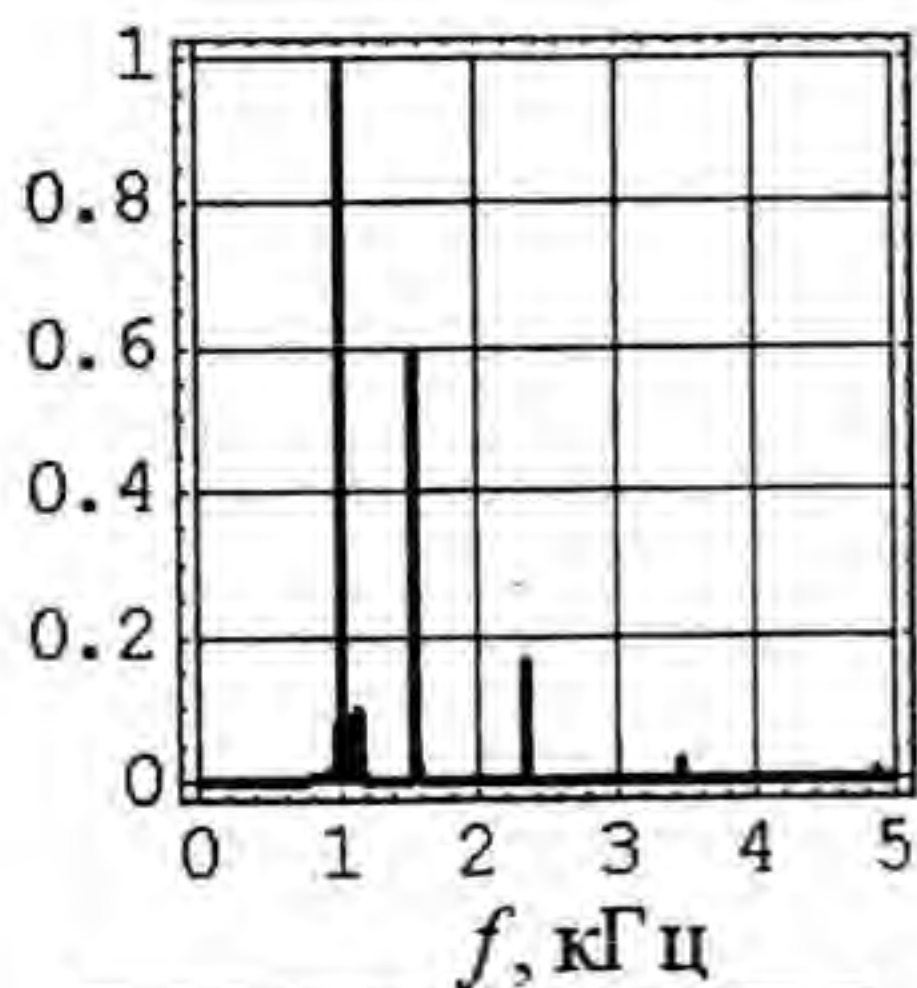


Рис. 2 Теоретичний й експериментальний спектри звуку струминного ГДВ

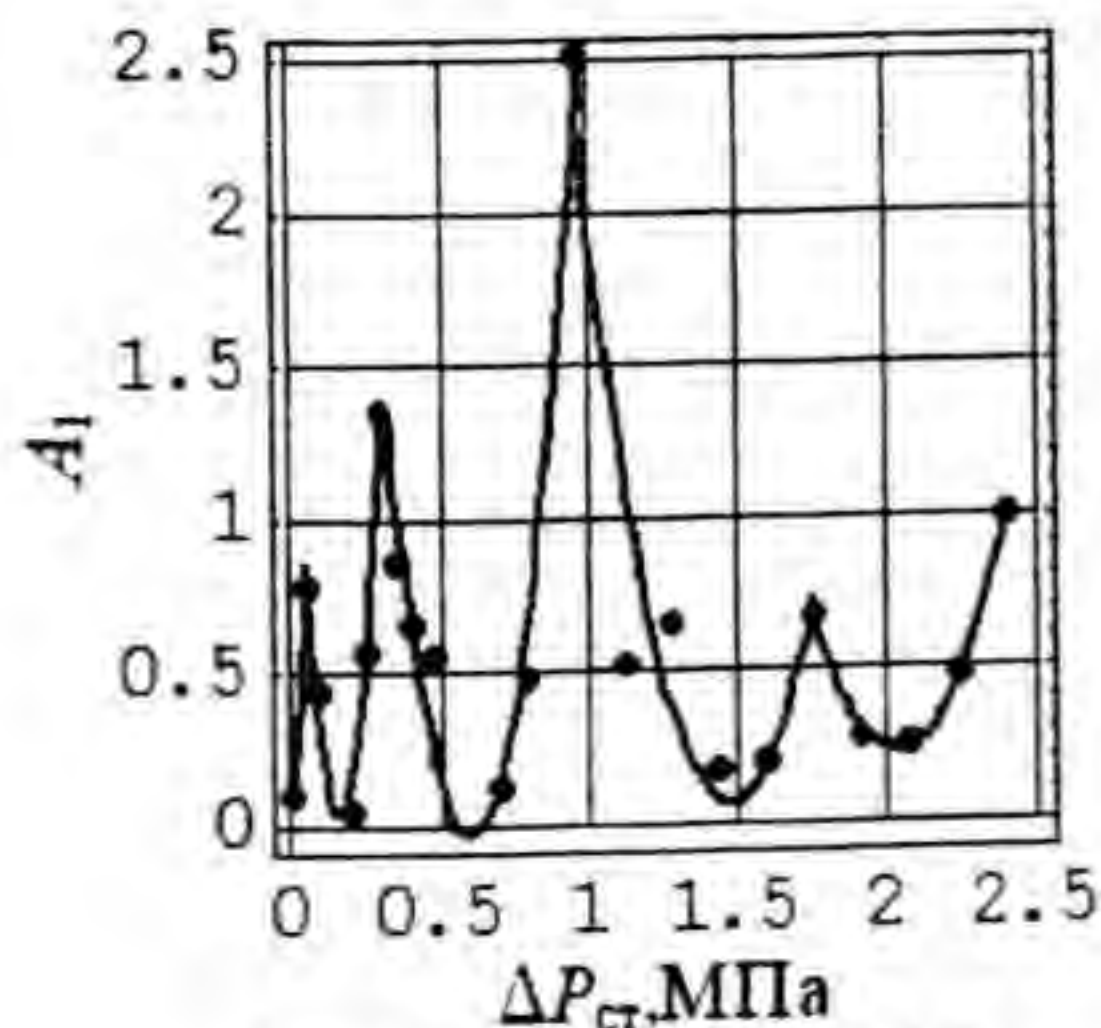


Рис. 3 Рівень першої гармоніки

На рис. 2 показано результати розрахунку й експериментального спостереження спектру

звуку струминного ГДВ за умов відсутності надлишкового статичного тиску ($\Delta P_{\text{ст}} = 0$). У спектрі сигналу виділяються п'ять спектральних складових некрatних частот: основної (A_0) (найнижчої частоти) і чотирьох вищих частот ($A_1 \dots A_4$). Стільки гармонік спостерігається для статичного тиску в рідині з діапазону значень $\Delta P_{\text{ст}} = [0 \dots 2.5]$ МПа. Аналіз експериментальних і чисельних результатів виявив, що зі зміною статичного тиску в рідині періодично змінюється рівень спектральних складових звуку, генерованого струминними ГДВ (рис. 3 ... рис. 6). Точки отримано з експериментальних спектрограм, лінії – з теорії.

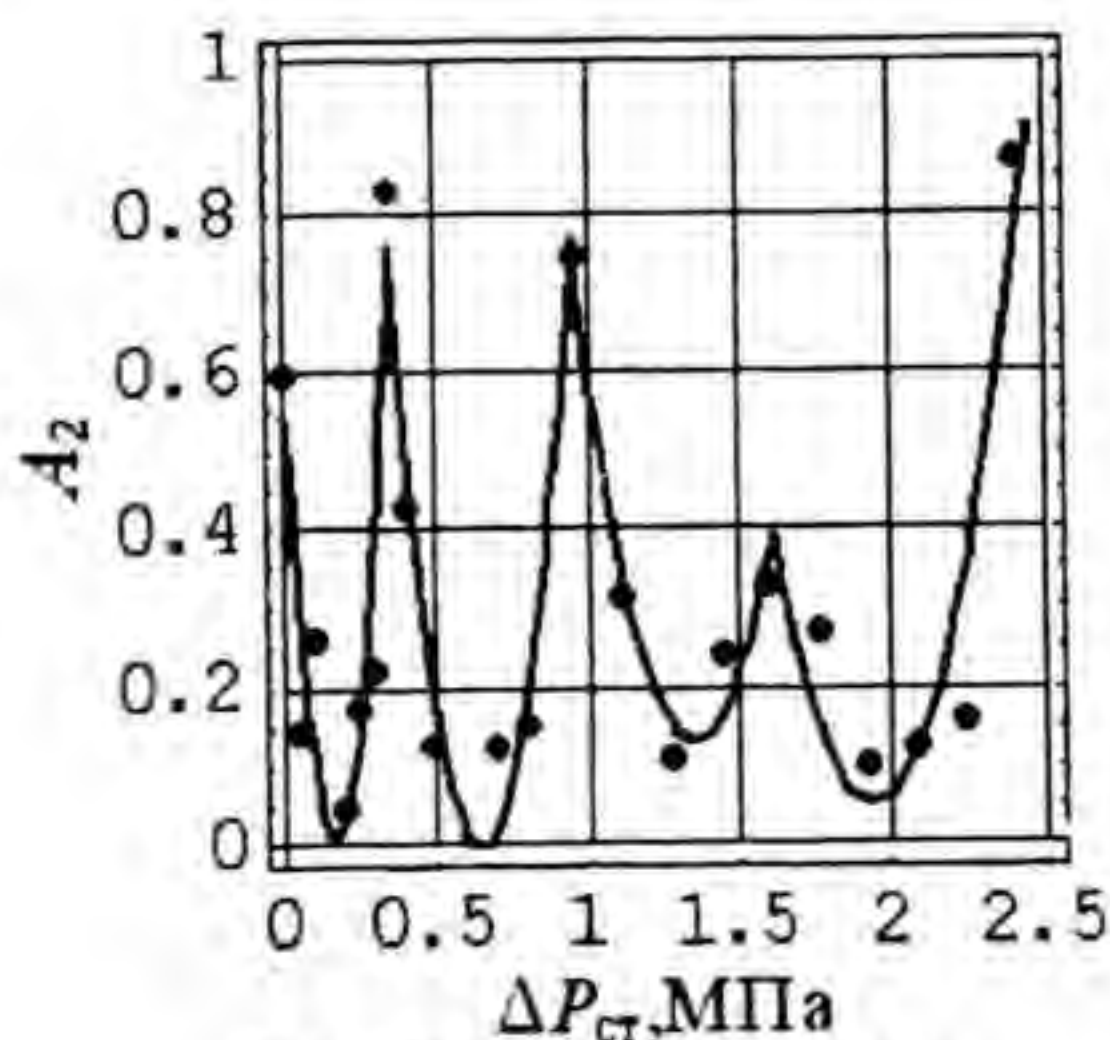


Рис. 4 Рівень другої гармоніки

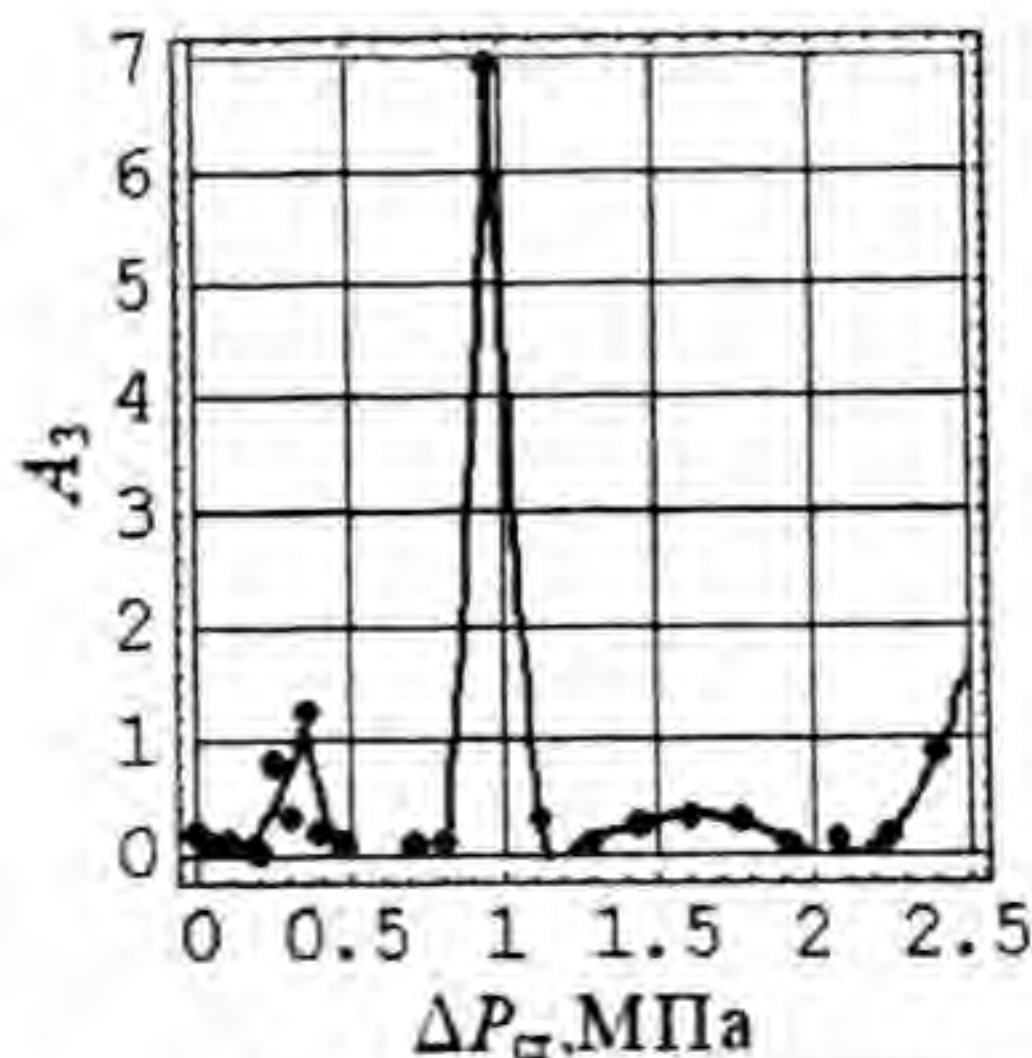


Рис. 5 Рівень третьої гармоніки

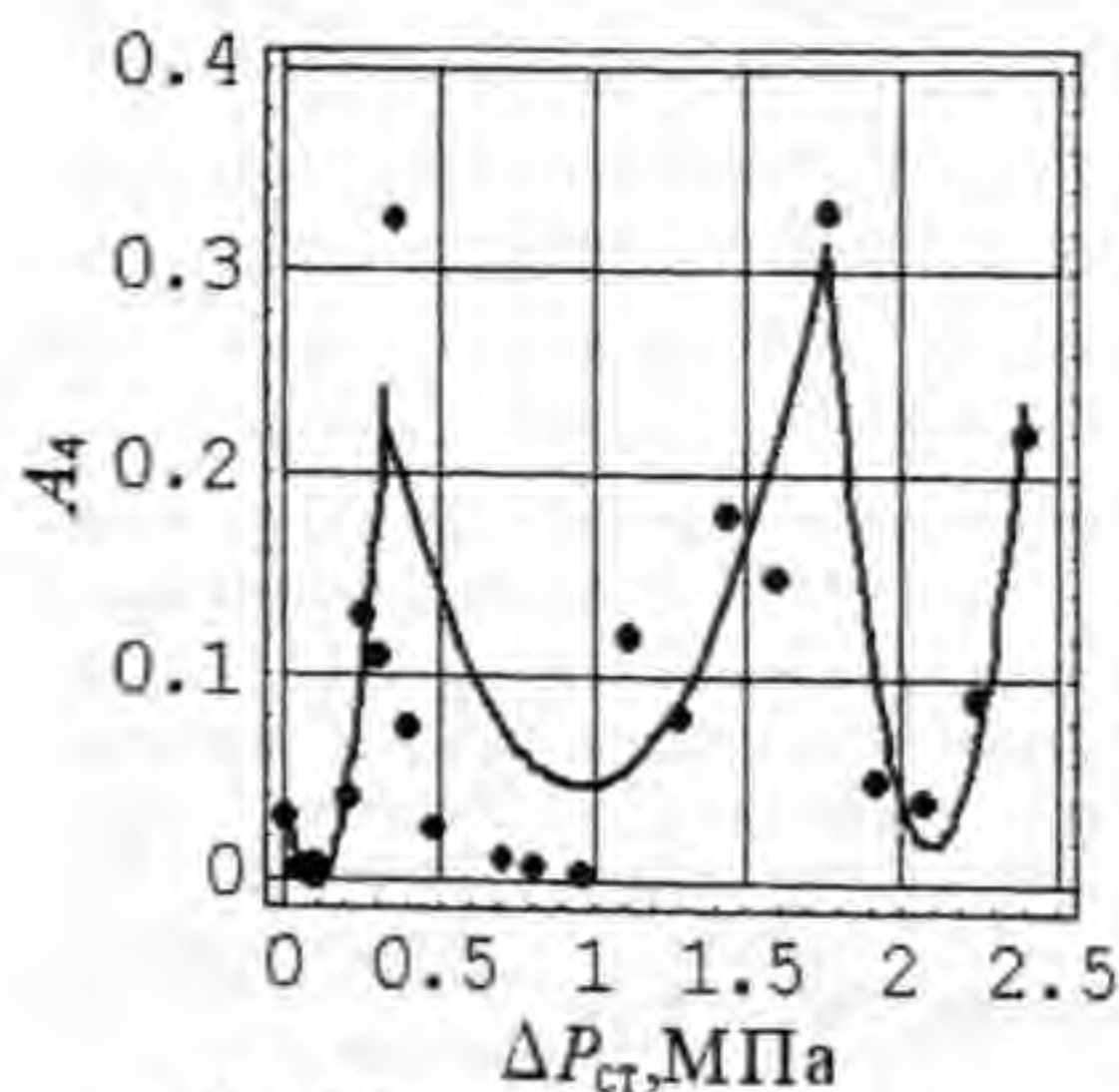


Рис. 6 Рівень четвертої гармоніки

Максимального рівня гармоніки ($A_1 \dots A_4$) досягають за надлишкового статичного тиску $\Delta P_{ст} = \{0.4; 1.0; 1.6; 2.4\}$ МПа, а мінімального – за $\Delta P_{ст} = \{0.2; 0.6; 1.3; 2.1\}$ МПа. При цьому, якщо рівень парних гармонік ($A_2; A_4$) не перевищує рівень основної (A_0) (рис. 4, рис. 6), то непарних – перевищує у декілька разів (рис. 3, рис. 5).

4 Висновки

1. Виявлено перерозподіл енергії звуку ГДВ між його гармоніками при зміні статичного тиску в рідині.
2. Формула для спектру звуку досить точно описує чотири гармоніки: основну (найнижчу) й перші три з вищих.

Список використаних джерел

1. Максимов В.Г. Очистка деталей автомобилей с использованием гидродинамических излучателей / В.Г. Максимов, О.В. Сухарьков, А.О. Сухарьков // Тр. Одес. политехн. ун-та. – 2002. – 1 (17). – С. 65-68.
2. Dezhkunov N.V. Enhancement of the Conversion and Concentration of Energy in a Multibubble Cavitation Zon / N.V. Dezhkunov, A. Francescutto, P. Ciuti // 16th International Symposium on Nonlinear Acoustics. – Moscow, August 19 – 23, 2002. – P. 919-926.
3. Дудзинский Ю.М. Ближнее поле осесимметричного гидродинамического излучателя / Ю.М. Дудзинский / Ю.М. Дудзинский // Акуст. вісник. – 2004. – 7, №4. – С. 48-51.

4. Mettin R. Acoustic Cavitation Structures and Simulations by a Particle Model / R. Mettin, S. Luther, C.-D. Ohl, W. Lauterborn // Ultrason. Sonochem. – 1999. – 6. – P. 25-29.
5. Costes S. Characterization of efficiency of ultrasonic equipment: experimental results of different kinds of transducers / S. Costes, P. Tierce // Proceedings of the Third Meeting on the Applications of Power Ultrasound in Physical and Chemical Processing. – Paris, 2001. – P. 137-142.
6. Voronin D.V. Bimodal bubble cluster as a result of bubble Fragmentation in a Bipolar Acoustic Pulse / D.V. Voronin, G.N. Sankin, V.S. Teslenko, R. Mettin, W. Lauterborn // 16th International Symposium on Nonlinear Acoustics. – Moscow, August 19 – 23, 2002. – P. 931-934.
7. Shimada M. Dynamics of cloud cavitation and cavitation Erosion / M. Shimada, T. Kobayashi, Y. Matsumoto (ASME FEDSM 99 – 6775, 1999).
8. Дудзинский Ю.М. Динамика затопленной осесимметричной кольцевой струи / Ю.М. Дудзинский // Доповіді НАН України. – 2006. – №1. – С. 46-51.
9. Дудзинский Ю.М. Вынужденные колебания осесимметричной затопленной струйной оболочки / Ю.М. Дудзинский, В.Г. Попов // Прикл. механика. – 2004. – 40, №12. – С. 92-98.
10. Дудзинський Ю.М. Моделі акустогідродинамічних сенсорів порога кавітації рідини / Ю.М. Дудзинський // Мат. методи та фізико-мех. поля. – 2005. – 48, №4. – С. 199-204.
11. Дудзинський Ю.М. Динаміка струминної оболонки і спектр акустичного сигналу / Ю.М. Дудзинський // Вісник Київськ. нац. унів. ім. Тараса Шевченка. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2006. – № 3. – С. 89-97.
12. Вовк И.В. О возможном механизме автоколебаний в струйных гидродинамических излучателях с развитой кавитацией / И.В. Вовк, В.Т. Гринченко, Ю.М. Дудзинский // Акуст. вісник. – 2008. – 11, №2. – С. 16-23.

Надійшла до редколегії 12.04.2010

УДК 539.3

Тетяна Л. Єфімова, к.ф.-м.н., старший науковий співробітник

Дослідження вільних неосесиметричних коливань ортотропних та неоднорідних циліндрів з застосуванням метода сплайн-апроксимації

Досліджуються вільні неосесиметричні коливання ортотропних та неоднорідних циліндрів при різних граничних умовах на основі тривимірної теорії пружності. Для розрахунку частот застосовано чисельно-аналітичний підхід, який базується на застосуванні сплайн-апроксимації та методу дискретної ортогоналізації разом з методом покрокового пошуку.

Ключові слова: ортотропний та неоднорідний порожнистий циліндр, неосесиметричні коливання, тривимірна теорія пружності, сплайн-апроксимація.

E-mail: Efimovatl@yandex.ru

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

1 Вступ

Дослідження динамічних характеристик анізотропних циліндрів скінченої довжини має велике значення для подальших фундаментальних досліджень та вирішення технічних проблем [3]. В даній статті розглядаються вільні неосесиметричні коливання ортотропних порожнистих циліндрів з різними граничними умовами на торцях з застосуванням тривимірної теорії пружності. Розв'язання таких задач пов'язано зі значними труднощами, обумовленими складністю системи диференціальних рівнянь в частинних похідних та необхідністю задовольняти граничні умови на поверхнях, що обмежують пружне тіло. Для розв'язання поставленої задачі запропоновано чисельно-аналітичний підхід, який базується на зведенні двовимірної крайової задачі до системи звичайних диференціальних рівнянь з допомогою застосування методів сплайн - апроксимації в одному з координатних напрямків та колокації. Отримана одновимірна крайова задача на власні значення розв'язує-

Tatiana L. Efimova, PhD (Phys.-Math.), senior researcher

Investigation of natural non-axisymmetric vibrations of orthotropic and homogeneous cylinder on the basis of spline-approximation method

The problem on natural nonaxisymmetric vibrations of orthotropic and inhomogeneous hollow cylinder under various boundary conditions of its end-faces on the basis of 3-D theory of elasticity is considered. The numerically-analytical method is developed based on using the spline-approximation and the discrete-orthogonalization methods.

Key Words: orthotropic and inhomogeneous hollow cylinder, nonaxisymmetric vibrations, 3-D theory of elasticity, spline-approximationn.

ться стійким методом дискретної ортогоналізації разом з методом покрокового пошуку.

2 Постановка задачі

Розглянемо в циліндричній системі координат циліндрично ортотропний порожнистий циліндр довжини L постійної товщини з внутрішнім радіусом $R-H$ і зовнішнім радіусом $R+H$ (R – радіус серединної поверхні, H – товщина циліндра). Вихідні рівняння теорії пружності для задачі про вільні неосесиметричні коливання такого циліндра мають вигляд: співвідношення Коши

$$\begin{aligned} e_r &= \frac{\partial u_r}{\partial r}; & e_\theta &= \frac{1}{r} \left(u_r + \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right); \\ e_z &= \frac{\partial u_z}{\partial z}; & 2e_{\theta z} &= \frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta}; \\ 2e_{rz} &= \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}; \\ 2e_{r\theta} &= \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{1}{r} u_\theta + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}; \end{aligned} \quad (1)$$

узагальнений закон Гука для ортотропного тіла

$$\begin{aligned}\sigma_z &= \lambda_{11}e_z + \lambda_{12}e_\theta + \lambda_{13}e_r; \\ \sigma_\theta &= \lambda_{12}e_z + \lambda_{22}e_\theta + \lambda_{23}e_r; \\ \sigma_r &= \lambda_{13}e_z + \lambda_{23}e_\theta + \lambda_{33}e_r; \\ \sigma_{r\theta} &= \lambda_{44}e_{r\theta}; \quad \sigma_{rz} = \lambda_{55}e_{rz}; \\ \sigma_{\theta z} &= \lambda_{66}e_{\theta z},\end{aligned}\quad (2)$$

де елементи матриці жорсткості $\lambda_{ij} = \lambda_{ij}(r, z)$ є неперервними і диференційованими функціями координат r і z ;

рівняння руху

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} &= \rho \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2}; \\ \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_{\theta z}}{\partial z} + 2 \frac{\sigma_{r\theta}}{r} &= \rho \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \frac{\sigma_{rz}}{r} &= \rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2},\end{aligned}\quad (3)$$

де t – часова координата, $u_r(r, \theta, z, t)$, $u_\theta(r, \theta, z, t)$, $u_z(r, \theta, z, t)$ – проекції повного переміщення точок циліндра в напрямках, дотичних до координатних ліній; e_r, e_θ, e_z – відносні лінійні деформації в напрямках координатних ліній; $e_{\theta z}, e_{rz}, e_{r\theta}$ – деформації зсуву, $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z, \sigma_{\theta z}, \sigma_{rz}, \sigma_{r\theta}$ – напруження; густина матеріалу циліндра $\rho(r, z)$ неперервна функція координат r і z .

На внутрішній і зовнішній бічних поверхнях циліндра $r = R - H$ і $r = R + H$ у випадку відсутності напружень граничні умови приймають вигляд

$$\begin{aligned}\sigma_r(r, \theta, z, t) &= 0, \quad \sigma_{r\theta}(r, \theta, z, t) = 0, \\ \sigma_{rz}(r, \theta, z, t) &= 0.\end{aligned}\quad (4)$$

На торцях $z = 0$ і $z = L$ розглянемо такі граничні умови

$$1) \quad \sigma_r = 0, \quad u_\theta = 0, \quad u_r = 0, \quad \text{або} \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \quad u_\theta = 0, \quad u_r = 0;\quad (5)$$

$$2) \quad \sigma_{rz} = 0, \quad \sigma_{\theta z} = 0, \quad u_z = 0, \quad \text{або} \quad \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial u_\theta}{\partial z} = 0, \quad u_z = 0;\quad (6)$$

$$3) \quad u_r = 0, \quad u_\theta = 0, \quad u_z = 0.\quad (7)$$

Оскільки всі точки циліндра коливаються гармонічно з частотою ω , а також в силу періодичності функцій, що розглядаються, по координаті θ , переміщення можна представити у вигляді (надалі знак "о" опускається).

$$u_r(r, \theta, z, t) = \hat{u}_r(r, z) \cos n\theta \exp(i\omega t);$$

$$u_\theta(r, \theta, z, t) = \hat{u}_\theta(r, z) \sin n\theta \exp(i\omega t); \quad (8)$$

$$u_z(r, \theta, z, t) = \hat{u}_z(r, z) \cos n\theta \exp(i\omega t).$$

Вибравши за невідомі функції компоненти вектора переміщення $u_r(r, z)$, $u_\theta(r, z)$, $u_z(r, z)$, розв'язувальну систему рівнянь у частинних похідних можна записати у вигляді [5]

$$L_i \bar{g} = 0, \quad (9)$$

де L_i – лінійні диференціальні оператори другого порядку, а $\bar{g} = \{u_r(r, z), u_\theta(r, z), u_z(r, z)\}^T$.

Граничні умови (4) на бічних поверхнях циліндра при $r = R \pm H$, виражені через переміщення, приймають вигляд [5]

$$T_i \bar{g} = 0, \quad (10)$$

де T_i – лінійні диференціальні оператори першого порядку. Система рівнянь (9) разом з відповідними граничними умовами (5), (6), або (7) та (10) утворюють двовимірну крайову задачу.

3 Метод розв'язання

Для розв'язування двовимірної задачі на власні значення застосуємо метод сплайн-апроксимації. Розв'язок задачі (11) подамо у вигляді

$$\begin{aligned}u_r(r, z) &= \sum_{i=0}^N u_{ri}(r) \varphi_{1i}(z); \\ u_\theta(r, z) &= \sum_{i=0}^N u_{\theta i}(r) \varphi_{2i}(z); \\ u_z(r, z) &= \sum_{i=0}^N u_{zi}(r) \varphi_{3i}(z);\end{aligned}\quad (11)$$

У виразі (11) $u_{ri}, u_{\theta i}, u_{zi}$ – невідомі функції, $\varphi_{ji}(z)$ ($j = 1, 2, 3$; $i = 0, \dots, N$) – лінійні комбінації В-сплайнів третього степеня на рівномірній сітці, що задовольняють задані граничні умови на краях, причому для умов шарнірного обпирання та жорсткого закріплення торців функції $\varphi_{2i}(z)$ та $\varphi_{3i}(z)$ однакові, оскільки в цих випадках $u_r = 0$, та $u_\theta = 0$, на торцях.

Підставляючи вирази (11) у розв'язувальні рівняння (9) і граничні умови (10), вимагаємо, щоб отримана система і граничні умови точно виконувались в $\bar{N} = N + 1$ точці колокації

$\xi_k \in [0, L]$, $k = \overline{0, N}$. Вибір точок колокації детально описано в роботі [5]. Як результат отримуємо одновимірну крайову задачу, яку можна подати у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{Y}}{dr} &= A(r, \omega)\bar{Y}, \\ B_1\bar{Y} &= \bar{0} \quad \text{для } r = R - H \\ B_2\bar{Y} &= \bar{0} \quad \text{для } r = R + H \end{aligned} \quad (12)$$

де $\bar{Y} = \{u_r, u_r', u_\theta, u_\theta', u_z, u_z'\}$, $\bar{u}_r = \{u_{r0}, u_{r1}, \dots, u_{rN}\}$, $\bar{u}_\theta = \{u_{\theta0}, u_{\theta1}, \dots, u_{\theta N}\}$, $\bar{u}_z = \{u_{z0}, u_{z1}, \dots, u_{zN}\}$, A – квадратна матриця порядку $6(N+1) \times 6(N+1)$, B_1 и B_2 – прямокутні матриці граничних умов порядку $3(N+1) \times 6(N+1)$. Одновимірною крайовою задачею (12) на власні значення розв'язується стійким чисельним методом дискретної ортогоналізації разом з застосуванням метода покрокового пошуку [1, 2, 4, 5].

4 Результати розрахунків

Для оцінки точності та достовірності результатів розрахунків по запропонованій методиці розв'язувалась задача про вільні коливання циліндрів з шарнірно опертими торцями. Порівняння перших безрозмірних частот $\bar{\omega}_1 = \omega_1 \frac{h}{\pi} \sqrt{\rho/G}$ коливань циліндра з коефіцієнтом Пуассона $\nu = 0.3$, $h/R = 1$, отриманих методом сплайн – колокації (МСК), та результатів, отриманих іншими методами для різних h/L при $h = 2H$, $n = 1$ наведено в таблиці 1. Кількість точок колокації $N = 30$.

Таблиця 1

H/L	Арменакас[6], $\bar{\omega}_1$	Лой, Лем [7], $\bar{\omega}_1$	МСК $\bar{\omega}_1$
0.1	0.03563	0.03563	0.03563
0.2	0.11368	0.11368	0.11368
0.4	0.29836	0.29836	0.29836
1.	0.86589	0.86618	0.86589

Розв'язувалась задача про вільні коливання ізотропного циліндра з різними граничними умовами на торцях. Проводилося порівняння (рис.1) трьох частот $\bar{\omega}_i = \omega_i \frac{h}{\pi} \sqrt{\rho/G}$ коливань ізотропного циліндра з $\nu = 0.3$, $h/R = 0.25$, $h/L = 0.1$ для різних значень коефіцієнта n хвилеутворення в напрямку координати θ у випадках різних граничних умов на торцях $z = 0, L$

($S - S$ – шарнірно оперті торці, $C - C$ – жорстко закріплені торці).

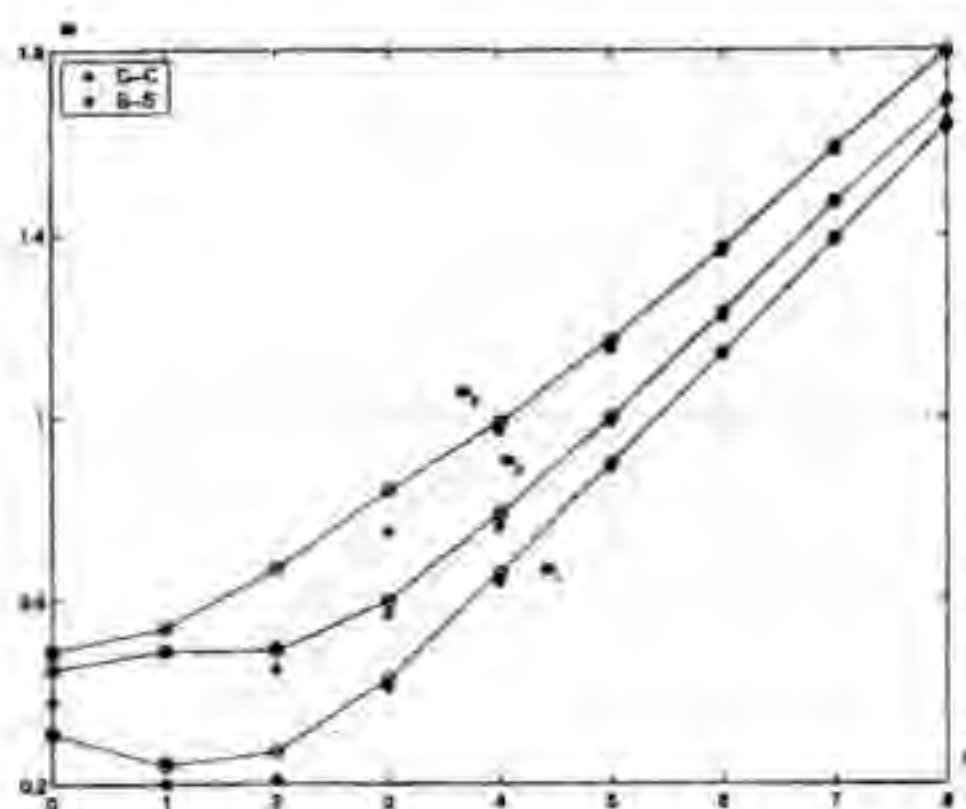


Рис. 1 Залежність перших трьох частот ω_i від n для ізотропного циліндра при різних граничних умовах на торцях

Зі збільшенням n до значення $n = 4$ частоти $\bar{\omega}_i$, що відповідають різним граничним умовам, починають мало відрізнятися, хоча зберігається те, що частоти для циліндра з жорстко закріпленими торцями лежать вище, ніж відповідні частоти для циліндра з шарнірно опертими торцями.

Досліджувалися вільні коливання ортотропних циліндрів з різними граничними умовами на торцях. Проводилося порівняння (рис.2) трьох перших частот $\bar{\omega}_i = \omega_i H \sqrt{\rho/G_0}$ коливань ортотропного циліндра з $h/R = 0.25$, $h/L = 0.1$ та механічними параметрами $G_0 = 10^4$ МПа, $E_r = 0.42G_0$, $E_\theta = 1.31G_0$, $E_z = 1.79G_0$, $\nu_{z\theta} = 0.15$, $\nu_{r\theta} = 0.31$, $\nu_{rz} = 0.08$, $G_{\theta z} = 0.28G_0$, $G_{r\theta} = G_{zr} = 0.24G_0$ (E_r, E_θ, E_z – модулі пружності в напрямках r, θ, z відповідно, $G_{\theta r}, G_{rz}, G_{z\theta}$ – модулі зсуву, $\nu_{\theta r}, \nu_{rz}, \nu_{z\theta}$ – коефіцієнти Пуассона) для різних значень коефіцієнта n хвилеутворення в напрямку координати θ у випадках різних граничних умов на торцях $z = 0, L$ ($S - S$ – шарнірно оперті торці, $C - C$ – жорстко закріплені торці).

При значеннях коефіцієнта хвилеутворення $n \geq 4$ спостерігається аналогічна випадку ізотропного циліндра мала відмінність частот $\bar{\omega}_i$, що відповідають різним граничним умовам.

Вивчався вплив неоднорідності матеріалу на частоти коливань порожнистого циліндра з параметрами $\nu = 0.3$, $h/R = 0.25$, $h/L = 0.1$, $\rho = \text{const}$. Модуль Юнга вибирався у вигляді

$$E(r, z) = \left(\alpha \left(\frac{6z^2}{L^2} - \frac{6z}{L} + 1 \right) + 1 \right) E_0.$$

(При цьому середній модуль Юнга залишається постійним і дорівнює E_0 для будь-яких значень параметра α). На рис. 3 представлено залежність перших трьох безрозмірних частот $\bar{\omega}_i = \omega_i H \sqrt{\rho/G_0}$, $E_0 = 2(1 + \nu)G_0$ для $\alpha = 0$ (однорідний циліндр) та $\alpha = 0.3$ для різних значень коефіцієнта хвилеутворення n в напрямку координати θ у випадках жорстко закріплених торців. Хоча для неоднорідного циліндра асимптотична поведінка частот при збільшенні n аналогічна випадку однорідного ізотропного циліндра, але відмінність перших частот при $n = 5$ досягає 4.5%.

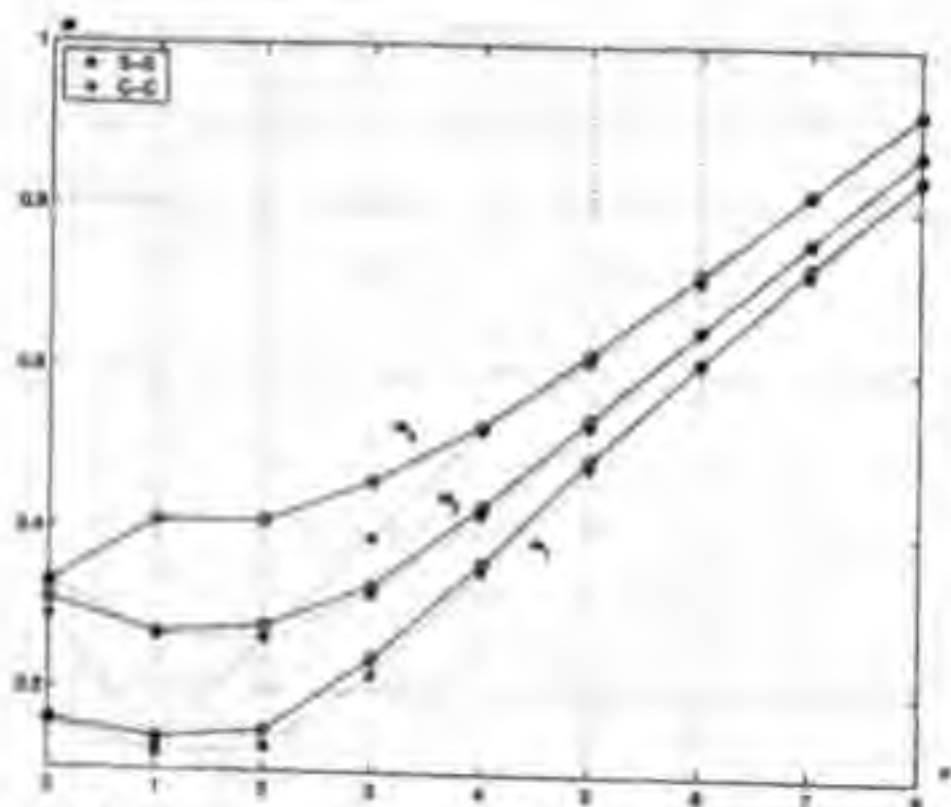


Рис. 2 Залежність перших трьох частот ω_i від n для ортотропного циліндра при різних граничних умовах на торцях

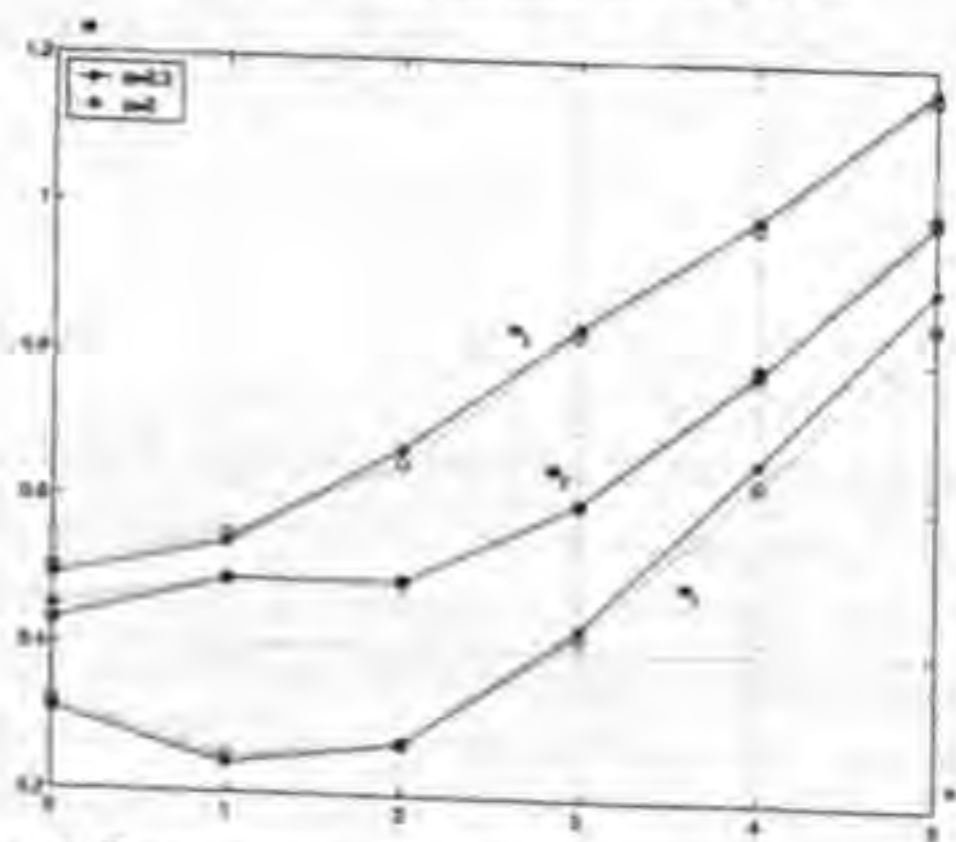


Рис. 3 Залежність перших трьох частот ω_i від коефіцієнта n для однорідного ($\alpha = 0$) та неоднорідного ($\alpha = 0.3$) циліндра з жорстко закріпленими торцями

5 Висновки

1) Розроблено чисельно-аналітичну методику розрахунку частот вільних неосесиметричних коливань порожнистих ортотропних та неоднорідних циліндрів з застосуванням метода сплайн-апроксимації.

2) З використанням запропонованої методики досліджено поведінку частот при збільшенні значень коефіцієнта n хвилеутворення в напрямку координати θ у випадках різних граничних умов на торцях (шарнірно обперті та жорстко закріплені торці).

3) При збільшенні коефіцієнта хвилеутворення по окружній координаті відповідні частоти, що відповідають різним граничним умовам, мало відрізняються. Це спостерігається як для однорідних ізотропних та ортотропних, так і для неоднорідних циліндрів зі змінним по z модулем Юнга.

Список використаних джерел

1. Григоренко А.Я., Ефимова Т.Л. Применение метода сплайн-коллокации для решения задач об осесимметричных свободных колебаниях толстостенных ортотропных цилиндров // Прикл. механика. – 2008. – 44, №10. – С.74 – 85.
2. Григоренко А.Я., Ефимова Т.Л. Об одном подходе к решению о свободных колебаниях сплошного неоднородного цилиндра конечной длины // Доповіді Національної академії наук України. – 2009. – №9. – С.67 – 72.
3. Гринченко В.Т., Мелешко В.В. Гармонические колебания и волны в упругих телах. – Киев: Наукова думка, 1981. – 284с.
4. Ефимова Т.Л. Решение задач о свободных крутильных колебаниях толстостенных ортотропных неоднородных цилиндров // Матем. методи та фізико-механічні поля. – 2008. – 52, №1. – С. 92 – 100.
5. Ефимова Т.Л. Численное решение задачи о неосесимметричных свободных колебаниях ортотропных неоднородных цилиндров на основе метода сплайн - коллокации // Доповіді Національної академії наук України. – 2010. – №3. – С.58 – 64.
6. Armenakas A.E., Gazis D.S., Herrmann G. Free vibrations of circular cylindrical shells. – Oxford: Pergamon Press, 1969.
7. Loy C.T., Lam K.Y. Vibration of thick cylindrical shells on the basis of three-dimensional theory of elasticity // J. Sound and Vibration. – 1999. – 226, №4. – P.719 – 737.

Надійшла до редколегії 9.04.2010

УДК 539.595

Ковальчук Б.П., аспірант
Лимарченко О.С., доктор технічних наук,
професор

**Зародження кругової хвилі на вільній
поверхні рідини в циліндричному резервуарі
підвішеному на маятниковому підвісі**

Досліджується явище зародження кругової хвилі на вільній поверхні ідеальної нестисливої рідини в циліндричному резервуарі, який підвішений на маятниковому підвісі. Рух системи збуджується силою з круговим годографом. Досліджується залежність зміни в часі амплітуд і азимутів кругової хвилі для різних частот обертання зовнішньої сили. Дослідження виконане на основі нелінійної дискретної моделі системи резервуар-рідина на маятниковому підвісі.

Ключові слова: нелінійна динаміка рідини, вільна поверхня рідини, кутовий рух резервуара, кругова хвиля.

Kovalchuk B.P., postgraduate student
Limarchenko O.S., doctor of engineering, professor

**Generation of circular wave on a free surface of
liquid in cylindrical reservoir on pendulum
suspension**

We consider phenomenon of generation of circular wave on a free surface of ideal, incompressible liquid in a cylindrical reservoir on pendulum suspension. Motion of the reservoir is disturbed by force with circular hodograph. Variation in time of amplitudes and azimuths of circular wave for different frequencies of rotation of external force is under investigation. Study is done on the basis of nonlinear discrete model of the system reservoir-liquid on pendulum suspension.

Key Words: nonlinear dynamics of liquid, free surface of liquid, angular motion of reservoir, circular wave.

*E-mail: BogdanKovalchuk@gmail.com, Olelim2000@yahoo.com

Статтю представила кафедра механіки суцільних середовищ.

Вступ

При проектуванні сучасних систем пов'язаних з транспортуванням рідких вантажів все частіше постає проблема динаміки таких систем, пов'язана з коливанням вільної поверхні рідини. Відомо, що при великій відносній масі рідини її хвильовий рух суттєво впливає на рух всієї системи, це може бути причиною небажаного руху системи і, що найгірше, призвести до аварійних ситуацій. Використовуючи різного типу демпфери, можна уникнути таких ситуацій, але негативним наслідком такого вирішення проблеми є значне збільшення ваги системи. Запобігти подібним ситуаціям можна на основі моделювання впливу рідини на основі достовірної моделі, яка враховує нелінійні властивості коливань рідини і її вплив на систему в цілому, зручної як для теоретичного дослідження, так і для чисельної реалізації.

Важливою задачею нелінійної динаміки сумісного руху резервуару з рідиною є задача про кругову хвилю яка виникає на вільній поверхні рідини. Дослідження кругової хвилі в циліндричному і прямокутному резервуарах, які рухаються поступально, було виконано в роботі [1], де було побудовано залежності азимута α хвилі і висоти h горба хвилі від часу і частоти сили збудження.

В роботі [2] проводилися дослідження стійкості хвилі на вільній поверхні рідини типу кругової хвилі у нерухомому циліндричному резервуарі. Експериментальні дослідження коливань тіл з рідиною свідчать про широкий прояв кругової хвилі і про складний характер її зародження [3]. Зокрема, в окремі моменти часу гребінь хвилі може змінювати свою швидкість і навіть напрям руху, що знайшло підтвердження при теоретичному дослідженні збудження кругової хвилі в резервуарах, що рухаються поступально [3, 4].

Метою дослідження роботи є вивчення зародження кругової хвилі в резервуарі на маятниковому при кутових рухах системи.

1. Диференціальні рівняння руху системи

Для дослідження динаміки системи резервуар – рідина з вільною поверхнею у випадку збурень, при яких утворюється кругова хвиля, розглядається циліндричний резервуар з абсолютно твердими стінками на маятниковому підвісі, який частково заповнений ідеальною однорідною нестисливою рідиною, яка здійснює безвихровий рух. Рух системи збуджується силою з круговим годографом:

$$F_x = A \sin \omega t, \quad F_y = A \cos \omega t. \quad (1)$$

Для опису руху обмеженого об'єму рідини введемо наступні позначення (Рис. 1): τ – область, яку займає рідина, S – вільна поверхня рідини, Σ – змочувана поверхня резервуару, L – контур контакту трьох середовищ, H – рівень заповнення рідини, індекс „0” в позначеннях відповідає незбуреному стану рідини.

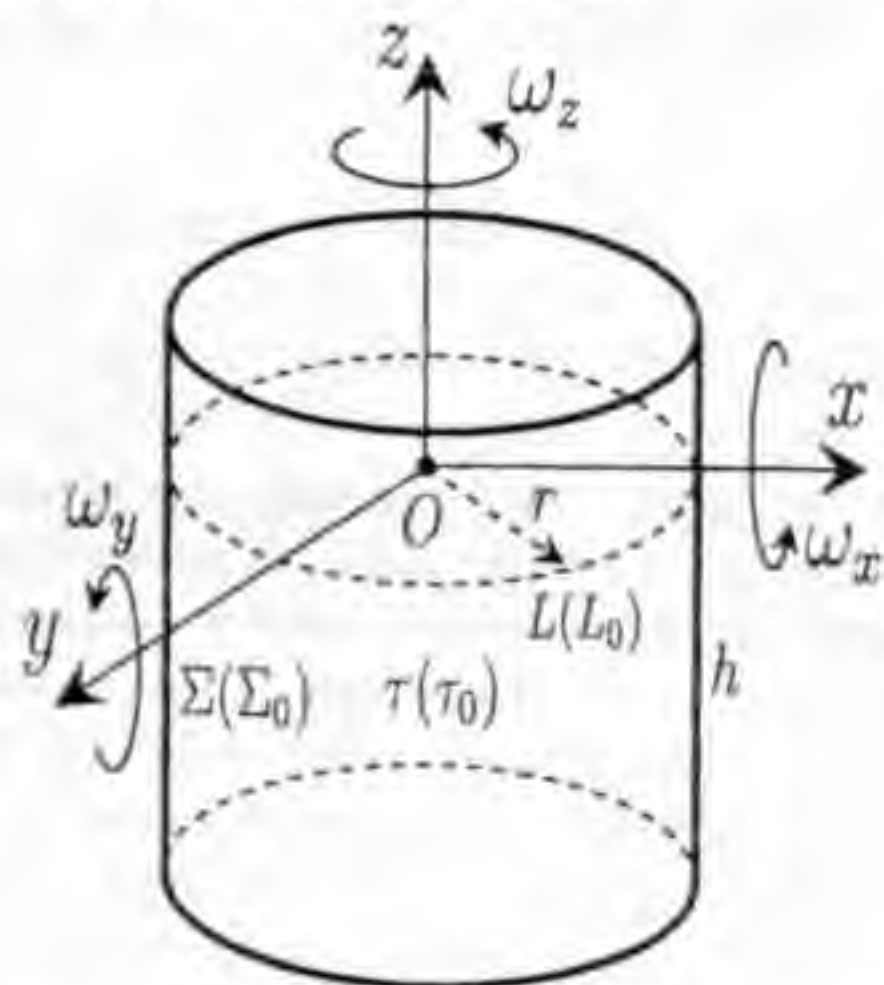


Рис. 1. Основні позначення

Для дослідження руху системи циліндричний резервуар – рідина з вільною поверхнею введемо наступні системи координат (Рис. 2): умовно нерухому систему координат $Ox_1x_2x_3$, систему координат, незмінно зв'язану з резервуаром $Oxyz$, і систему координат $Oy_1y_2y_3$ з початком в точці O , вісі якої відповідно паралельні вісям системи $O'x_1x_2x_3$. Точка O обирається в центрі незбуреної вільної поверхні рідини, а вісь Oz перпендикулярна їй.

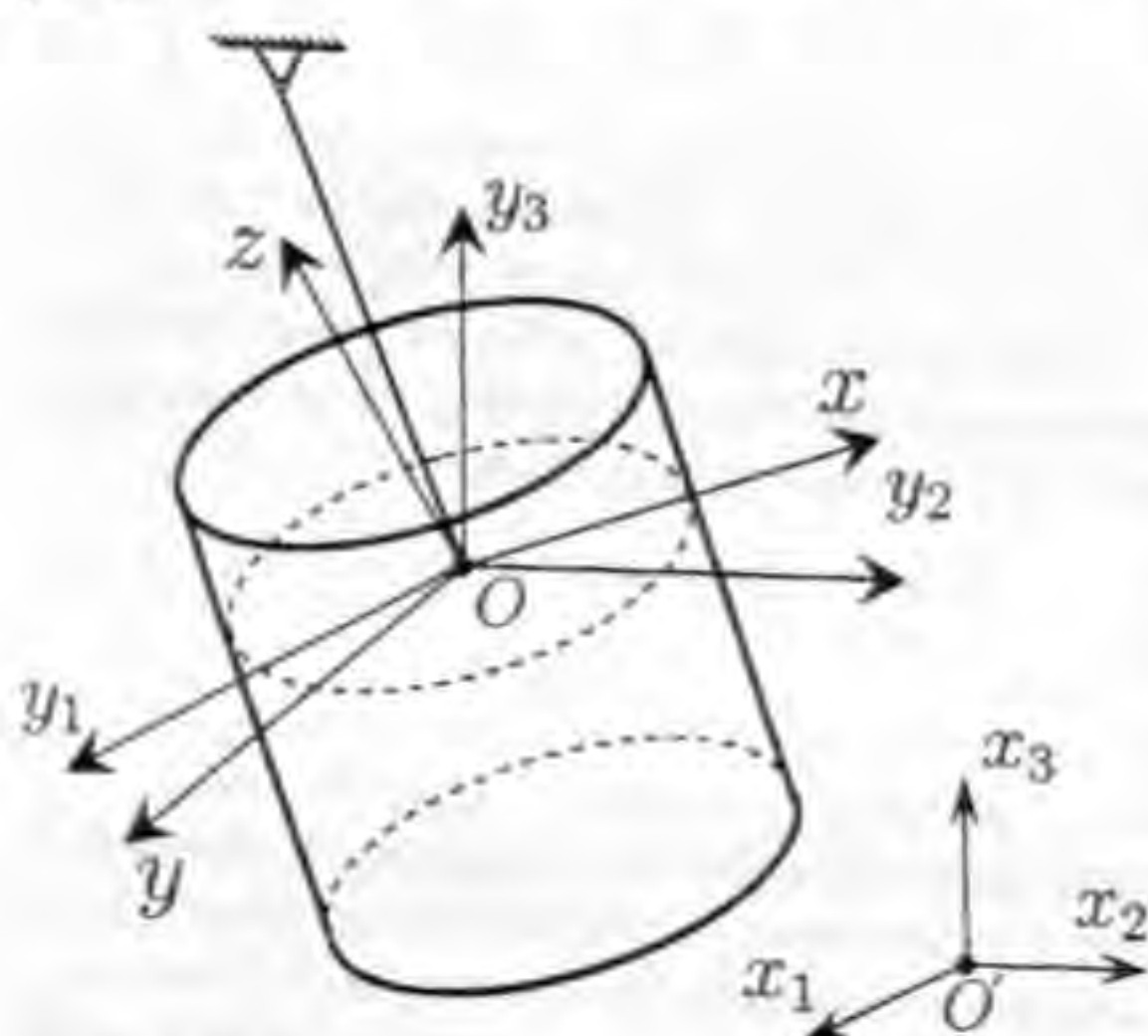


Рис. 2. Системи координат

Математичне формулювання задачі динаміки системи резервуар–рідина з вільною поверхнею

представляє собою сукупність кінематичних і динамічних умов. Кінематичні умови повинні розглядатися як механічні в'язі, які накладають обмеження на варіації невідомих при описі механічної системи на основі принципу Гамільтона–Остроградського. При цьому динамічні граничні умови випливають з варіаційного принципу Гамільтона–Остроградського як природні.

Для побудови нелінійної дискретної моделі динаміки сумісного руху резервуару з рідиною скористаємося підходом, описаним в [1, 5]. При цьому поведінка механічної системи тіло рідини описується сукупністю незалежних змінних $a_i, \alpha_i, \varepsilon_i$, де a_i – амплітудні параметри, α_i – кути повороту резервуара, ε_i – радіус вектор руху точки O .

Рівняння руху системи в параметрах $a_i, \alpha_i, \varepsilon_i$ можна записати у наступному вигляді:

$$\sum_{n=1}^N p_m \ddot{a}_n + \sum_{n=N+1}^{N+3} p_m \ddot{\alpha}_{n-N} + \sum_{n=N+4}^{N+6} p_m \ddot{\varepsilon}_{n-N-3} = \quad (2)$$

$$= q_r, \quad r = \overline{1, N+6},$$

де p_m і q_r є алгебраїчними формами від нульового до третього порядків від $a_i, \dot{a}_i$, коефіцієнти яких можуть залежати від часу t .

Коефіцієнти рівнянь руху мають вигляд [1]

$$p_m = \delta_m + \sum_j a_j A_{mj}^3 + \sum_{j,k} a_j a_k A_{mj}^4 + \frac{\rho}{M_r + M_l} \times$$

$$\times \left[\bar{B}_m^1 + \sum_j a_j \bar{B}_{mj}^2 + \sum_{j,k} a_j a_k \bar{B}_{mj}^3 \right] + \sum_{p=1}^3 \frac{\partial \omega_p}{\partial \alpha_p} \times$$

$$\times \left(E_{pm}^{1*} + \sum_j a_j E_{pm}^{2*} + \sum_{j,k} a_j a_k E_{pm}^{3*} \right) \quad (3)$$

Тут коефіцієнти A, B, E є квадратурами від ψ_i і Ω_0 , де ψ_i – повна ортогональна система функцій в області S_0 , Ω_0 – потенціал Стокса–Жуковського. В силу громіздкості q_r в розгорнутому вигляді не приводиться.

Система рівнянь (2) лінійна відносно других похідних невідомих величин, що дає можливість перетворити її до нормальної форми Коші і виконати інтегрування системи по часу на основі стандартного методу Рунге–Кутта.

Для розв'язання нелінійної задачі сумісного руху резервуару з рідиною аналогічно [1] виберемо $N=12$ форм коливань рідини, які знаходяться з лінійної задачі про власні коливання рідини.

2. Дослідження зародження кругової хвилі на вільній поверхні рідини

Розглянемо циліндричний резервуар радіуса $R=1$ м і висоти $H=1.5$ м заповнений водою на глибину 1 м. Маса резервуара $M_{рез}=0.25M_{рід}$. В початковий момент часу резервуар знаходився у стані спокою. Серія розрахунків показує, що для резервуара на маятниковому підвісі в околі частоти збуджуючої сили $\omega = 2,2$ амплітуди горбів хвиль набувають максимальних значень. Подальше дослідження виконане для трьох частот $\omega = 2,2$, більшої $\omega = 4,0$ і меншої $\omega = 1,0$.

Аналітико-чисельне моделювання на основі моделі (1) дозволило побудувати залежності амплітуд форм коливань a_1 , a_2 , a_3 від часу (Рис. 4 – 6). Залежність кута відхилення підвісу μ від часу підтверджує, що в околі частоти $\omega = 2,2$, яку ми умовно будемо називати „резонансною”, поведінка системи резервуар–рідина має більш збурений характер, ніж при інших частотах. Також було побудовано залежності азимуту α хвилі від часу (Рис. 7 – 9).

З аналізу результатів випливає, що зміни в часі кута відхилення резервуару і амплітуд кругової хвилі мають характер модульованих коливань. При цьому у випадку $\omega = 2,2$ спостерігається значний ріст амплітуд горбів кутових хвиль, відхилення підвісу μ і збудження вісесиметричної форми a_3 , яка є характеристикою нелінійного енергообміну між формами коливань у взаємно ортогональних площинах a_1 і a_2 , і відображає ступінь нелінійності поверхневого хвильутворення (забезпечує перевищення висоти горба хвилі над її впадиною). Крім того, зазначимо, що у всіх випадках на кривих видний вплив супергармонік, особливо для випадку $\omega = 1,0$.

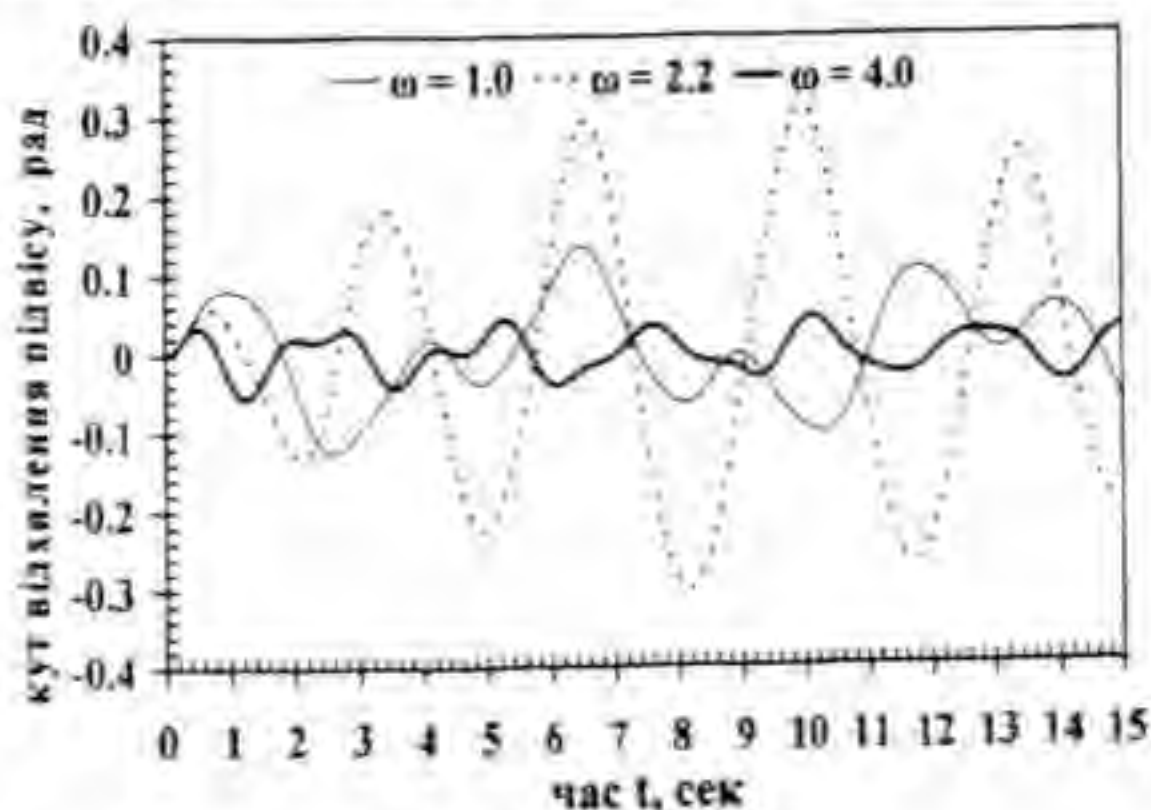


Рис. 3. Кут відхилення підвісу

При аналізі зміни азимута кутової хвилі (кута, під яким спостерігач, розміщений в центрі резервуару, бачить максимальну хвилю) встановлено, що кутова хвиля здійснює майже рівномірні оберти навколо вісі резервуару. Кожний оберт відповідає на малюнку вертикальній ділянці кривих. Проте при малих частотах сили збудження виникає рух кругової хвилі в напрямку протилежному руху резервуару. Зазначимо, що при аналізі динаміки кругової хвилі при поступальному русі резервуару такі режими спостерігаються для випадку „резонансних” частот.

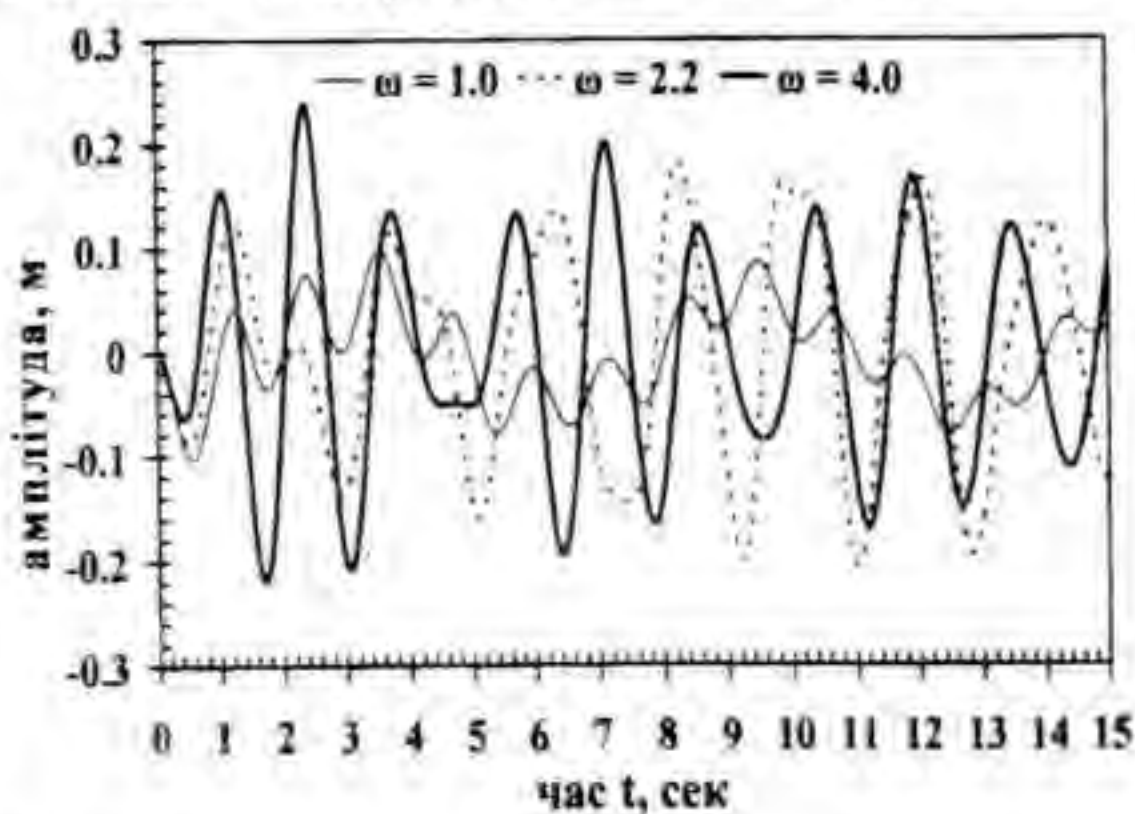


Рис. 4. Амплітуда a_1

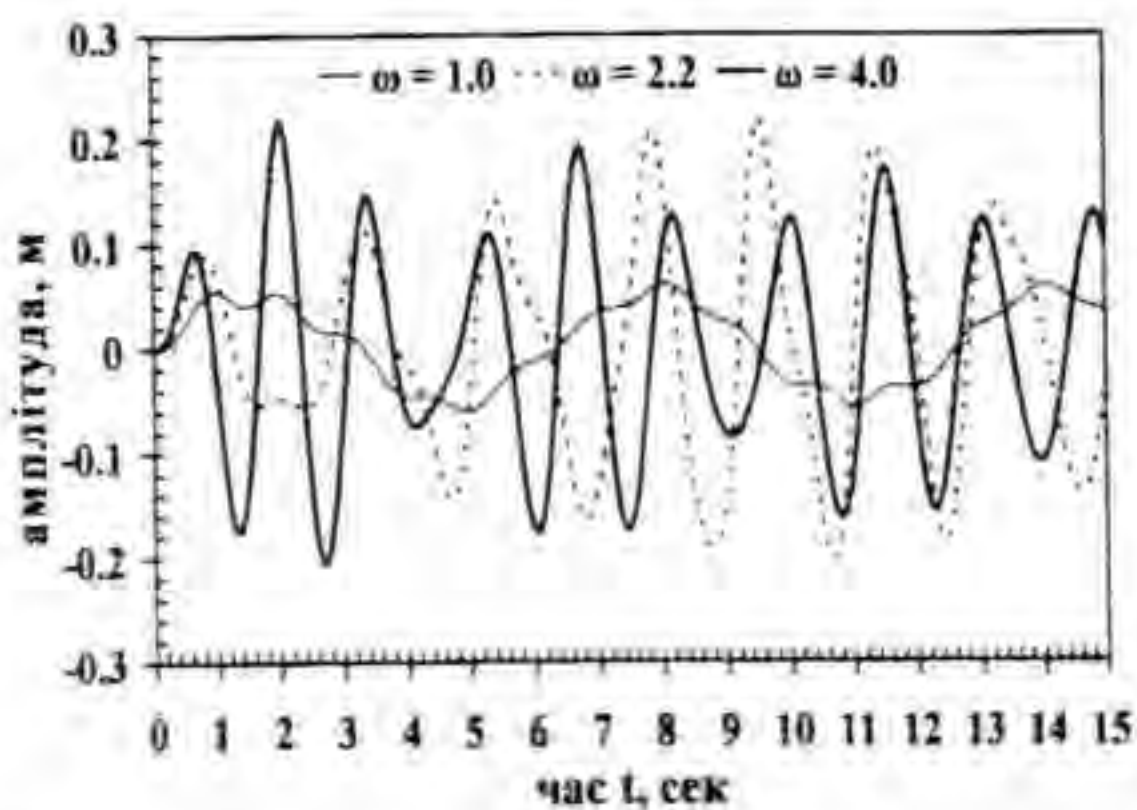


Рис. 5. Амплітуда a_2

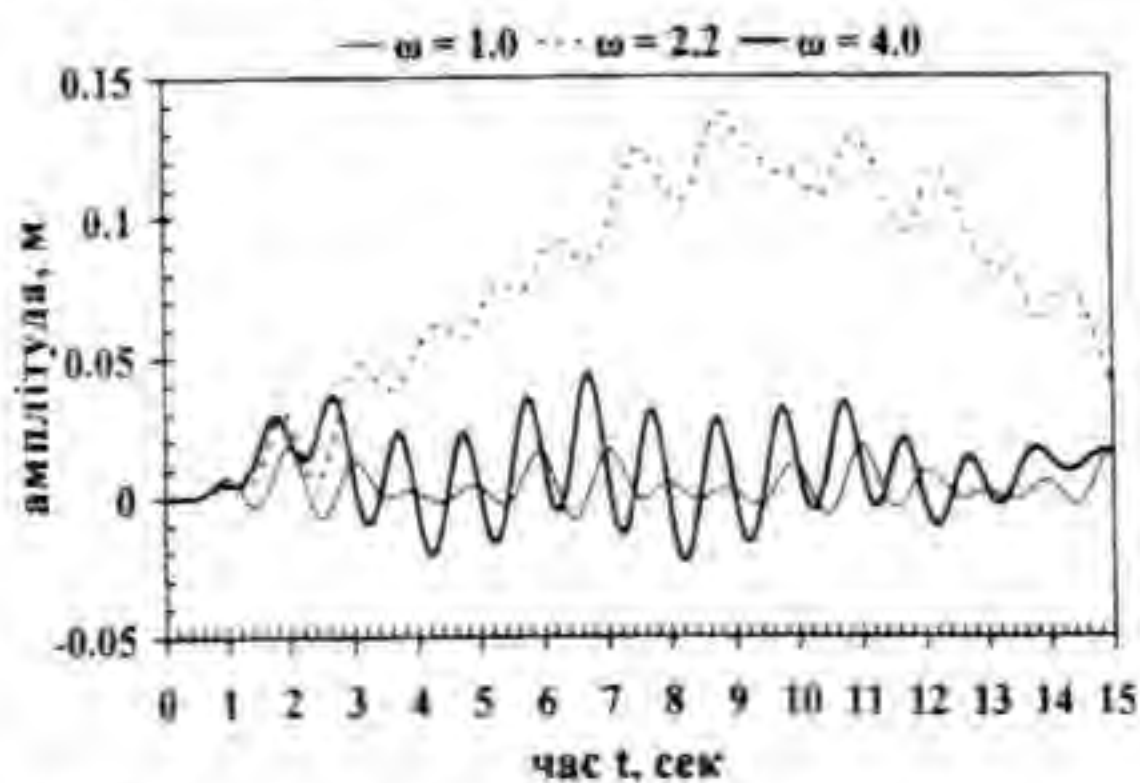


Рис. 6. Амплітуда a_3

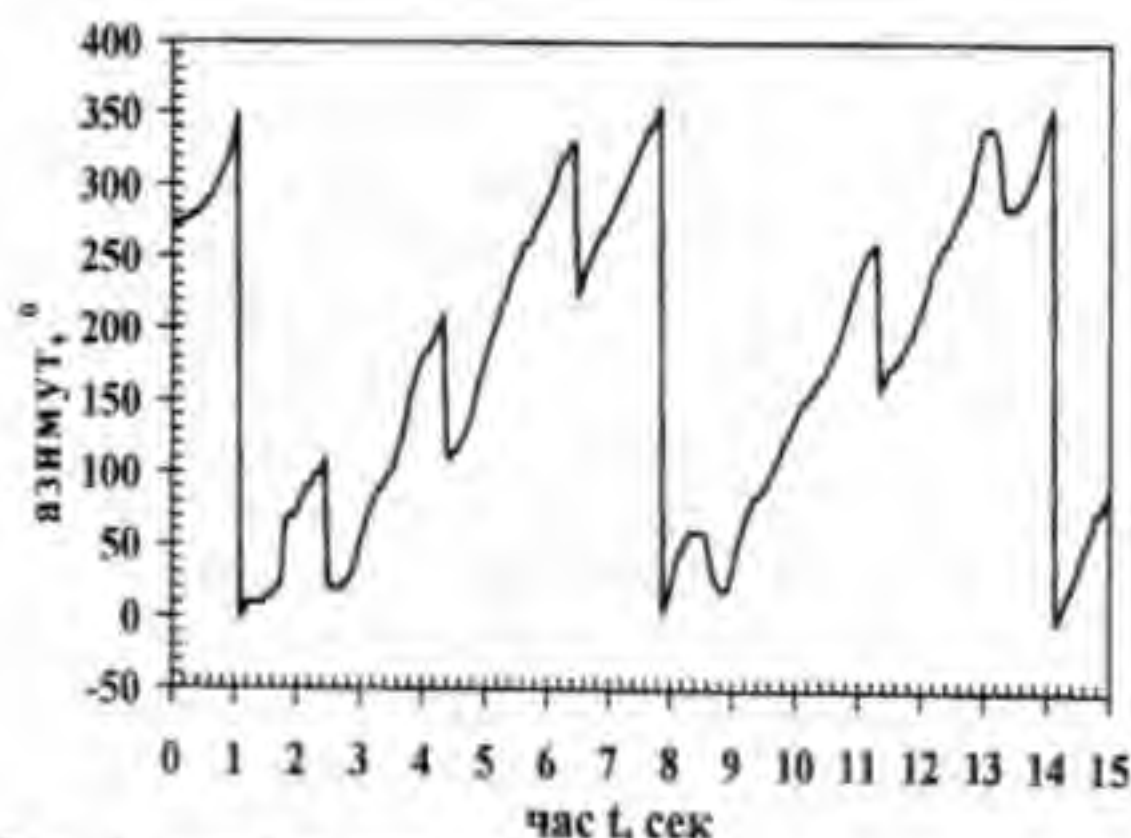


Рис. 7. Азимут при $\omega=1.0$

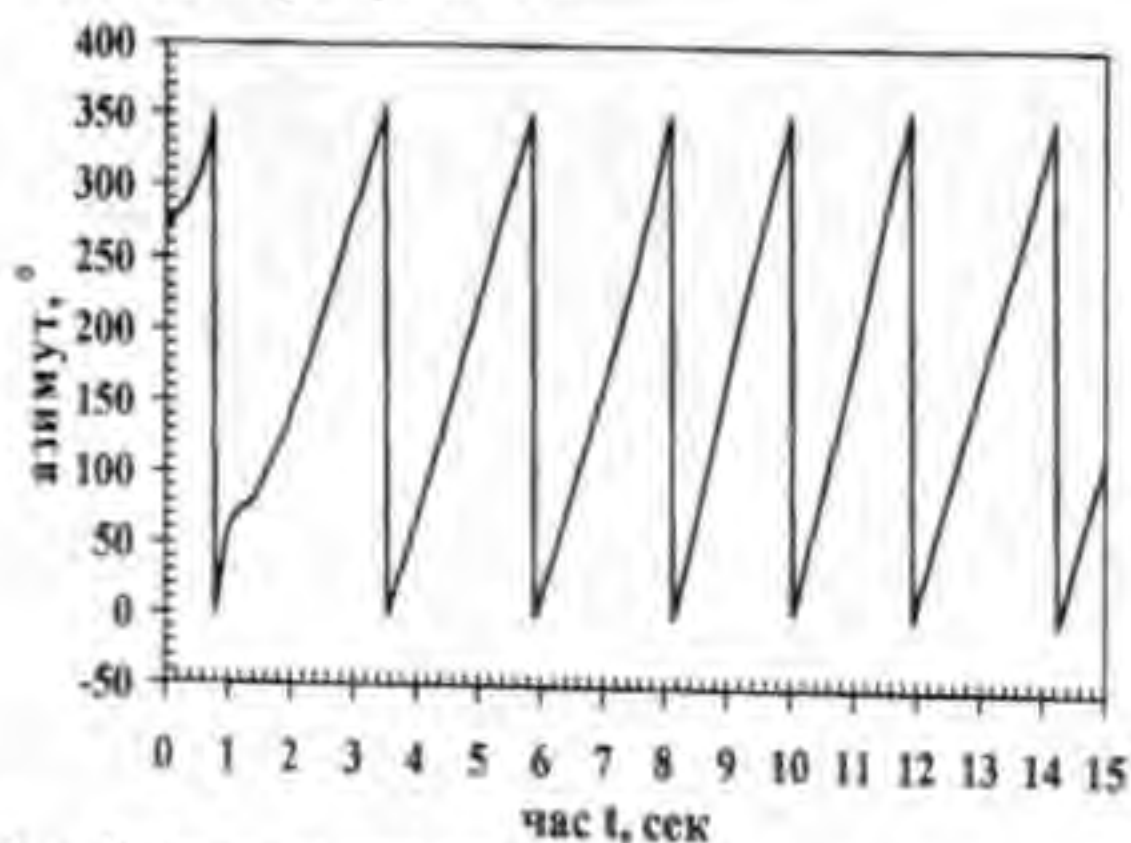


Рис. 8. Азимут при $\omega=2.2$

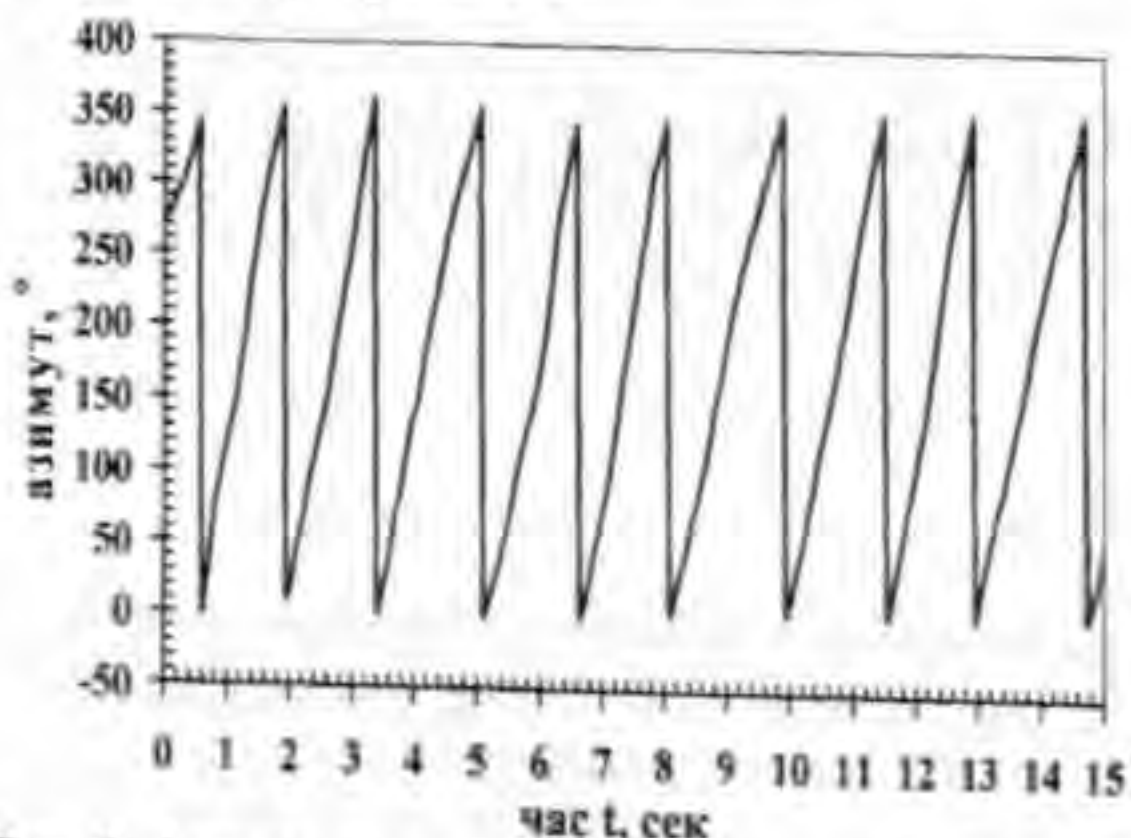


Рис. 9. Азимут при $\omega=4.0$

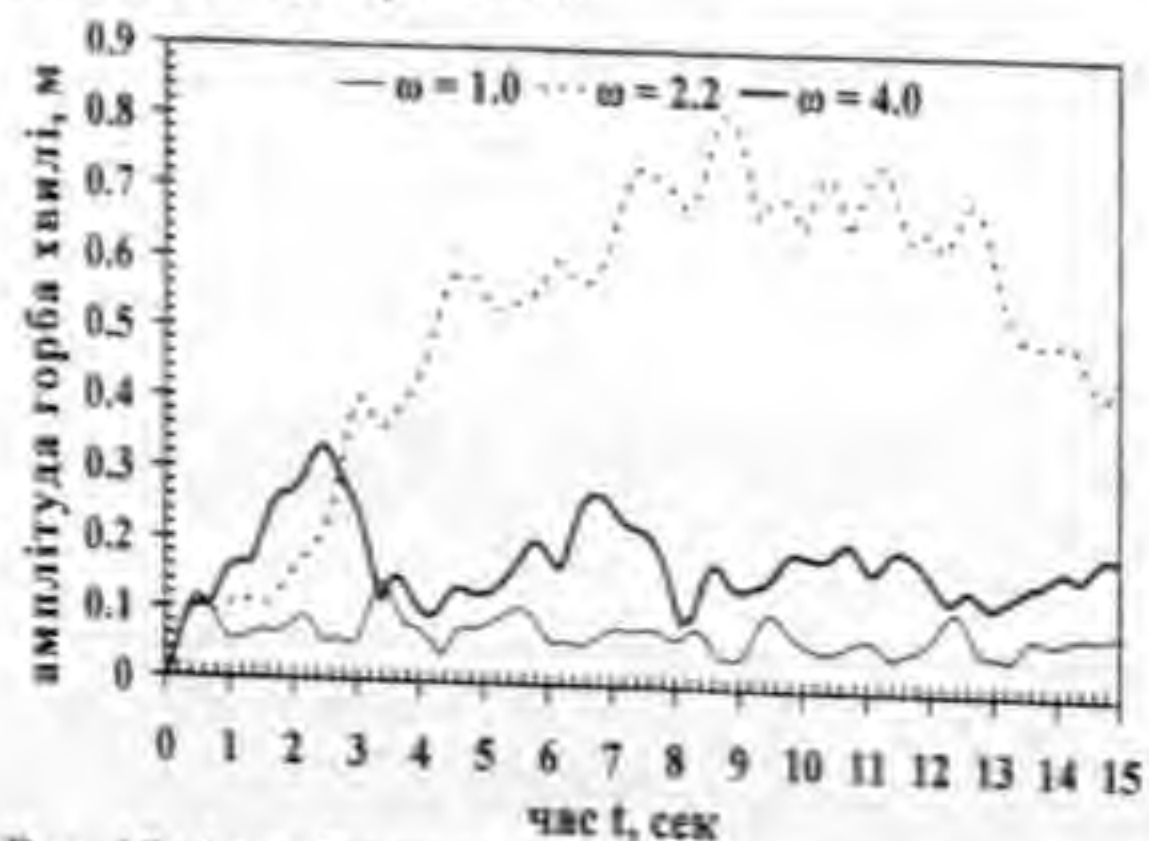


Рис. 10. Амплітуди горбів хвиль

Висновки

Проведено апробацію раніше розробленої моделі про нелінійні коливання резервуара на маятниковому підвісі, який частково заповнений ідеальною нестисливою рідиною, для режимів зародження кругової хвилі. Моделювання виконується для випадку сумісного руху системи резервуар – рідина з вільною поверхнею. Для ефективного моделювання перехідних процесів системи прийнято до уваги 12 форм коливань рідини, до яких включено, зокрема, вісесиметричні форми, вищі антисиметричні форми. Показано доцільність залучення цих форм до розрахункової моделі системи. Моделювання виконане на основі чисельної реалізації аналітичних процедур.

Показано, що нелінійна динамічна модель поведінки резервуара з рідиною на маятниковому підвісі ефективно моделює ефект зародження кругової хвилі на вільній поверхні рідини. При цьому діапазон прояву зворотного руху кругової хвилі у випадку кругового руху резервуару спостерігається для менших частот, ніж у випадку поступального руху.

Список використаних джерел

1. О.С. Лимарченко, Дж. Матарацио, В.В. Ясинский Динамика вращающихся конструкций с жидкостью. – Киев: "Гнозис", 2002. – 304с.
2. Либин Э.Е., Якутова Н.Г. О круговой волне в цилиндрическом сосуде // Колебания упругих конструкций с жидкостью. – Новосибирск: НЭТИ, 1974. – с. 137 - 141.
3. Коваленко А.П., Лимарченко О.С. Экспериментальные исследования поведения жидкости при импульсном возбуждении // Прикл. механика. – 1979. – 15. – № 1. – с. 95–97.
4. Микшишев Г.Н., Рабинович Б.И. Динамика твердого тела с полостями, частично заполненными жидкостью. М.: Машиностроение, 1968. – 532 с.
5. Ковальчук Б.П., Лимарченко О.С. Импульсное моментное возбуждение руху резервуару з рідиною при похилому русі системи // Вісник Київського університету, серія Фізико-математичні науки, в. №2, 2009. С. 59-62

Надійшла до редколегії 10.03.10

УДК 532.5

Корній К. Косткін, аспірант

Стійкість вихрового ланцюжка

Розглянуто задачу про стійкість нескінченного вихрового ланцюжка, який складається точкових вихорів однакової інтенсивності. Розглянуто кілька випадків відхилення від положення рівноваги. В усіх розглянутих випадках отримано нестійке положення рівноваги. Отримані висновки порівняні з результатами подібних досліджень. Ключові слова: вихор, вихровий ланцюжок, нестійка рівновага, стійкість.

Ключові слова: вихор, вихровий ланцюжок, нестійка рівновага, стійкість.

E-mail: kornejk@gmail.com

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., професор Мелешко В.В.

1 Вступ

Перші дослідження вихрових явищ поза рухомими тілами в рідині, були проведені в 1906 році. Зазвичай рухомих тілом був циліндр. При достатньо великій швидкості руху, поза циліндром починають утворюватися вихори, по чергові справа та зліва. На початку вони віддаляються від тіла з деякою швидкістю, поступово ця швидкість зменшується, в той час як вихори дещо розходяться. На деякій відстані поза тілом встановлюється певна усталена відстань між вихорами, вихори розташовуються в шаховому порядку. Також вихори обох рядів мають протилежний напрямок обертання. Відстань між рядами вихорів не залежить від швидкості, а лише від ширини тіла.

В подальшому аналогічні дослідження проводились Карманом, Рубахом, та рядом інших вчених. Рукописи статті на українському мові представляються в двох екземплярах, отпечатаних с хорошим качеством на принтере.

Korniy K. Kostkin, PhD student

Stability of the vortex chain

The problem of stability of an infinite vortex chain, which consists of point vortices of equal intensity. Several cases of deviation from equilibrium. In all examined cases returned unstable equilibrium. These findings are comparable with the results of such research.

Key Words: vortex, vortex chain, unstable equilibrium, stability.

2 Постановка задачі

Розглянемо нескінченний ланцюжок точкових вихорів.

Вони знаходяться один від одного на однаковій відстані a , та мають однакову інтенсивність χ . Комплексний потенціал руху рідини поза вихором інтенсивності χ , центр якого знаходиться в точці z_0 можна відшукати за рівнянням:

$$\omega = i\chi \ln(z - z_0) \quad (1)$$

Комплексний потенціал $2n + 1$ ($n \rightarrow \infty$) вихорів, розташованих по обидва боки від початку координат можна обчислити як:

$$\omega_n = i\chi \ln(z) + i\chi \ln(z \pm a) + \dots + i\chi \ln(z \pm na) \quad (2)$$

$$\omega_n = i\chi \ln(z(z^2 - a^2) \dots (z^2 - n^2 a^2)) \quad (3)$$

$$\omega_n = i\chi \ln\left(\frac{\pi z}{a} \left(1 - \frac{z^2}{a^2}\right) \dots \left(1 - \frac{z^2}{n^2 a^2}\right)\right) + b \quad (4)$$

де:

$$b = i\chi \ln\left(\frac{a}{\pi} a^2 \dots n^2 a^2\right) \quad (5)$$

Константою можна знехтувати:

$$\omega_n = i\chi \ln\left(\frac{\pi z}{a}\left(1 - \frac{z^2}{a^2}\right) \dots \left(1 - \frac{z^2}{n^2 a^2}\right)\right) \quad (6)$$

Так як $n \rightarrow \infty$, можна записати:

$$\sin(x) = x\left(1 - \frac{x^2}{\pi^2}\right) \dots \left(1 - \frac{x^2}{n^2 \pi^2}\right) \quad (7)$$

Отже маємо комплексний потенціал нескінченного ланцюжка вихорів у формі:

$$\omega = i\chi \ln \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \quad (8)$$

Розглянемо швидкість даного ланцюжка. Для знаходження швидкості вихорів скористаємось теоремою Кельвіна. Спочатку розглянемо швидкість вихору, що знаходиться в точці 0. Найближчі вихори діють на нього та продукують швидкості: $V_a = \frac{\chi}{2\pi a}$ - рівні за абсолютною величиною, але протилежні за напрямком. Загальну швидкість можна записати як:

$$V_0 = \frac{\chi}{2\pi a} + \dots + \frac{\chi}{2\pi na} - \frac{\chi}{2\pi a} - \dots - \frac{\chi}{2\pi na} \quad (9)$$

$V_0 = 0$, причому $n \rightarrow \infty$.

Таким чином маємо, що вихор в початку координат знаходиться в стані спокою. Аналогічно можна показати, що і всі інші вихори знаходяться у спокої. Отже ланцюжок не продукує швидкість, що може привести його в рухлий стан.

3 Горизонтальне зміщення одного вихору

Розглянемо стійкість даного ланцюжка. Змістимо вихор, що знаходиться в початку координат на деяку величину ℓ вправо.

Знайдемо швидкість зміщеного вихору:

$$V_1 = \frac{\chi}{2\pi(a-\ell)} + \dots + \frac{\chi}{2\pi(na-\ell)} - \frac{\chi}{2\pi(a+\ell)} - \dots - \frac{\chi}{2\pi(na+\ell)} \quad (10)$$

де: $n \rightarrow \infty$.

$$\begin{aligned} V_1 &= \frac{\chi}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{na-\ell} - \frac{1}{na+\ell} \right) = \\ &= \frac{\chi}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{na+\ell - na+\ell}{n^2 a^2 - \ell^2} \right) = \\ &= \frac{\chi}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\ell}{n^2 a^2 - \ell^2} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

Вихор вже не знаходиться в стані спокою, а набуває швидкості. Розглянемо найближчі до нульового вихори. Вони отримають наступні швидкості: вихор у точці a :

$$\frac{\chi}{2\pi(a-\ell)} - \frac{\chi}{2\pi a} = \frac{\chi\ell}{2\pi a(a-\ell)} \quad (12)$$

вихор у точці $-a$:

$$\frac{\chi}{2\pi a} - \frac{\chi}{2\pi(a+\ell)} = \frac{\chi\ell}{2\pi a(a+\ell)} \quad (13)$$

Після зміщення вихору з положення $z_0 = 0$ у положення $z_1 = \ell$, кожен вихор ланцюжка отримає швидкість: справа від z_0 :

$$\frac{\chi\ell}{2\pi na(na-\ell)}, n \rightarrow \infty \quad (14)$$

зліва від z_0 :

$$\frac{\chi\ell}{2\pi na(na+\ell)}, n \rightarrow \infty \quad (15)$$

Отже можна припустити, що система знаходиться у стані нестійкої рівноваги. При відхиленні вихорів, система не повертається в початкове положення, а вихори все більше віддаляються від початкового положення.

4 Довільне зміщення одного вихору

Розглянемо більш складний випадок. Нехай вихор, що знаходиться в початку координат змістимо у точку з координатами: (x, y) . Кожен вихор ланцюжка продукує в цій точці швидкість:

$$U_n = -\frac{\chi y}{2\pi r_n^2} \quad (16)$$

$$V_n = -\frac{\chi(na-x)}{2\pi r_n^2} \quad (17)$$

де: $r_n^2 = (x-an)^2 + y^2$, $n \rightarrow \infty$. Маємо швидкість зміщення вихору під дією всіх інших вихорів:

$$U_n = -\frac{\chi}{2\pi} \sum_n \frac{y}{r_n^2}, n \rightarrow \infty \quad (18)$$

$$V_n = -\frac{\chi}{2\pi} \sum_n \frac{na-x}{r_n^2}, n \rightarrow \infty \quad (19)$$

Нехтуючи малими величинами можемо записати:

$$U = -\frac{\chi y}{2\pi a^2} \sum_n \frac{1}{n^2}, n \rightarrow \infty \quad (20)$$

$$V_n = -\frac{\chi}{2\pi a} \sum_n \frac{1}{n} - \frac{\chi x}{2\pi a^2} \sum_n \frac{1}{n^2}, n \rightarrow \infty \quad (21)$$

У рівнянні (21) розглянемо суму $\sum_n \frac{1}{n}$, при проходженні значень n від $-\infty$ до $+\infty$ ряд не є абсолютно збіжним, його залежить від того, в якому порядку взято доданки. Якщо брати доданки попарно, на однакових відстанях від 0, отримаємо що: $\sum_n \frac{1}{n} = 0$. Отже вираз (21) можемо переписати як:

$$V = -\frac{\chi x}{2\pi a^2} \sum_n \frac{1}{n^2}, n \rightarrow \infty \quad (22)$$

Тепер обчислимо суму ряду $\sum_n \frac{1}{n^2}$:

$$\sum_n \frac{1}{n^2} = \sum_1^\infty \frac{1}{n^2} = 2 \frac{\pi^2}{6} = \frac{\pi^2}{3} \quad (23)$$

підставивши знайдене значення у вирази (20) та (22) отримаємо:

$$U = -\frac{\chi \pi}{6a^2} y, V = -\frac{\chi \pi}{6a^2} x \quad (24)$$

У виразах (24) покладемо: $\frac{\chi \pi}{6a^2} = \beta$, а також: $U = \frac{d}{dt} x, V = \frac{d}{dt} y$. Маємо:

$$\frac{d}{dt} x = -\beta y, \frac{d}{dt} y = -\beta x \quad (25)$$

Звідки отримуємо:

$$\frac{d^2}{dt^2} x = \beta^2 x, \frac{d^2}{dt^2} y = \beta^2 y \quad (26)$$

Інтегруючи рівняння (26) можемо бачити, що їх інтеграли мають вигляд:

$$x = Ae^{\beta t} + Be^{-\beta t}, y = Ce^{\beta t} + De^{-\beta t} \quad (27)$$

При збільшенні величини часу t , значення координат x та y також будуть постійно зростати. Таким чином, виведений з системи вихор буде віддалятися від свого початкового положення. Отже можна сказати що система нестійка.

5 Зміщення всіх вихорів ланцюжка, за певним законом

Розглянемо більш складний випадок порушення рівноваги системи. Нехай всі вихори зміщенні. Нехай зміщення вихорів системи можна записати наступною залежністю від часу: $x_n = \tau_1 \cos(nk), y_n = \tau_2 \cos(nk)$, де k - довільна константа; τ_1, τ_2 - деякі функції часу. Бачимо, що зміщення вихорів має періодичний характер, причому період рівний $a \frac{2\pi}{k}$. Так як швидкості зміщення мають вигляд: $U = \frac{d}{dt} \tau_1$ та $V = \frac{d}{dt} \tau_2$, рівняння руху матимуть вигляд:

$$U = -\frac{\chi}{2\pi a^2} \sum_n \frac{\tau_2(1 - \cos(nk))}{n^2} \quad (28)$$

$$V = -\frac{\chi}{2\pi a^2} \sum_n \frac{\tau_1(1 - \cos(nk))}{n^2} \quad (29)$$

треба зазначити, що n набуває усіх значень від $-\infty$ до $+\infty$, крім 0. Якщо покласти:

$$\beta = \frac{\chi}{2\pi a^2} \sum_n \frac{(1 - \cos(nk))}{n^2} \quad (30)$$

отримаємо вирази для переміщень:

$$\frac{d}{dt} \tau_1 = -\beta \tau_2, \frac{d}{dt} \tau_2 = -\beta \tau_1 \quad (31)$$

що аналогічні виразам (25). Проводячи аналогічні операції отримуємо:

$$\tau_1 = Ae^{\beta t} + Be^{-\beta t}, \tau_2 = Ce^{\beta t} + De^{-\beta t} \quad (32)$$

Рівняння (27) та (32) ідентичні. Маємо результат, аналогічний до того, що був отриманий у попередніх випадках.

Тому можна стверджувати що система точкових вихорів, з однаковою інтенсивністю, розташованих у ланцюжок, знаходиться у стані нестійкої рівноваги. При будь-якому відхиленні одного вихору, декількох або усіх, система не повертається в початкове положення. А все більше і більше віддаляється від нього.

Проте з вигляду інтегралів (27) та (32), також можна зробити наступний висновок. При відхиленні довільного вихору, на відстань, що є малою порівняно з відстанями між вихорами, решта системи не буде відхилятися від свого початкового положення. Збурений вихор також не повернеться в початкову точку, але буде здійснювати еліптичний рух

навколо неї. Напрямок руху – проти годинникової стрілки, на початку було прийнято додатній напрям інтенсивності, а за домовленістю він направлений проти годинникової стрілки.

6 Рух рідини навколо ланцюжка

Розглянемо рух рідини під дією нескінченного ланцюжка точкових вихорів. Згідно з виразом комплексного потенціалу (8) знайдемо функцію току для течії рідини створеної ланцюжком:

$$2\pi\psi = \omega(z) - \bar{\omega}(\bar{z}) \quad (33)$$

Звідки і отримуємо вираз для функції току:

$$\psi = \frac{1}{2}\chi \ln \frac{1}{2} \left(\cosh \frac{2\pi y}{a} - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) \quad (34)$$

За даним рівнянням і побудуємо лінії току. Їх вигляд зображено на рис. 1.

Рис. 1 Лінії току

Як видно з рис. 1 кожен з вихорів має певну атмосферу рідини, що рухається навколо нього по еліптичній траєкторії. Сепаратриса розділяє атмосфери вихорів одну від одної та від віддаленого потоку. В точках перетину сепаратрис рідина знаходиться в стані спокою. Чим далі від вихрового ланцюжка, тим більш прямолінійним стає рух рідини. А на відстані, більшій за відстань між вихорами, траєкторія руху рідини повністю розпрямляється.

7 Висновки

Розглянуто нескінчений вихровий ланцюжок, що складається з точкових вихорів. Спочатку розглядався випадок рівноваги, потім

почергово вводились різні типи збурень. Відхилявся один вихор по горизонталі, один вихор довільним чином, та всі вихори ланцюжка за певним законом, що носить періодичний характер. В усіх досліджених випадках отримано висновок, що система знаходиться у стані нестійкої рівноваги. При довільному відхиленні довільної кількості вихорів від положення рівноваги, система не буде повертатися в початкове положення, а все більше віддалятиметься від нього. Також розглянуто рух рідини навколо нескінченного вихрового ланцюжка, побудовано лінії току.

Список використаних джерел

1. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1987. – 840 с.
2. Кочин Н. Е., Кибель И. А., Розе Н. В. Теоретическая гидромеханика. – М.: Теоретическая гидромеханика, 1963. – 584 с.
3. Мелешко В. В., Константинов М. Ю. Динамика вихревых структур. – К.: Наукова думка, 1993. – 283 с.
4. Милн - Тамсон Л. М. Теоретическая гидромеханика. – М.: Мир, 1964. – 660 с.
5. Вилля Г. Теория вихрей – Л.-М.: ОНТИ, 1936. – 266 с.
6. Галубев В. В. Теория крыла аэроплана конечного размаха. – М.-Л.: Труды ЦАГИ, 1931. – 350 с.

Надійшла до редколегії 29.05.2010

УДК 532.5

Олександр Б. Курилко, аспірант

Топологічний хаос у течії в двовимірній прямокутній порожнині

Розглянута класична двовимірна бігармонічна задача для прямокутної області. Метод суперпозиції є ефективним для розв'язання задач механіки, що стосуються повільної течії в'язкої рідини під дією дотичних швидкостей, прикладених на її стінках. Показано виникнення топологічного хаосу для течії Стокса у двовимірній прямокутній порожнині без участі змішувачів. Для заданої на верхній та нижній границях швидкості виявлено існування трьох періодичних точок в рідині, які породжують хаотичний рух.

Ключові слова: прямокутна порожнина, топологічний хаос, змішувач.

Olexandr B. Kurylko, PhD student

Topological chaos in two-dimensional rectangular cavity flow

Classical two-dimensional biharmonic problem for a rectangular domain is considered. The method of superposition is effective for solving mechanical problems concerning creeping flow of viscous fluid set up in rectangular cavity by tangential velocities along its walls. The occurrence of topological chaos for Stokes flow in a two-dimensional rectangular cavity without internal rods is demonstrated. For appropriate choice of boundary velocity on the top and bottom walls, there exist three periodic points in the flow that produce a chaos-generating motion.

Key words: rectangular cavity, topological chaos, rod.

E-mail: alexandr.kurylko@gmail.com

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., професор Мелешко В.В.

1 Вступ

Протягом останніх років спостерігається бурхливий розвиток інтересу до породження топологічного хаосу в течіях у двовимірних прямокутних порожнинах без участі фізичних змішувачів в самому процесі [6, 9]. Це стає можливим при збудженні течії нестисливої в'язкої рідини у прямокутній порожнині за допомогою дотичних швидкостей, прикладених на її стінках. Результати, одержані в цьому напрямку, стосуються задач, в яких бічні стінки в прямокутній порожнині вільні від навантаження [7, 8, 9].

Мета даної роботи полягає у побудові моделі, яка запропонована в роботі [8], для задачі про рух нестисливої в'язкої рідини в прямокутній порожнині із закріпленими нерухомими бічними стінками, використовуючи при цьому аналітичний розв'язок, запропонований в роботах [3, 4].

2 Постановка задачі

Двовимірна повільна Стоксова течія нестисливої в'язкої рідини може бути представлена в термінах бігармонічної задачі. Якщо такий рух є настільки повільним, що інерційними силами, які містять квадрати швидкостей, можна знехтувати, порівняно з в'язкими членами, то функція струму ψ задовільняє бігармонічне рівняння

$$\Delta\Delta\psi = 0. \quad (1)$$

У прямокутних координатах Ейлерові компоненти вектора швидкості u та v визначаються як

$$u = \frac{\partial\psi}{\partial x}, \quad v = -\frac{\partial\psi}{\partial y}. \quad (2)$$

Нехай течія у прямокутній порожнині $|x| \leq a$, $|y| \leq b$ викликається заданими дотичними швидкостями $U_{top}(x)$ та $U_{bot}(x)$ на верхній ($y = b$) та нижній ($y = -b$) стінках відповідно, а бічні стінки $x = \pm a$ - нерухомі (Рис.1). Гра-

ничні умови для рівняння (1) мають вигляд

$$\psi = 0, \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, x = \pm a, |y| \leq b, \quad (3)$$

$$\psi = 0, \frac{\partial \psi}{\partial x} = \pm U(x), y = \pm b, |x| \leq a, \quad (4)$$

де $U(x) = U_{top}(x) = -U_{bot}(x)$, а функція $U(x)$ має загальне представлення

$$U(x) = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} U_m^{(1)} \cos \frac{(2m-1)\pi}{2a} x + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n U_n^{(2)} \sin \frac{n\pi}{a} x. \quad (5)$$

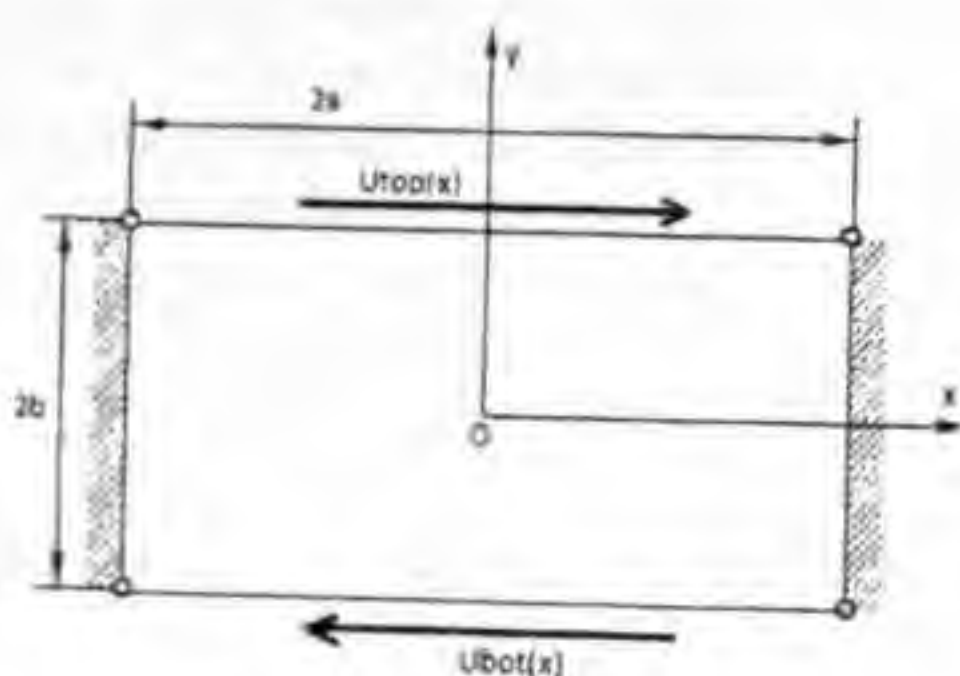


Рис. 1. Геометрія задачі.

З огляду на лінійність граничної задачі (1), (3), (4) її розв'язок можна подати у вигляді

$$\psi(x, y) = \psi_1(x, y) + \psi_2(x, y) \quad (6)$$

де бігармонічні функції $\psi_1(x, y)$ та $\psi_2(x, y)$ є розв'язками наступних граничних задач:

— для парної по x та y функції $\psi_1(x, y)$

$$\Delta \Delta \psi_1 = 0, \quad (7)$$

$$\psi_1 = 0, \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = 0, x = \pm a, |y| \leq b, \quad (8)$$

$$\psi_1 = 0, \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = \pm U_1(x), y = \pm b, |x| \leq a; \quad (9)$$

— для непарної по x та парної по y функції $\psi_2(x, y)$

$$\Delta \Delta \psi_2 = 0, \quad (10)$$

$$\psi_2 = 0, \frac{\partial \psi_2}{\partial x} = 0, x = \pm a, |y| \leq b, \quad (11)$$

$$\psi_2 = 0, \frac{\partial \psi_2}{\partial x} = \pm U_2(x), y = \pm b, |x| \leq a, \quad (12)$$

де

$$U_1(x) = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} U_m^{(1)} \cos \frac{(2m-1)\pi}{2a} x, \quad (13)$$

$$U_2(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n U_n^{(2)} \sin \frac{n\pi}{a} x. \quad (14)$$

3 Побудова аналітичного розв'язку задачі

Граничні задачі (7)–(9) та (10)–(12) розв'язуємо аналітичним методом суперпозиції, який є ефективним для багатьох двовимірних бігармонічних задач в теорії пружності, згину пластин і течії Стокса [1, 2, 3, 4, 5]. У цих роботах можна знайти подробиці методу, нижче подаємо лише зведені результати.

Бігармонічна функція течії $\psi_1(x, y)$ має вигляд

$$\psi_1(x, y) = b \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} X_m^{(1)} p_m^{(1)}(y) \cos \alpha_m x - a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\beta_l} Y_l^{(1)} q_l^{(1)}(x) \cos \beta_l y, \quad (15)$$

де позначено $\alpha_m = \frac{(2m-1)\pi}{2a}$, $\beta_l = \frac{(2l-1)\pi}{2b}$, а функції $p_m^{(1)}(y)$ та $q_l^{(1)}(x)$ задаються наступними виразами

$$p_m^{(1)}(y) = b \tanh \alpha_m b \frac{\cosh \alpha_m y}{\cosh \alpha_m b} - y \frac{\sinh \alpha_m y}{\cosh \alpha_m b},$$

$$q_l^{(1)}(x) = a \tanh \beta_l a \frac{\cosh \beta_l x}{\cosh \beta_l a} - x \frac{\sinh \beta_l x}{\cosh \beta_l a}.$$

Невідомі коефіцієнти $X_m^{(1)}$ та $Y_l^{(1)}$ рядів Фур'є визначаються із нескінченної системи алгебраїчних рівнянь

$$X_m^{(1)} b \Delta_1(\alpha_m b) - \sum_{l=1}^{\infty} Y_l^{(1)} \frac{4\beta_l^2 \alpha_m^2}{(\alpha_m^2 + \beta_l^2)^2} = \alpha_m U_m^{(1)},$$

$$Y_l^{(1)} a \Delta_1(\beta_l a) - \sum_{m=1}^{\infty} X_m^{(1)} \frac{4\beta_l^2 \alpha_m^2}{(\alpha_m^2 + \beta_l^2)^2} = 0, \quad (16)$$

$$\text{де } \Delta_1(\xi) = \tanh \xi + \frac{\xi}{\cosh^2 \xi}.$$

Асимптотика коефіцієнтів $X_m^{(1)}$ та $Y_l^{(1)}$ на нескінченності має вигляд [5]

$$X_m^{(1)} = \frac{2\pi^2 U_1(a)}{ab(\pi^2 - 4)} - \frac{\pi U_1'(a)}{2ab\alpha_m} + x_m^{(1)},$$

$$x_m^{(1)} = \operatorname{Re} \left(E_\lambda^{(1)} \alpha_m^{-\lambda} \right) + o(m^{-3}), m \rightarrow \infty,$$

$$Y_l^{(1)} = \frac{4\pi U_1(a)}{ab(\pi^2 - 4)} - \frac{\pi U_1'(a)}{2ab\beta_l} + y_l^{(1)},$$

$$y_l^{(1)} = -\Re e \left(E_\lambda^{(1)} \beta_l^{-\lambda} \right) + o(l^{-3}), \quad l \rightarrow \infty, \quad (17)$$

з деякою комплексною сталою $E_\lambda^{(1)}$ та $\lambda = 2.73959 + i1.11902$.

Бігармонічна функція течії $\psi_2(x, y)$ має вигляд

$$\begin{aligned} \psi_2(x, y) = & b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\gamma_n} X_n^{(2)} p_n^{(2)}(y) \sin \gamma_n x - \\ & - a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\beta_l} Y_l^{(2)} q_l^{(2)}(x) \cos \beta_l y, \end{aligned} \quad (18)$$

де $\gamma_n = \frac{n\pi}{a}$, $\beta_l = \frac{(2l-1)\pi}{2b}$, а функції $p_n^{(2)}(y)$ та $q_l^{(2)}(x)$ мають наступний вигляд

$$p_n^{(2)}(y) = b \tanh \gamma_n b \frac{\cosh \gamma_n y}{\cosh \gamma_n b} - y \frac{\sinh \gamma_n y}{\cosh \gamma_n b},$$

$$q_l^{(2)}(x) = a \coth \beta_l a \frac{\sinh \beta_l x}{\sinh \beta_l a} - x \frac{\cosh \beta_l x}{\sinh \beta_l a}.$$

Коефіцієнти $X_n^{(2)}$ та $Y_l^{(2)}$ визначаються із нескінченної системи алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} X_n^{(2)} b \Delta_1(\gamma_n b) - \sum_{l=1}^{\infty} Y_l^{(2)} \frac{4\beta_l \gamma_n^2}{(\gamma_n^2 + \beta_l^2)^2} &= -\gamma_n U_n^{(2)}, \\ Y_l^{(2)} a \Delta_2(\beta_l a) - \sum_{n=1}^{\infty} X_n^{(2)} \frac{4\beta_l^2 \gamma_n}{(\gamma_n^2 + \beta_l^2)^2} &= 0, \end{aligned} \quad (19)$$

у якій позначено $\Delta_2(\xi) = \coth \xi - \frac{\xi}{\sinh^2 \xi}$.

Асимптотика коефіцієнтів $X_n^{(2)}$ та $Y_l^{(2)}$ на нескінченності має вигляд [5]

$$X_n^{(2)} = \frac{2\pi^2 U_2(a)}{ab(\pi^2 - 4)} - \frac{\pi U_2'(a)}{2ab\gamma_n} + x_n^{(2)},$$

$$x_n^{(2)} = \Re e \left(E_\lambda^{(2)} \gamma_n^{-\lambda} \right) + o(n^{-3}), \quad n \rightarrow \infty,$$

$$Y_l^{(2)} = \frac{4\pi U_2(a)}{ab(\pi^2 - 4)} - \frac{\pi U_2'(a)}{2ab\beta_l} + y_l^{(2)},$$

$$y_l^{(2)} = -\Re e \left(E_\lambda^{(2)} \beta_l^{-\lambda} \right) + o(l^{-3}), \quad l \rightarrow \infty, \quad (20)$$

з деякою комплексною сталою $E_\lambda^{(2)}$ та $\lambda = 2.73959 + i1.11902$.

4 Результати обчислень

Методику організації розрахунків, яка базується на переході до розв'язування скінчених систем для невідомих $x_m^{(1)}$, $y_l^{(1)}$, $x_n^{(2)}$, $y_l^{(2)}$ із урахуванням їх асимптотичної поведінки (17), (20) на нескінченності, детально викладено в [4, 5].

Розглянемо приклад течії у прямокутній порожнині з $a = 3$ та $b = 1$, а задана швидкість на верхній та нижній стінках нехай має наступний вигляд

$$U(x) = U_1^{(1)} \cos \frac{\pi x}{2a} - U_1^{(2)} \sin \frac{\pi x}{a}. \quad (21)$$

У всіх скінчених системах залишали по 9 невідомих $x_m^{(1)}$, $x_n^{(2)}$ та по 3 невідомих $y_l^{(1)}$, $y_l^{(2)}$. Похибка виконання граничних умов для швидкостей на стінках не перевищувала 0.2%. На рис. 2 наведені лінії течії, що відповідають постійним значенням функції $\psi(x, y)$ з інтервалом 0.25. Лінія $\psi(x, y) = 0$ — це сепаратриса, яка поділяє комірку на так звані конвективні зони, в яких існує лише один великий вихор. Кут, під яким ця сепаратриса входить в нижню стінку (або верхню, внаслідок симетрії) обчислюється за наступною формулою [4]

$$\tan \theta = -2 \frac{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \big|_{(x_s, -b)}}{\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \big|_{(x_s, -b)}}, \quad (22)$$

в якій $x_s = 1.145$ — це абсциса точки, в яку входить сепаратриса ($\theta = 70^\circ$).

На рис. 2 показані періодичні точки, які мають наступні координати: $x_L = (-2.01, 0)$, $x_C = (0, 0)$ та $x_R = (2.01, 0)$. Параметри $U_1^{(1)}$ та $U_1^{(2)}$ в (21) підбрані таким чином ($U_1^{(1)} = 4.439$ та $U_1^{(2)} = 3.935$), щоб періодичні точки x_L та x_C належали одній лінії течії, а також, щоб точки x_L та x_R знаходилися на однакових відстанях від центральних точок x_C . При таких значеннях $U_1^{(1)}$ та $U_1^{(2)}$ періодичні точки x_L та x_C за півперіод $\tau = T/2$ ($T = 2$, τ змінюється від 0 до $T/2$) переходять одна в одну, обмінюються положеннями (перехід відбувається за годинниковою стрілкою), а права x_R — залишається нерухомою.

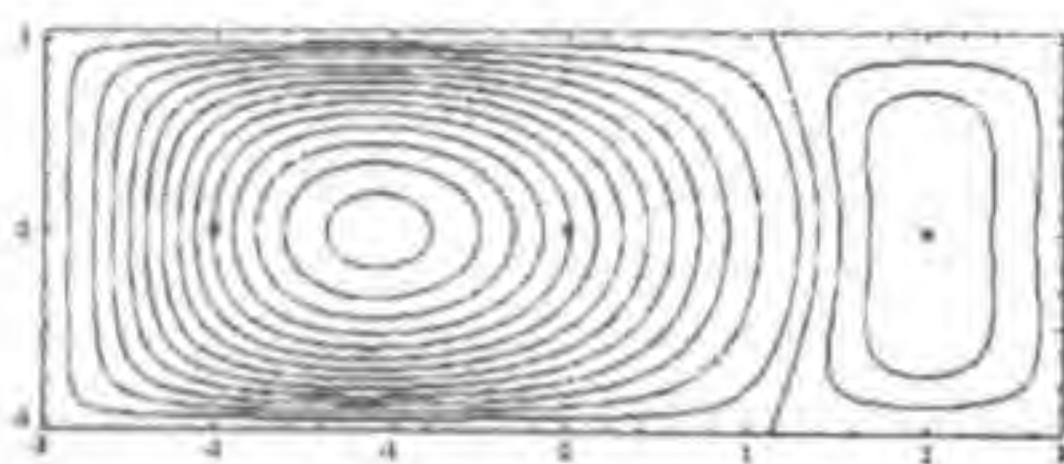


Рис. 2. Картина ліній течії в комірці з нерухомими бічними стінками за півперіод $\tau = T/2$ ($T = 2$, τ змінюється від 0 до $T/2$).

В період часу від $T/2$ до T задана швидкість на границях змінює значення на протилежне, починає діяти в зворотному напрямку. Картина ліній течії для цього випадку має аналогічну структуру ліній течії, показаних на рис. 1 (симетричне відображення відносно вісі ординат). В такому випадку ліва періодична точка залишається нерухомою, а центральні і права переходять одна в одну, змінюючи при цьому положення (перехід відбувається проти годинникової стрілки). За 3 повних періоди T точки повернуться на свої початкові положення.

Рис. 3 ілюструє відображення Пуанкаре.

Цей типовий приклад стаціонарних ліній течій наводить на думку про можливість ефективної організації процесу змішування домішки шляхом так званої *хаотичної адвекції* при раптовій зміні заданої швидкості на границі у моменти часу $kT/2$, де T — деякий період.

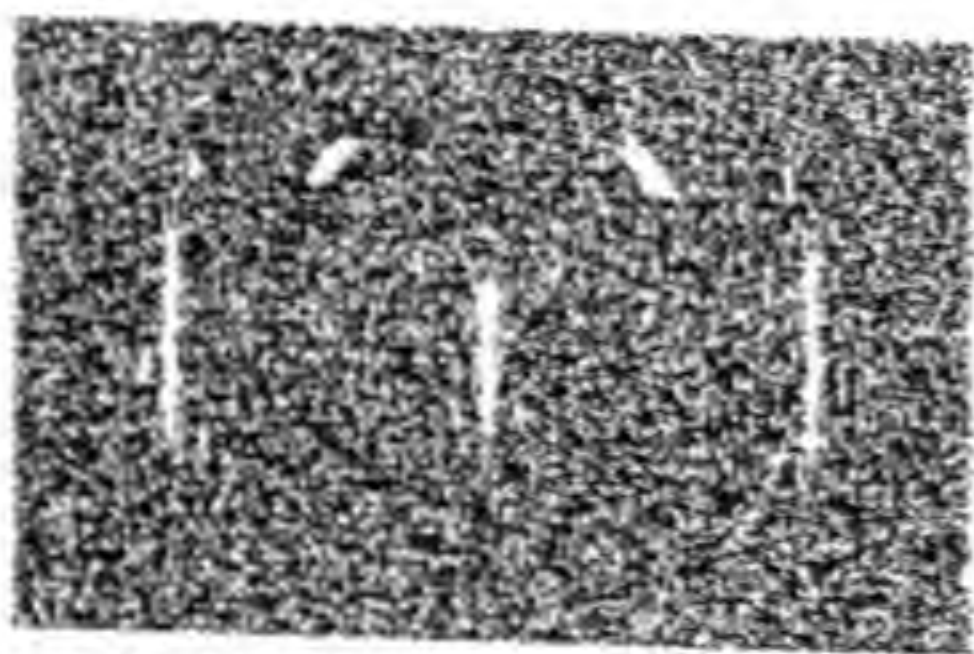


Рис. 3. Відображення Пуанкаре.

5 Висновки

1. Метод суперпозиції є ефективним аналітичним засобом для розв'язання двовимірної граничної задачі для прямокутника. Незважаючи на громіздку математичну роботу, кінцеві фор-

мули виявилися дуже простими для проведення чисельних обчислень.

2. Топологічний хаос в течії у прямокутній двовимірній порожнині може бути породжений без участі фізичних змішувачів в самому процесі, роль яких виконують пасивні періодичні точки стагнації.

3. Побудована модель, запропонована в роботі [8], для граничної задачі для прямокутної порожнини із закріпленими бічними стінками.

Список використаних джерел

1. Мелешко В. В., ван Хейст Г. Я. Ф. Змішування в'язкої рідини у прямокутній порожнині // Мат. методи та фіз.-мех. поля. — 2006. — 49, №1. — с. 43–52.
2. Мелешко В. В. Бигармоническая задача для прямоугольника: история и современность // Мат. методи та фіз.-мех. поля. — 2004. — 47, №3. — с. 45–68.
3. Meleshko V.V. Biharmonic problem in a rectangle // Appl. Sci. Res. — 1998. — 58. — p. 217–249.
4. Meleshko V.V. Steady Stokes flow in a rectangular cavity // Proc. R. Soc. London. — 1996. — A452. — p. 1999–2002.
5. Meleshko V.V., Gomitko A. M. Infinite systems for a biharmonic problem in a rectangle // Proc. R. Soc. London. — 1997. — A453. — p. 2139–2160.
6. Chen J. and Stremler M. Topological chaos in cavities and channels // Bull. Am. Phys. Soc. 51: 152, 2006.
7. Gaskell P. H., Gurcan F., Savage M. D. and Thompson H. M. Stokes flow in a double-lid-driven cavity with free surface side walls // Journal of Mechanical Engineering Science, 212: 387–403, 1998.
8. Kumar P., Chen J., Stremler M. Stirring with ghost rods in a lid-driven cavity // Bulletin of the APS, 54: 19, 2009.
9. Stremler M. and Chen J. Generating topological chaos in lid-driven cavity flow // Physics of Fluids, 19: 103602, 2007.

УДК 539.3

Лукомський Д.В., асистент,
Селезов І.Т., д. ф.-м. н., професор

Виникнення нестійкості форми судини зі скінченною товщиною стінки при проходженні по ній пульсової хвилі

Виведено рівняння руху гіперпружного порожнистого циліндра на основі 9-ти константної моделі нелінійно деформованого континууму стосовно аналізу кровоносної судини з урахуванням кубічної нелінійності. На базі побудованої моделі досліджується поява нестійкості циліндричної форми судини під впливом вищого за порогове значення кров'яного трансмурального тиску при проходженні пульсової хвилі, генерованої серцем.

Ключові слова: пульсова хвиля, нестійкість, трансмуральний тиск, гіперпружне тіло, геометрична не лінійність.

*E-mail: dlucom@list.ru, selezov@yandex.ru

Статтю представила кафедра механіки суцільних середовищ.

Вступ

Відомо, що течія крові в великих кровоносних судинах характеризується відносно слабким впливом реологічних властивостей рідини разом із сильним впливом механічних характеристик судинної стінки [1-2]. Але, зазвичай, навіть для судин з достатньо товстою стінкою (наприклад, артерій) за основу береться теорія оболонки з використанням гіпотези Кірхгофа-Лява [3,4]. У цьому дослідженні рівняння динаміки попередньо напруженої судини, заповненої кров'ю, отримано на основі більш загальної теорії гіперпружного ізотропного тіла з урахуванням 9-ти константної кубічно-нелінійної моделі. Базуючись на цих рівняннях, в рамках геометрично-нелінійної моделі використовується розклад по ступенях радіальної змінної. Це дозволяє знайти більш загальний закон дисперсії пульсової хвилі тиску з урахуванням товщини стінки, а також проаналізувати вплив трансмурального тиску на появу нестійкості циліндричної форми судини.

1. Загальна постановка

Розглянемо гіперпружне ізотропне тіло, що деформується з часом під впливом певних зовнішніх напруг за відсутності об'ємних сил.

Lukomsky D.V., assistant,
Selezov I.T., Dr. Sci. Phys-Math., Prof.

Appearance of shape instability in a blood vessel of finite wall thickness under pressure pulse wave propagation

Dynamic equations of hyperelastic hollow cylinder are obtained on the basis of 9-constant model of nonlinearly deformed continuum for the analysis of a blood vessel with cubic nonlinearity. On the basis of this model appearance of the cylindrical shape instability in a blood vessel is investigated under the influence of high blood transmural pressure during pulse wave propagation generated by a heart.

Key words: pulse wave, instability, transmural pressure, hyperelastic body, geometrical nonlinearity

Коваріантні компоненти тензора деформації тіла мають вигляд

$$\varepsilon_{ik} = u_{ik} + f_{ik}, \quad (1)$$

де $u_{ik} = \frac{1}{2}(\nabla_i u_k + \nabla_k u_i) = u_{ki}$ – лінійна складова по u_i (симетричний тензор малої деформації), $f_{ik} = \frac{1}{2}\nabla_i u_j \nabla_k u^j = \frac{1}{2}g^{jm}\nabla_i u_j \nabla_k u_m$ – квадратична складова по u_i , що відповідає за геометричну нелінійність деформації середовища. Також введемо антисиметричний тензор дисторсії: $A_{ij} = \frac{1}{2}(\nabla_i u_j - \nabla_j u_i) = -A_{ji}$.

Оскільки густина внутрішньої енергії $\Phi(\nabla_i u_k)$ є скалярною величиною, то вона залежить від компонент тензора деформації (1) неявно, а через інваріанти. В ізотропному гіперпружному середовищі існує тільки три незалежних інваріанта тензора деформації [4]

$$\begin{aligned} K_1 &= \varepsilon_k^k = g^{km} \varepsilon_{km}, \\ K_2 &= \varepsilon_k^j \varepsilon_j^k = g^{jm} g^{kn} \varepsilon_{km} \varepsilon_{jn}, \\ K_3 &= \varepsilon_k^j \varepsilon_j^i \varepsilon_i^k = g^{jm} g^{in} g^{kr} \varepsilon_{km} \varepsilon_{jn} \varepsilon_{ir}. \end{aligned} \quad (2)$$

Запишемо рівняння Лагранжа у кубічно нелінійному по u_i наближенні. Для цього, очевидно, в Φ потрібно утримати доданки до четвертого ступеню по u_i включно:

$$\Phi(K_1, K_2, K_3) = A_1 K_1^2 + A_2 K_2 + B_1 K_1^2 + B_2 K_1 K_2 + B_3 K_3 + C_1 K_1^4 + C_2 K_1^2 K_2 + C_3 K_1 K_3 + C_4 K_2^2 \quad (3)$$

Константи B_i , C_i відповідають за фізичну нелінійність деформації гіперпружного тіла, що описується в рамках 9-ти константної моделі. Якщо обрати $C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = 0$, то отримаємо 5-ти константну модель гіперпружного середовища типу Мурнагана. У випадку ж, коли всі B_i та C_i рівні нулю, отримаємо деформацію середовища лише з геометричною нелінійністю. Повністю лінійними рівняння Лагранжа стануть за умови рівності нулю ще і квадратичної компоненти f_{ik} тензора деформації (1).

Відмітимо також, що $\lambda = 2A_1$, $\mu = A_2$ – параметри Ламе, що характеризують пружні властивості середовища. Вони пов'язані з модулем Юнга E та коефіцієнтом Пуассона σ

$$\sigma = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}, \quad E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad (4)$$

Рівняння динаміки Лагранжа набудуть вигляду

$$-\rho_* g^{ik} \ddot{u}_i + \nabla_i T^{ik} = 0, \quad k = 1, 2, 3, \quad (5)$$

де

$$T^{ik} = \frac{\partial \Phi}{\partial (\nabla_i u_k)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \frac{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}}{\partial (\nabla_i u_k)} = \sigma^{ik} + \sigma^{i\alpha} \nabla_\alpha u^k \quad (6)$$

– компоненти несиметричного тензора напруг [4], виражені через компоненти тензора напруг σ^{ik} , ρ_* – густина середовища.

Граничні умови на недеформованій поверхні S гіперпружного тіла [4]

$$T^{ik} n_i = p^k, \quad (7)$$

де p^k – контраваріантні компоненти вектора поверхневого навантаження, n_i – компоненти одиничного вектора нормалі до поверхні S .

Скориставшись виразами (1) і (2), розкладемо інваріанти K_1 , K_2 , K_3 на лінійні, квадратичні та кубічні по u_i доданки, нехтуючи членами вищих порядків

$$\begin{aligned} K_1 &= g^{lm} u_{lm} + g^{lm} f_{lm} = K_{11} + K_{12}, \\ K_2 &= g^{lp} g^{mq} u_{lp} u_{mq} + 2g^{lp} g^{mq} u_{lp} f_{mq} = K_{22} + K_{23}, \\ K_3 &= g^{lp} g^{sq} g^{mr} u_{lp} u_{mq} u_{sr} = K_{33}. \end{aligned} \quad (8)$$

Скориставшись правилом коваріантного диференціювання тензорів другого рангу [4], рівняння (5) можна переписати у вигляді

$$-\rho_* g^{ik} \ddot{u}_i + \frac{\partial T^{ik}}{\partial x^i} + \Gamma_{il}^i T^{lk} + \Gamma_{il}^k T^{il} = 0, \quad k = 1, 2, 3 \quad (9)$$

Переходячи в (6) до фізичних складових та ортогональної системи координат, утримаємо по компонентах u_i лінійні, квадратичні та кубічні доданки. Тоді можна отримати в загальному вигляді фізичні компоненти несиметричного тензора напруг, розкладені на симетричну та антисиметричну частини (S та A відповідно):

$$T_{ik} = T_{ik}^{(1S)} + T_{ik}^{(2S)} + T_{ik}^{(2A)} + T_{ik}^{(3S)} + T_{ik}^{(3A)}, \quad (10)$$

де

$$T_{ik}^{(1S)} = 2A_1 K_{11} \delta_{ik} + 2A_2 u_{ik}, \quad (10a)$$

$$T_{ik}^{(2S)} = \Phi^{(2)} \delta_{ik} + 2(A_1 + B_2) K_{11} u_{ik} + 3(A_2 + B_3) (u^2)_{ik} - A_2 (A^2)_{ik}, \quad (10b)$$

$$T_{ik}^{(2A)} = 2A_1 K_{11} A_{ik} + A_2 (uA + Au)_{ik}, \quad (10v)$$

$$\begin{aligned} T_{ik}^{(3S)} &= \Phi^{(3)} \delta_{ik} + (\Phi^{(2)} + 2\Phi) u_{ik} + \\ &+ 3(B_2 + C_3) K_{11} (u^2)_{ik} + (A_2 + 6B_3) (u^3)_{ik} + A_2 (AuA)_{ik} - \\ &- B_2 K_{11} (A^2)_{ik} - \left(A_2 + \frac{3}{2} B_3 \right) (uA^2 + A^2 u)_{ik}, \end{aligned} \quad (10r)$$

$$\begin{aligned} T_{ik}^{(3A)} &= B_2 K_{11} (uA + Au)_{ik} + \\ &+ \left(A_2 + \frac{3}{2} B_3 \right) (u^2 A + Au^2)_{ik} - A_2 (uAu)_{ik} + \\ &+ \Phi^{(2)} A_{ik} - A_2 (A^3)_{ik}, \end{aligned} \quad (10d)$$

$$\Phi = \left(2C_4 + \frac{1}{2} B_2 \right) K_{22} + C_2 K_{11}^2 - \frac{1}{2} B_2 (A^2)_{ll}, \quad (11a)$$

$$\Phi^{(2)} = (A_1 + B_2) K_{22} + 3B_1 K_{11}^2 - A_1 (A^2)_{ll}, \quad (11b)$$

$$\begin{aligned} \Phi^{(3)} &= 4C_1 K_{11}^3 + (3B_1 + 2C_2) K_{11} K_{22} + \\ &+ (B_2 + C_3) K_{33} - B_2 (uA^2)_{ll} - 3B_1 K_{11} (A^2)_{ll}. \end{aligned} \quad (11v)$$

Отже, враховуючи (9), загальна система диференціальних рівнянь руху фізично малої частинки гіперпружного ізотропного середовища в довільних ортогональних лагранжевих корди-

натах для фізичних складових вектора зміщення $\bar{u}$ та несиметричного тензора напруг $\bar{T}^{ik}$ без урахування масових сил в кубічному наближенні має вигляд:

$$-\rho_* \ddot{u}_k + \sqrt{g^{ii}} \frac{\partial \bar{T}^{ik}}{\partial x^i} + \sqrt{g^{ii}} \Gamma_{ii}^k \bar{T}^{ik} + \frac{\sqrt{g^{ii}} \sqrt{g^{jj}}}{\sqrt{g^{kk}}} \Gamma_{ii}^k \bar{T}^{jj} = 0, \quad k=1, 2, 3, \quad (12)$$

де по k не ведеться сумування. Тут g^{ii} – компоненти метричного тензора, Γ_{ii}^k – символи Крістоффеля.

Згідно (7), граничні умови на недеформованій поверхні S гіперпружного тіла в фізичних складових матимуть вигляд:

$$T_{ik} n_i = p_k, \quad k=1, 2, 3. \quad (13)$$

2. Осесиметрична задача в циліндричних координатах

Розглянемо нескінченну гіперпружну ізотопну трубку з густиною матеріалу ρ_* , кінці якої не закріплені, повністю зсередини заповнену рідиною з густиною ρ_f . Нехай в початковий момент часу ця трубка має циліндричну форму з внутрішнім радіусом R та товщиною $d < R$ (рис.1), причому товщина не припускається нескінченно малою. Спростимо задачу припущенням осесиметричності, тобто положення фізично малих частинок трубки не залежить від φ ($\frac{\partial u_k}{\partial \varphi} = 0$) та у цих частинок координата φ не змінюється з часом ($u_2 = 0$). Тоді вектор деформації $\bar{u}$ матиме такі складові: $\bar{u} = \{u_1(r, z, t), 0, u_3(r, z, t)\}$

Ненульові фізичні складові u_{ik} , A_{ik} будуть такими [5]:

$$\begin{aligned} u_{11} &= \frac{\partial u_1}{\partial r}, \quad u_{22} = \frac{u_1}{r}, \quad u_{33} = \frac{\partial u_3}{\partial z}, \\ u_{13} &= u_{31} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial r} \right), \\ A_{13} &= -A_{31} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial r} - \frac{\partial u_1}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

Система рівнянь (12) для осесиметричної задачі набуде вигляду

$$-\rho_* \ddot{u}_1 + \frac{\partial T_{11}}{\partial r} + \frac{\partial T_{31}}{\partial z} + \frac{T_{11} - T_{22}}{r} = 0, \quad (15a)$$

$$-\rho_* \ddot{u}_3 + \frac{\partial T_{13}}{\partial r} + \frac{\partial T_{33}}{\partial z} + \frac{T_{13}}{r} = 0, \quad (15b)$$

де T_{ik} задаються виразами (10).

Динамічних граничних умов (13) залишиться чотири:

$$T_{11} = T_{13} = 0 \quad \text{на зовнішній поверхні } r = R + d, \quad (16a)$$

$$T_{11} = -p_1, \quad T_{13} = -p_3 \quad \text{на внутрішній поверхні } r = R. \quad (16b)$$

3. Статичний розтяг трубки з рідиною

Візьмемо до розгляду попередньо описану задачу, рідину в трубці припустимо ідеальною, а течію – відсутньою. Нехай трубка знаходиться під впливом постійного в часі трансмурального тиску p_{tr} , що діє зсередини рідини. Тоді для статичного вектора деформації $\bar{u}_{cm} = \{\bar{u}_1(r), 0, 0\}$ рівняння (15) та граничні умови (16) матимуть вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{T}_{11}}{\partial r} + \frac{\bar{T}_{11} - \bar{T}_{22}}{r} &= 0, \\ \bar{T}_{11} &= 0 \quad \text{при } r = R + d, \\ \bar{T}_{11} &= -p_{tr} \quad \text{при } r = R. \end{aligned} \quad (17)$$

Інші рівняння та граничні умови виконуватимуться тотожно.

Розв'язок цієї задачі статички:

$$\bar{u}_1(r) = ar + \frac{b}{r}, \quad (18)$$

Рис. 1. Схема гіперпружного твердого тіла з рідиною в початковий момент часу

де a і b можна знайти підстановкою (18) в граничні умови:

$$a = \frac{p_{tr} R^2}{(R+d)^2 - R^2} \cdot \frac{(1+\sigma)(1-2\sigma)}{E},$$

$$b = \frac{p_{tr} R^2 (R+d)^2}{(R+d)^2 - R^2} \cdot \frac{1+\sigma}{E} \quad (19)$$

Відмінні від нуля компоненти тензора деформації (14):

$$\bar{u}_{11} = \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial r}, \quad \bar{u}_{22} = \frac{\bar{u}_1}{r} \quad (20)$$

4. Проходження пульсових хвиль в поперечно напруженій трубці

Розглянемо задачу п. 2, де в поперечно напруженій трубці із трансмуральним тиском p_{tr} проходить пульсова хвиля, що викликає збурення вектора деформації $\tilde{u}_1(r, z, t)$ та $\tilde{u}_3(r, z, t)$, тобто він набуває вигляду:

$$\tilde{u}(r, z, t) = \{\tilde{u}_1(r, z, t) + \tilde{u}_3(r, z, t), \tilde{u}_3(r, z, t)\} \quad (21)$$

Візьмемо до уваги лише *квадратичне наближення та геометричну нелінійність*, тобто константи $B_1 = B_2 = B_3 = C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = 0$ та з (10):

$$T_{ik} = T_{ik}^{(1S)} + T_{ik}^{(2S)} + T_{ik}^{(2A)}, \quad (22)$$

$$\text{де } T_{ik}^{(1S)} = 2A_1 K_{11} \delta_{ik} + 2A_2 u_{ik}, \quad (22a)$$

$$T_{ik}^{(2S)} = (A_1 K_{22} - A_1 (A^2)_{ii}) \delta_{ik} + 2A_1 K_{11} u_{ik} + A_2 (u^2)_{ik} - A_2 (A^2)_{ik}, \quad (22b)$$

$$T_{ik}^{(2A)} = 2A_1 K_{11} A_{ik} + A_2 (uA + Au)_{ik}. \quad (22в)$$

Підстановка (21) в (14) дає можливість розкласти компоненти тензорів u_{ij} , A_{ij} та інваріанти K_{ii} на статичні та збурені складові:

$$u_{ij} = \bar{u}_{ij} + \tilde{u}_{ij}, \quad A_{ij} = \bar{A}_{ij} + \tilde{A}_{ij}, \quad K_{ii} = \bar{K}_{ii} + \tilde{K}_{ii} \quad (23)$$

Вважаючи $\bar{u}_1(r, z, t)$, $\bar{u}_3(r, z, t)$, $\bar{u}_3(r, z, t)$ малими, після підстановки (23) в квадратичні складові (22б) та (22в) нехтуємо доданками типу $\bar{u}_i^2$, $\tilde{u}_i^2$, $\bar{A}_i^2$ (як другого порядку малості), залишаючи перехресні доданки типу $\bar{u}_i \tilde{u}_k$, $\bar{u}_i \tilde{A}_k$. В результаті залишаються лінеаризовані по малих збуреннях квадратичні складові $\tilde{T}_{ik}^{(2S)}$ та $\tilde{T}_{ik}^{(2A)}$.

Враховуючи (23), лінійну складову (22а) можна також розкласти на статичну та збурену

частини: $T_{ik}^{(1S)} = \bar{T}_{ik}^{(1S)} + \tilde{T}_{ik}^{(1S)} = 2A_1 \bar{K}_{11} \delta_{ik} + 2A_2 \bar{u}_{ik} + 2A_1 \tilde{K}_{11} \delta_{ik} + 2A_2 \tilde{u}_{ik}$. Тоді з (22) загальний вигляд складових несиметричного тензора деформацій буде таким:

$$T_{ik} = \bar{T}_{ik}^{(1S)} + \tilde{T}_{ik}^{(1S)} + \tilde{T}_{ik}^{(2S)} + \tilde{T}_{ik}^{(2A)} = \bar{T}_{ik} + \tilde{T}_{ik} \quad (24)$$

До динамічних граничних умов (16) додається кінематична умова непроникнення рідини через матеріал трубки на внутрішній

$$\text{поверхні} \quad [6] \quad \left. \frac{\partial u_1}{\partial t} \right|_{r=R} = \left. \frac{\partial \varphi_f}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad \text{де}$$

$\varphi_f(r, z, t) = \varphi(r) e^{i(kz - \omega t)} = DI_0(kr) e^{i(kz - \omega t)}$ – це розв'язок рівняння Лапласа $\Delta \varphi_f = 0$. В лінійному наближенні за відсутності стаціонарного плинку нормальний тиск на стінку судини, що входить в граничну умову (16б), матиме вигляд

$$p_1 = p_{tr} - \rho_f \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad [7]. \quad \text{Оскільки рідина припускається ідеальною, тангенціальна складова } p_3 = 0.$$

Врахування виразу для φ_f та $\tilde{u}_1(r, z, t) = \tilde{u}_1(r) e^{i(kz - \omega t)}$ дозволяє замість п'яти записати чотири граничні умови [6]:

$$\begin{cases} \tilde{T}_{11}(R) + m_0 \rho_w R^2 \omega^2 \tilde{u}_1(R) = 0 \\ \tilde{T}_{13}(R) = 0 \\ \tilde{T}_{11}(R+d) = 0 \\ \tilde{T}_{13}(R+d) = 0 \end{cases} \quad (25)$$

де $m_0 = \frac{\rho_f}{\rho_w} \frac{I_0(kR)}{kR I_1(kR)}$ – приєднана безрозмірна маса.

5. Розв'язок методом степеневих рядів

Розкладемо вектор зміщення в ряд по ступенях змінної r в околі внутрішньої стінки $r = R$:

$$\tilde{u}_k(r, z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{u}_k)_n(z, t) \cdot (r - R)^n, \quad k = 1, 3, \quad R < r < R + d \quad (26)$$

Підставляючи аналогічні розклади для тензорів $\tilde{u}_{ik}$, $\tilde{A}_{ik}$ та $\tilde{T}_{ik}$ ((14) і (24)) в систему рівнянь (25), отримаємо рекурентні співвідношення для послідовного обчислення коефіцієнтів $(\tilde{u}_k)_n(z, t)$

розкладу (26) для $n = 2, 3, \dots$. Подібний метод вже було застосовано в [6], але для лінійної задачі.

Для зручності чисельних розрахунків введемо безрозмірювання:

$$\omega = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{E(1-\sigma)}{(1+\sigma)(1-2\sigma)\rho_w}} \omega_B, \quad k = \frac{1}{R} k_B, \\ p_{tr} = \frac{E(1-\sigma)}{(1+\sigma)(1-2\sigma)} p_{trB}, \quad r = R(1+r_B) \quad (27)$$

Всі величини з розмірністю довжини нормуються на внутрішній радіус трубки R .

У випадку проходження пульсової хвилі маємо гармонічну залежність від змінних z, t : $\tilde{u}_k \sim e^{i(kz - \omega t)}$, і диференціальні рівняння (15) по змінній r перетворюються на алгебраїчні співвідношення для послідовного знаходження коефіцієнтів $(\tilde{u}_1)_{n+2}$ і $(\tilde{u}_3)_{n+2}$ для всіх $n = 0, 1, 2, \dots$. Всі подальші коефіцієнти розкладу виражаються через чотири перших $(\tilde{u}_1)_0, (\tilde{u}_1)_1, (\tilde{u}_3)_0, (\tilde{u}_3)_1$, що можуть бути знайдені із чотирьох граничних умов (25) шляхом підстановки в них розкладів $\tilde{T}_{11}, \tilde{T}_{13}$ та $\tilde{u}_1$ по r .

Отримана система чотирьох лінійних однорідних рівнянь має нетривіальний розв'язок за умови рівності детермінанта нулю. Задаючи конкретні значення безрозмірних параметрів, з цієї системи рівнянь чисельними методами можна знайти закон дисперсії $\omega_B(k_B)$ при проходженні пульсової хвилі по еластичній судині зі скінченною товщиною стінки.

6. Аналіз результатів

Врахуємо вплив попередньо напруженого стану судини на проходження пульсової хвилі, ввівши постійний в часі трансмуральний тиск p_{tr} . Аналіз законів дисперсії за різних значень p_{tr} свідчить, що при перевищенні трансмуральним тиском певного порогового значення з'являються такі інтервали хвильових чисел k , для яких виконується умова нестійкості форми судини $\text{Im } \omega > 0$ [3].

Залежність $\text{Im } \omega(k)$ для різних значень трансмурального тиску із зазначеного інтервалу подано на рис. 2. Очевидно, що тут кожному значенню p_{tr} відповідає таке значення хвильового числа k_{cr} або довжини хвилі $\lambda_{cr} = \frac{2\pi}{k_{cr}}$, при

якому $\text{Im } \omega$ буде максимальним, тобто спостерігатиметься максимальний інкремент необмежен-

ного зростання розмірів судини $\tilde{u}_k \sim e^{i(kz - \omega t)}$ (нестійкості форми) [3]. Отже, при певному значенні трансмурального тиску вище порогового судина сама обере ту довжину хвилі λ_{cr} , при якій найшвидше зростатиме нестійкість форми, і саме ця довжина хвилі визначить характерну відстань між стяжками судини.

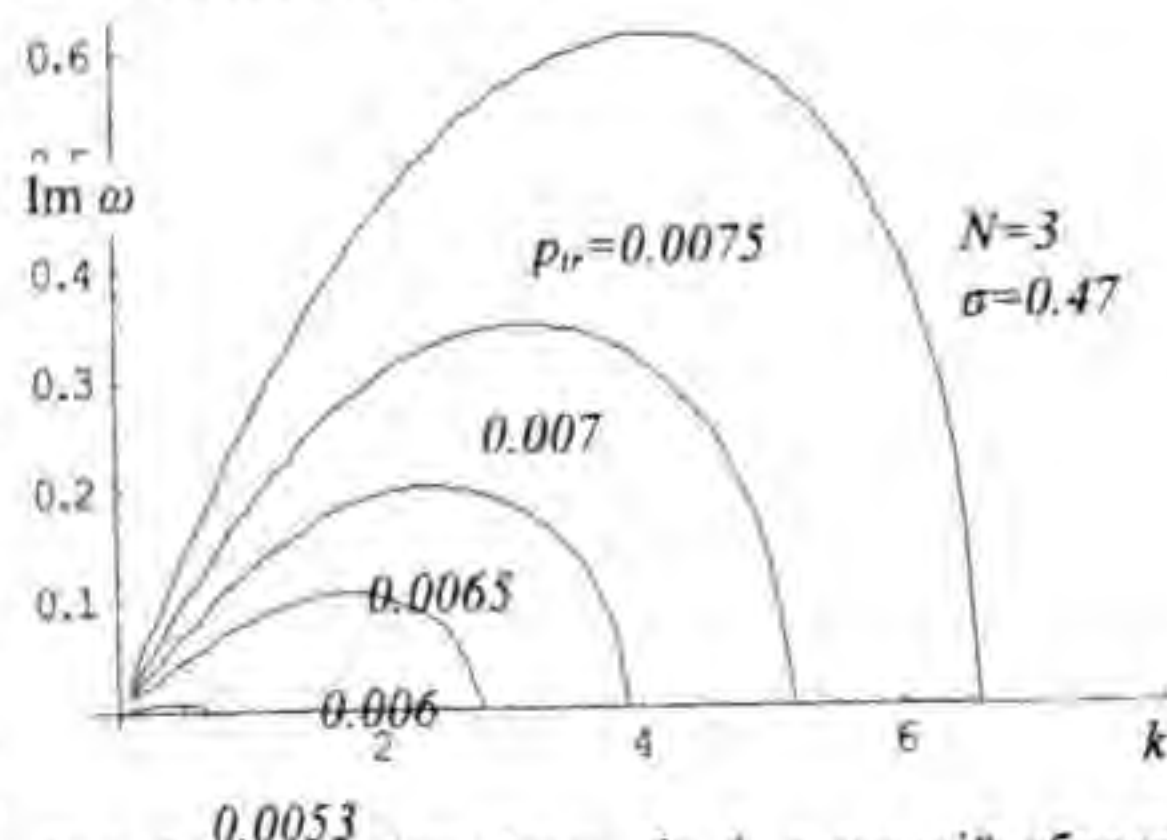


Рис. 2. Залежність $\text{Im } \omega$ від k в першій області нестійкості форми.

При подальшому зростанні p_{tr} вище 0.0075 перша довгохвильова область нестійкості переходить у другу – короткохвильову, що демонструють графіки залежності $\text{Im } \omega(k)$ на рис. 3. Пунктирною лінією позначено роздвоєння області нестійкості при $p_{tr} = 0.0075$. Для другої області характерне швидке зникнення (вже при $p_{tr} = 0.0082$) максимального інкремента наростання $\text{Im } \omega$. Обчислення показують, що при більшій кількості N членів розкладу (26) критичне значення k_{cr} зникає ще швидше.

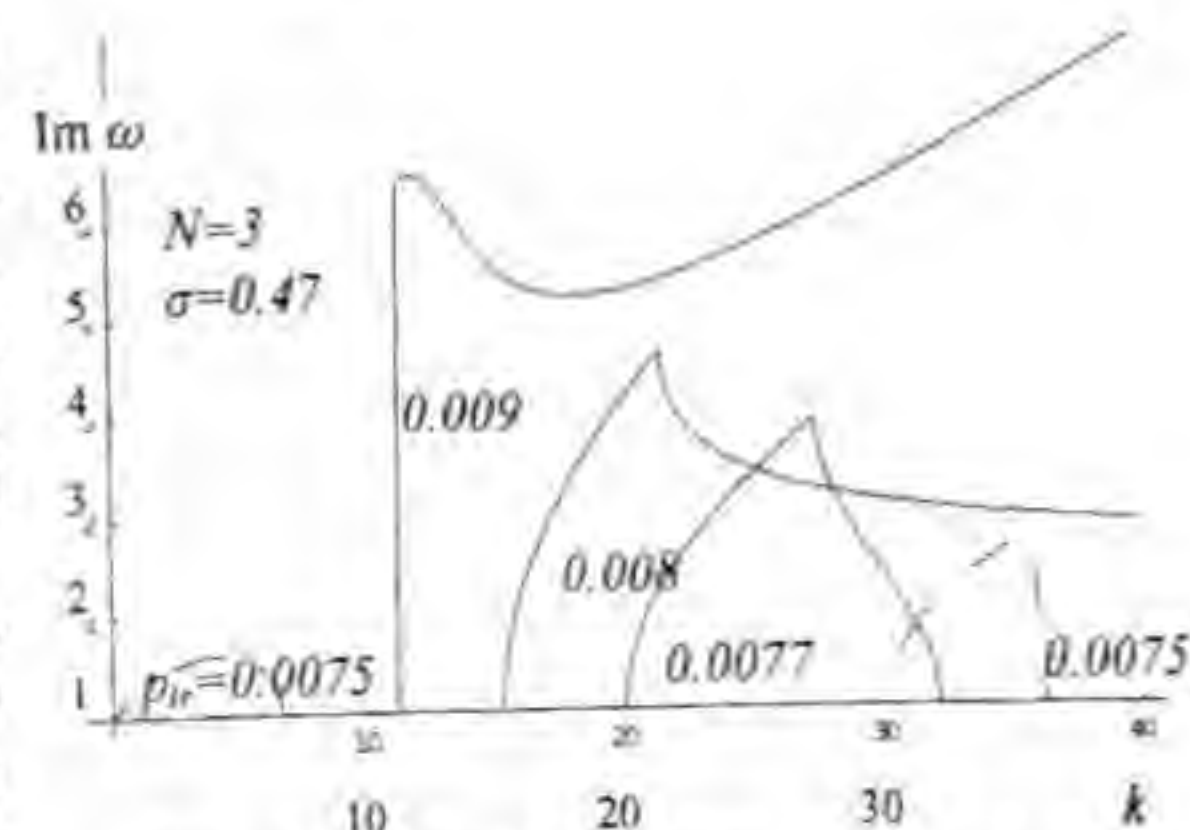


Рис. 3. Залежність $\text{Im } \omega$ від k в другій області нестійкості форми.

Якщо розглянути $\text{Re } \omega$ з другої області нестійкості ($p_{tr} > 0.0075$) при різних значеннях

трансмурального тиску (рис. 4), стає очевидним, що в цій області разом з довгими пульсовими хвилями поширюються коротші хвилі з від'ємною груповою швидкістю $\frac{d\omega}{dk}$, описані в [3, 8] на основі теорії оболонок та гіпотези Кірхгофа-Лява.

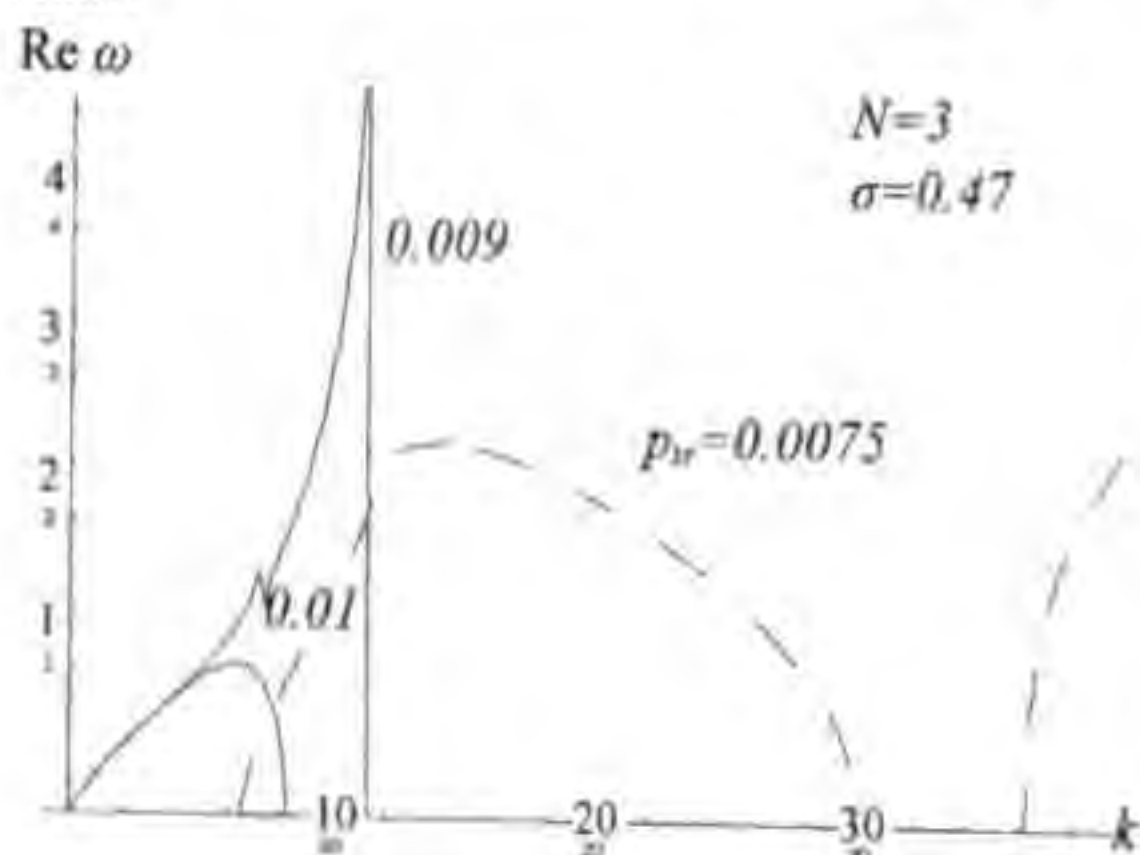


Рис. 4. Закон дисперсії для $\text{Re } \omega$ в другій області нестійкості форми з появою від'ємної групової швидкості.

Таким чином, можна зробити висновок, що нелінійна теорія оболонок в [3] описувала саме другу область нестійкості. Справді, при граничному переході до теорії оболонок $\frac{d}{R} \rightarrow 0$ чисельні розрахунки показують, що перша область нестійкості (рис. 2) звужується та зникає. Це означає, що більш загальна нелінійна теорія нетонкої стінки виявляє якісно нову, довгохвильову область нестійкості форми судини порівняно з нелінійною теорією оболонок.

Розглянемо конкретні чисельні значення параметрів у відповідності до реальних показників висхідної аорти собаки [1], а саме: $\sigma = 0.47$, $\frac{d}{R} = 0.1$, $\frac{\rho_l}{\rho_s} = 1$, $R = 0.7$ см, $\rho_s = 10^3$ кг/м³, $E = 5 \cdot 10^5$ Н/м². Перейшовши до розмірних величин (27), можна встановити, що пороговий трансмуральний тиск першої області нестійкості форми судини $p_{cr1} = 119.3$ мм.рт.ст., а поріг другої області – $p_{cr2} = 168.8$ мм.рт.ст. Такі значення є цілком реальними для функціонування кровоносної системи живого організму, що підкреслює важливість дослідження явища нестійкості форми судини задля запобігання різного роду негативним наслідкам.

7. Висновки

Виписано загальні динамічні рівняння руху гіперпружного ізотропного тіла в рамках 9-ти константної кубічно-нелінійної моделі деформованого континуума стосовно аналізу кровоносної судини. Застосовано метод асимптотичного розкладу вектора зміщення відносно малого параметра.

Встановлено наявність двох областей нестійкості форми судини, розташованих одна за одною, при перевищенні відповідних порогових значень трансмуральних тисків. Перша (довгохвильова) область характерна наявністю критичних значень довжини хвилі λ_{cr} , на яких найшвидше наростає нестійкість форми. Друга область, що існує за вищих p_{tr} , характерна наявністю окрім довгих пульсових хвиль ще і хвиль з від'ємною груповою швидкістю [3, 8].

Список використаних джерел

1. Каро К., Педли Т., Шротер Р., Сид У. Механика кровообращения. – М: Мир. – 1981. – 372 с.
2. Green A.E., Adkins J.E. Large elastic deformations and nonlinear continuum mechanics. – Oxford: Clarendon Press, 1960. – 348 p.
3. Лукомський Д.В., Селезов І.Т. Виникнення нестійкості форми при поширенні гідропружних хвиль в еластичній трубці, заповненій рідиною // Наукові записки НПУ імені М.П. Драгоманова. – 2002. – №3. – с. 132-145.
4. Болотин В.В. Неконсервативные задачи теории упругой устойчивости. – М.: Физматгиз, 1961. – 339 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. – М: Наука, – 1965. – 204 с.
6. Лукомський Д.В. Поширення пульсових хвиль у великих кровоносних судинах з довільною товщиною стінки // Акустичний вісник. – 2008. – 11, № 4. – с. 31-35.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. – 4-е изд. – М: Наука. – 1988. – 736 с.
8. Селезов І.Т., Лукомський Д.В. Распространение пульсовых волн давления в кровеносном сосуде за пороговым значением трансмурального давления // Прикладна гідромеханіка. – 2008. – 10, №4. – с. 65-69.

Надійшла до редколегії 10.03.10

УДК 519.21

Н.В.Куца, студентка V курсу
механіко-математичного факультету
Київського національного університету імені
Тараса Шевченка.
В.В.Попов, кандидат фізико-математичних
наук, доцент кафедри математичної фізики.

N.V. Kutsa, student of the 5th course
Mechanics & Mathematics faculty Taras
Shevchenko National University of Kyiv.
V.V.Popov, candidate of sciences in physics and
mathematics, associated professor of
Department of Mathematical Physics.

Чисельне розв'язування крайової задачі з нахиленою похідною

Numerical solution of boundary problem with inclined derivative

У даній роботі розглядається побудова
чисельного розв'язку крайової задачі з
нахиленою похідною за допомогою методу
граничних інтегральних рівнянь.

In the paper I consider construction nu-
merical solution of boundary problem with in-
clined derivative using boundary integral equation
method.

Ключові слова: гармонічна функція,
крайова задача, метод граничних інтегральних
рівнянь.

Key words: harmonic function, boundary
problem, boundary integral equation method.

E-mails: Kutsanata@ukr.net

Статтю представив: член редколегії професор Перестюк М.О.

1 Постановка задачі

$$\bar{l} = (l_x, l_y) \text{ з координатами } l_x = \frac{a(x,y)}{\sqrt{a^2(x,y)+b^2(x,y)}}, \\ l_y = \frac{b(x,y)}{\sqrt{a^2(x,y)+b^2(x,y)}}.$$

У даній роботі розглядається метод побудови
чисельного розв'язку крайової задачі з
нахиленою похідною.

Розв'язок цієї задачі можна отримати
звівши її до задач Рімана та лінійного
спряження([1]), якщо відоме конформне
відображення області Ω на канонічну.

Ця задача виникає при дослідженні
процесів дифузії в областях з відбиванням від
межі, задач гідродинаміки та електродинаміки.
Загалом вона формулюється так:

2 Побудова чисельного розв'язку за допомогою методу граничних інтегральних рівнянь

знайти гармонічну в області Ω і неперервну
разом зі своїми частковими похідними першого
порядку в $\bar{\Omega}$ функцію $u(x,y)$, що на $\partial\Omega$
задовольняє умову

При використанні межі області та методу
граничних інтегральних рівнянь зручно
крайову умову (1) переписати через координати
вектора зовнішньої нормалі $\bar{n} = (n_x, n_y)$ до
межі $\partial\Omega$. Таким чином маємо задачу:

$$a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x} + b(x,y)\frac{\partial u}{\partial y} = c(x,y), (x,y) \in \partial\Omega, (1)$$

де a, b, c — задані на $\partial\Omega$ дійсні функції, причому
 $a^2 + b^2 \neq 0$ ([2]).

Назва задачі пояснюється тим, що цю де:
умову можна переписати у вигляді

$$\begin{cases} \Delta u(x,y) = 0, & (x,y) \in \Omega; \\ \alpha u_n + \beta u_s = g(x,y), & (x,y) \in \partial\Omega, \end{cases} (2)$$

$$\alpha = \alpha(x,y) = l_x n_x + l_y n_y;$$

$$\beta = \beta(x,y) = l_x n_y - l_y n_x;$$

$$g(x,y) = \frac{c(x,y)}{\sqrt{a^2(x,y)+b^2(x,y)}}.$$

$$\frac{\partial u}{\partial l} = \frac{c}{\sqrt{a^2 + b^2}},$$

де $\frac{\partial u}{\partial l}$ позначає похідну в напрямку вектора межа області гладкою, то для неї виконується

тотожність Гріна, яку можна записати у вигляді $G(u) = 0$, де:

$$G(u) = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega} \left(u_n \ln \frac{1}{r} - u \frac{d}{dn} \ln \frac{1}{r} \right) d\sigma - \begin{cases} \frac{1}{2} u(x, y), & \text{якщо } (x, y) \in \partial\Omega \\ u(x, y), & \text{якщо } (x, y) \in \Omega \\ 0, & \text{якщо } (x, y) \in \bar{\Omega}. \end{cases} \quad (3)$$

Введемо до розгляду функцію v таким чином, щоб u та v утворювали спряжену гармонічну пару. Таким чином, додатково маємо рівність $G(v) = 0$.

Для випадку $(x, y) \in \partial\Omega$ розглянемо задачу, що еквівалентна вихідній:

$$\begin{cases} \alpha u_n + \beta u_s = g; \\ \begin{cases} G(v) = 0, & \alpha = 0; \\ G(u) = 0, & \alpha \neq 0. \end{cases} \end{cases}$$

Застосовуючи умови спряження та (3) отримаємо:

$$\begin{cases} -\alpha v_s + \beta u_s = g; \\ \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega} \left(u_s \ln \frac{1}{r} - v \frac{d}{dn} \ln \frac{1}{r} \right) d\sigma = \frac{1}{2} v(s), & \alpha = 0; \\ \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega} \left(-v_s \ln \frac{1}{r} - u \frac{d}{dn} \ln \frac{1}{r} \right) d\sigma = \frac{1}{2} u(s), & \alpha \neq 0. \end{cases} \end{cases} \quad (4)$$

Апроксимуємо шукані функції u і v в (4) лінійним сплайном, маємо:

$$u(s) = u_{i-1} Z_1(s) + u_i Z_2(s); \quad (5)$$

$$v(s) = v_{i-1} Z_1(s) + v_i Z_2(s), \quad (6)$$

де $s \in \Delta_i = [s_{i-1}, s_i]$ — i -та ділянка розбиття межі області, $i = \overline{1, m}$. Тут

$$Z_1(s) = 1 - \frac{s - s_{j-1}}{h_i}; \quad Z_2(s) = \frac{s - s_{j-1}}{h_i},$$

з (5)-(6) безпосереднім диференціюванням можна апроксимувати похідні:

$$u_s(s) = u_{i-1} Q_1(s) + u_i Q_2(s); \quad (7)$$

$$v_s(s) = v_{i-1} Q_1(s) + v_i Q_2(s), \quad (8)$$

де $Q_1(s) = -\frac{1}{h_i}$, $Q_2(s) = \frac{1}{h_i}$, $s \in \Delta_i$, $i = \overline{1, m}$.

Інтегро-диференціальні рівняння в (4) з використанням апроксимацій (5)-(8) зводяться до системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Під час формування цієї системи зручно скористатись параметричним представленням межі $\partial\Omega$:

$$\begin{cases} x = p(s); \\ y = q(s), \end{cases}$$

що дає суттєве спрощення при обчисленні коефіцієнтів. Так вектор зовнішньої нормалі

$\bar{n} = (q'(s), -p'(s))$. Ядра рівняння приймають вигляд:

$$K_1(s, \sigma) = \ln \frac{1}{r}$$

$$K_2(s, \sigma) = \frac{d}{dn} \ln \frac{1}{r} = (n, \text{grad} \ln \frac{1}{r}) = \frac{-q'(\sigma)(p(\sigma) - p(s)) + p'(\sigma)(q(\sigma) - q(s))}{r^2},$$

де $r = \sqrt{(p(s) - p(\sigma))^2 + (q(s) - q(\sigma))^2}$. Обчислення ядра $K_2(s, \sigma)$ при $s = \sigma$ здійснюємо за формулою

$$K_2(s, \sigma) = \frac{1}{2} \frac{p''(s)q'(s) - q''(s)p'(s)}{p'^2 + q'^2},$$

що отримана переходом до границі при $\sigma \rightarrow s$.

Таким чином отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь вигляду:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{g} \\ \bar{h} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Матриці A_{11} та A_{21} та вектор $\bar{g}$ отримані з крайової умови (1), а A_{12} , A_{22} та вектор $\bar{h}$ з відповідних інтегро-диференціальних рівнянь (4). Зауважимо, що при обчисленнях потрібно враховувати логарифмічну особливість ядра $K_1(s, \sigma)$. Рекомендується обчислювати такі інтеграли квадратурними формулами найвищого алгебраїчного степеня точності. Після розв'язування системи (9) отримаємо значення функції u_n . Знаючи u_n з (3) отримаємо значення функції u на межі області. Безпосередньо всередині області значення функції u знайдеться квадратурами з (3) при $(x, y) \in \partial\Omega$.

3 Висновки

У даній роботі використаний метод граничних інтегральних рівнянь побудови чисельного розв'язку крайової задачі з нахилою похідною. Розглянутий в роботі підхід до побудови розв'язку значно послаблює обмеження на вигляд області.

Список використаних джерел

1. Гахов Ф.Д., Краевые задачи. — Москва: Издательство "Физматгиз", 1963. — 545 с.
2. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Издательство "Наука", 1973. — 736 с.

Надійшла до редколегії 04.06.2010

УДК 517.9

Петро В. Фекета, аспірант
Олексій М. Перестюк, аспірант

Стійкість інваріантного многовида нелінійної імпульсної системи диференціальних рівнянь, визначеної в прямому добутку тора і евклідового простору

Встановлено достатні умови асимптотичної стійкості інваріантного тороїдального многовида нелінійної імпульсної системи диференціальних рівнянь, визначеної в прямому добутку m -вимірного тора T^m і n -вимірного евклідового простору $\mathbb{R}^n$.

Ключові слова: імпульсні диференціальні рівняння, інваріантний многовид, асимптотична стійкість

*E-mail: petro.feketa@gmail.com

Статтю представив член редколегії проф. Перестюк М. О.

1 Вступ

Дана робота присвячена встановленню достатніх умов асимптотичної стійкості інваріантного тороїдального многовида імпульсної системи диференціальних рівнянь, визначеної в прямому добутку m -вимірного тора T^m і n -вимірного евклідового простору $\mathbb{R}^n$. Одним з об'єктів дослідження є лінійне розширення динамічної системи на торі вигляду

$$\dot{\varphi} = a(\varphi), \dot{x} = A(\varphi)x + f(\varphi), \varphi \notin \Gamma, \quad (1)$$
$$\Delta x|_{\varphi \in \Gamma} = B(\varphi)x + g(\varphi),$$

де $\varphi \in T^m$, $x \in \mathbb{R}^n$, $a(\varphi) \in C_{Lip}(T^m)$, $f(\varphi), g(\varphi)$ та $A(\varphi), B(\varphi)$ - неперервні 2π -періодичні по кожній змінній φ_j , $j = 1, \dots, m$ функції. Множина Γ є підмножиною тора T^m , а саме многовидом розмірності $m - 1$, який визначається рівнянням $\Phi(\varphi) = 0$, де $\Phi(\varphi)$ - неперервна скалярна 2π -періодична по кожній змінній φ_j , $j = 1, \dots, m$ функція. Позначимо $\varphi_t(\varphi)$ - розв'язок першого рівняння з (1), при умові $\varphi_0(\varphi) = \varphi$, а $t_i(\varphi)$, $i \in \mathbb{Z}$ - моменти часу імпульсного збурення, тобто розв'язки рівняння $\Phi(\varphi_t(\varphi)) = 0$. Додатково вважатимемо, що для будь-якого $\varphi \in T^m$ матриця $E + B(\varphi)$ не вироджена.

В роботах [1, 2] показано, що достатні умови стійкості тривіального інваріантного тора систем вигляду (1) можна сформулювати в термінах властивостей функції Ляпунова $V(\varphi, x)$ в

P. V. Feketa, PhD student
O. M. Perestyuk, PhD student

Stability of invariant manifold of nonlinear impulsive system of differential equations defined in direct product of torus and Euclidian space

Sufficient conditions for asymptotic stability of invariant toroidal manifold of nonlinear impulsive system of differential equations defined in direct product of m -measurable torus T^m and n -measurable Euclidian space $\mathbb{R}^n$ are established.

Keywords: impulsive differential equations, invariant manifold, asymptotic stability

області

$$Z_\Omega = \{\varphi \in \Omega, x \in \bar{J}_h\},$$

де $\bar{J}_h = \{x \in \mathbb{R}^n, \|x\| \leq h, h > 0\}$,

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

а Ω_φ - ω -гранична множина додатної півтраєкторії $\varphi_t(\varphi)$, $\varphi \in T^m$, $t \in [0, +\infty)$ розв'язку першого рівняння системи (1).

З огляду на це, особливу цікавість викликають системи, елементи яких володіють певними властивостями лише на ω -граничній множині Ω , а не на всьому торі T^m . Зокрема, такі системи без імпульсних збурень розглядалися в [3, 5].

2 Основні результати

Розглянемо систему (1) в припущенні, що функції $A(\varphi)$ і $B(\varphi)$ на множині Ω є сталими матрицями. Позначимо $A(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \bar{A}$, $B(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \bar{B}$. Тоді, для всіх $\varphi \in T^m$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} A(\varphi_t(\varphi)) = \bar{A},$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} B(\varphi_t(\varphi)) = \bar{B}.$$

Позначимо

$$\gamma = \max_{j=1, \dots, n} \operatorname{Re} \lambda_j(\bar{A}),$$

$$\alpha^2 = \max_{j=1, \dots, n} \lambda_j((E + \bar{B})^T(E + \bar{B})).$$

Теорема 1. Нехай в системі (1) моменти імпульсних збурень $\{t_i(\varphi)\}$ такі, що рівномірно по t існує скінченна границя

$$\lim_{\bar{T} \rightarrow \infty} \frac{i(t, t + \bar{T})}{\bar{T}} = p, \quad (2)$$

де $i(t, t + \bar{T})$ - кількість точок послідовності $\{t_i(\varphi)\}$, що належать проміжку $[t, t + \bar{T}]$. Тоді, якщо виконується нерівність

$$\gamma + p \ln \alpha < 0, \quad (3)$$

$$\Omega_\tau^t(\varphi) = X_\tau^t(\varphi) + \int_\tau^t X_s^t(\varphi)(A(\varphi_s(\varphi)) - \bar{A})\Omega_s^t(\varphi)ds + \sum_{\tau \leq t_i(\varphi) < t} X_{t_i(\varphi)+0}^t(\varphi)(B(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)) - \bar{B})\Omega_\tau^{t_i(\varphi)+0}(\varphi),$$

де $X_\tau^t(\varphi)$ - матрицант однорідної імпульсної системи з сталими коефіцієнтами

$$\dot{x} = \bar{A}x, t \neq t_i(\varphi),$$

$$\Delta x|_{t=t_i(\varphi)} = \bar{B}x,$$

залежної від $\varphi \in T^m$ як від параметра. Враховуючи, що для будь-якого $\varphi \in T^m$

$$\|X_\tau^t(\varphi)\| \leq K e^{-\mu(t-\tau)}, t \geq \tau,$$

маємо

$$e^{\mu(t-\tau)} \|\Omega_\tau^t(\varphi)\| \leq K + \int_\tau^T K e^{\mu(s-\tau)} \|A(\varphi_s(\varphi)) - \bar{A}\| \|\Omega_s^s(\varphi)\| ds + \int_\tau^t K \varepsilon_A e^{\mu(s-\tau)} \|\Omega_s^s(\varphi)\| ds + \\ + \sum_{\tau \leq t_i(\varphi) < T} K e^{\mu(t_i(\varphi)-\tau)} \|B(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)) - \bar{B}\| \|\Omega_\tau^{t_i(\varphi)+0}(\varphi)\| + \sum_{\tau \leq t_i(\varphi) < t} K \varepsilon_B e^{\mu(t_i(\varphi)-\tau)} \|\Omega_\tau^{t_i(\varphi)+0}(\varphi)\|$$

Використавши аналог нерівності Гронуолла-Беллмана для імпульсних систем [7,9], отримаємо

$$\|\Omega_\tau^t(\varphi)\| \leq K_1 e^{-(\mu - K\varepsilon_A - p \ln(1 + K\varepsilon_B))(t-\tau)},$$

де

$$K_1 = K + \int_\tau^T K e^{\mu(s-\tau)} \|A(\varphi_s(\varphi)) - \bar{A}\| \times \\ \times \|\Omega_s^s(\varphi)\| ds + \sum_{\tau \leq t_i(\varphi) < T} K e^{\mu(t_i(\varphi)-\tau)} \times \\ \times \|B(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)) - \bar{B}\| \|\Omega_\tau^{t_i(\varphi)+0}(\varphi)\|.$$

Вибираючи ε_A і ε_B так, щоб $\mu > K\varepsilon_A + p \ln(1 + K\varepsilon_B)$, одержимо

$$\|\Omega_\tau^t(\varphi)\| \leq K_1 e^{-\gamma_1(t-\tau)} \quad (5)$$

для будь-яких $t \geq \tau$ і деяких $K_1 \geq 1, \gamma_1 > 0$,

то система (1) має асимптотично стійкий інваріантний многовид $x = u(\varphi)$.

Доведення. Розглянемо однорідну систему диференціальних рівнянь

$$\dot{x} = A(\varphi_t(\varphi))x, t \neq t_i(\varphi), \quad (4)$$

$$\Delta x|_{t=t_i(\varphi)} = B(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi))x,$$

залежну від $\varphi \in T^m$ як від параметра, що відповідає системі (1). Матрицант $\Omega_\tau^t(\varphi)$ системи (4) допускає представлення [4]

де $\gamma + p \ln \alpha < -\mu < 0, K \geq 1$ і для всіх $t \geq T$, де T достатньо велике

$$\|A(\varphi_t(\varphi)) - \bar{A}\| \leq \varepsilon_A,$$

$$\|B(\varphi_t(\varphi)) - \bar{B}\| \leq \varepsilon_B,$$

З справедливості оцінки (5) випливає, що система (1) має асимптотично стійкий інваріантний многовид $x = u(\varphi)$, який задається співвідношенням

$$u(\varphi) = \int_{-\infty}^0 \Omega_\tau^0(\varphi) f(\varphi_\tau(\varphi)) d\tau + \\ + \sum_{t_i(\varphi) < 0} \Omega_{t_i(\varphi)+0}^0(\varphi) g(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)).$$

Дійсно, легко переконатися, що функція $x(t, \varphi) = u(\varphi_t(\varphi))$ є розв'язком системи (4). Це значить, що $u(\varphi)$ визначає інваріантний многовид системи (1). Нехай $x = x(t, \varphi)$ - довільний розв'язок системи (1), а $x^* = u(\varphi_t(\varphi))$ - розв'язок, що лежить на інваріантній множині. Різниця цих розв'язків допускає представлення

$$x(t, \varphi) - u(\varphi_t(\varphi)) = \Omega_0^t(\varphi)(x(0, \varphi) - u(\varphi)).$$

В силу (5) отримуємо

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t, \varphi) - u(\varphi_t(\varphi))\| = 0,$$

що й доводить асимптотичну стійкість інваріантної множини $x = u(\varphi)$. $\square$

Розглянемо збурену систему

$$\begin{aligned}\dot{\varphi} &= a(\varphi), \\ \dot{x} &= (A(\varphi) + A_1(\varphi))x + f(\varphi), \varphi \notin \Gamma, \\ \Delta x|_{\varphi \in \Gamma} &= (B(\varphi) + B_1(\varphi))x + g(\varphi).\end{aligned}\quad (6)$$

Теорема 2. Нехай в системі (6) моменти імпульсних збурень $\{t_i(\varphi)\}$ такі, що рівномірно по t існує скінченна границя

$$\lim_{\bar{T} \rightarrow \infty} \frac{i(t, t + \bar{T})}{\bar{T}} = p,$$

і виконується нерівність

$$\gamma + p \ln \alpha < 0.$$

Тоді існують такі сталі $a_1 > 0$ і $b_1 > 0$, що для будь-яких функцій $A_1(\varphi), B_1(\varphi) \in C(T^m)$ таких, що

$$\max_{\varphi \in T^m} \|A_1(\varphi)\| = a_1,$$

$$\max_{\varphi \in T^m} \|B_1(\varphi)\| = b_1,$$

система (6) має асимптотично стійкий інваріантний многовид $x = u(\varphi)$.

Доведення. Розглянемо імпульсну систему, залежну від $\varphi \in T^m$ як від параметра, що відповідає збуреній системі (6)

$$\begin{aligned}\dot{x} &= A(\varphi_t(\varphi))x + A_1(\varphi_t(\varphi))x, t \neq t_i(\varphi), \\ \Delta x|_{t=t_i(\varphi)} &= B(\varphi_{t_i(\varphi)}\varphi)x + B_1(\varphi_{t_i(\varphi)}\varphi)x.\end{aligned}\quad (7)$$

Матрицант $\Psi_\tau^t(\varphi)$ системи (7) допускає представлення

$$\begin{aligned}\Psi_\tau^t(\varphi) &= \Omega_\tau^t(\varphi) + \int_\tau^t \Omega_s^t(\varphi) A_1(\varphi_s(\varphi)) \Psi_s^t(\varphi) ds + \\ &+ \sum_{\tau \leq t_i(\varphi) < t} \Omega_{t_i(\varphi)+0}^t(\varphi) B_1(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)) \Psi_\tau^{t_i(\varphi)+0}(\varphi).\end{aligned}$$

Тоді, враховуючи (5),

$$\begin{aligned}e^{\gamma_1(t-\tau)} \|\Psi_\tau^t(\varphi)\| &\leq K_1 + \\ &+ \int_\tau^t K_1 a_1 e^{\gamma_1(s-\tau)} \|\Psi_s^t(\varphi)\| ds + \\ &+ \sum_{\tau \leq t_i(\varphi) < t} K_1 b_1 e^{\gamma_1(t_i(\varphi)-\tau)} \|\Psi_\tau^{t_i(\varphi)}(\varphi)\|.\end{aligned}$$

Використавши аналог нерівності Гронуолла-Белмана для імпульсних систем, отримаємо

$$\|\Psi_\tau^t(\varphi)\| \leq K_1 e^{-(\gamma_1 - K_1 a_1 - p \ln(1 + K_1 b_1))(t-\tau)}.$$

Нехай a_1 і b_1 такі, що $\gamma_1 > K_1 a_1 + p \ln(1 + K_1 b_1)$, тоді матрицант $\Psi_\tau^t(\varphi)$ задовольняє оцінку

$$\|\Psi_\tau^t(\varphi)\| \leq K_2 e^{-\gamma_2(t-\tau)} \quad (8)$$

для будь-яких $t \geq \tau$ і деяких $K_2 \geq 1$, $\gamma_2 > 0$. З справедливості оцінки (8) випливає, що система (6) має асимптотично стійкий інваріантний многовид $x = u(\varphi)$, який задається співвідношенням

$$\begin{aligned}u(\varphi) &= \int_{-\infty}^0 \Psi_\tau^0(\varphi) f(\varphi_\tau(\varphi)) d\tau + \\ &+ \sum_{t_i(\varphi) < 0} \Psi_{t_i(\varphi)+0}^0(\varphi) g(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)).\end{aligned}$$

$\square$

Розглянемо нелінійну систему диференціальних рівнянь з імпульсним збуренням

$$\begin{aligned}\dot{\varphi} &= a(\varphi), \dot{x} = F(\varphi, x), \varphi \notin \Gamma, \\ \Delta x|_{\varphi \in \Gamma} &= I(\varphi, x).\end{aligned}\quad (9)$$

де $\varphi \in T^m$, $x \in \bar{J}_h$, $a(\varphi) \in C_{Lip}(T^m)$, $F(\varphi, x), I(\varphi, x) \in C^{(0,2)}(T^m, \bar{J}_h)$. Перепишемо цю систему у вигляді

$$\begin{aligned}\dot{\varphi} &= a(\varphi), \\ \dot{x} &= A_0(\varphi)x + A_1(\varphi, x)x + f(\varphi), \varphi \notin \Gamma, \\ \Delta x|_{\varphi \in \Gamma} &= B_0(\varphi)x + B_1(\varphi, x)x + g(\varphi),\end{aligned}\quad (10)$$

де $A(\varphi, x) = \int_0^1 \frac{\partial F(\varphi, \tau x)}{\partial(\tau x)} d\tau$, $A_0(\varphi) = A(\varphi, 0)$, $A_1(\varphi, x) = A(\varphi, x) - A(\varphi, 0)$, $B(\varphi, x) = \int_0^1 \frac{\partial I(\varphi, \tau x)}{\partial(\tau x)} d\tau$, $B_0(\varphi) = B(\varphi, 0)$, $B_1(\varphi, x) = B(\varphi, x) - B(\varphi, 0)$, $f(\varphi) = F(\varphi, 0)$, $g(\varphi) = I(\varphi, 0)$. Як і раніше, вважатимемо, що матриці $A_0(\varphi)$ і $B_0(\varphi)$ на множині Ω сталі, тобто

$$A_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \bar{A},$$

$$B_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \bar{B}$$

і виконується співвідношення

$$\gamma + p \ln \alpha < 0.$$

Інваріантний многовид системи (10) шукатимемо ітераційним методом, запропонованим в [6, 8]. За початковий многовид M_0 візьмемо

многовид $x = 0$, за M_k - інваріантний многовид для будь-яких $t \geq \tau$ і деяких $K_2 \geq 1$, $\gamma_2 > 0$, якщо тільки

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} = a(\varphi), \dot{x} = A_0(\varphi)x + A_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi))x + \\ + f(\varphi), \varphi \notin \Gamma, \Delta x|_{\varphi \in \Gamma} = B_0(\varphi)x + \\ + B_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi))x + g(\varphi), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\max_{\varphi \in T^m} \|A_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi))\| \leq a_1,$$

$$\max_{\varphi \in T^m} \|B_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi))\| \leq b_1.$$

де $x = u_{k-1}(\varphi)$ - інваріантний многовид на $(k-1)$ -му кроці. Покажемо, що многовиди $x = u_k(\varphi)$ належать області $\bar{J}_h$. Позначимо

За теоремою 2, інваріантний многовид $x = u_k(\varphi)$ на кожному кроці k матиме вигляд

$$\max_{\varphi \in T^m} \|f(\varphi)\| \leq M_f,$$

$$\max_{\varphi \in T^m} \|g(\varphi)\| \leq M_g.$$

$$\begin{aligned} u_k(\varphi) = \int_{-\infty}^0 \Psi_{\tau}^0(\varphi, k) f(\varphi_{\tau}(\varphi)) d\tau + \\ + \sum_{t_i(\varphi) < 0} \Psi_{t_i(\varphi)+0}^0(\varphi, k) g(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)), \end{aligned} \quad (12)$$

Тоді з вигляду (12) і оцінки (13) легко бачити, що

де $\Psi_{\tau}^t(\varphi, k)$ - матрицант однорідної системи

$$\|u_k(\varphi)\| \leq \frac{K_2}{\gamma_2} M_f + \frac{K_2}{1 - e^{-\gamma_2 \theta_1}} M_g, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \dot{x} = (A_0(\varphi_t(\varphi)) + A_1(\varphi_t(\varphi), u_{k-1}(\varphi_t(\varphi))))x, \\ t \neq t_i(\varphi), \Delta x|_{t=t_i(\varphi)} = (B_0(\varphi_t(\varphi)) + \\ + B_1(\varphi_t(\varphi), u_{k-1}(\varphi_t(\varphi))))x, \end{aligned}$$

де θ_1 - найменша відстань між двома послідовними моментами імпульсних збурень. Вважатимемо, що K_2 і γ_2 такі, що $\|u(\varphi)\| \leq h$.

залежної від $\varphi \in T^m$ як від параметра і задовольняє оцінку

Встановимо умови збіжності послідовності $\{u_k(\varphi)\}$. Для цього оцінимо різницю $w_{k+1}(\varphi) = u_{k+1}(\varphi) - u_k(\varphi)$. Враховуючи, що для будь-якого $\varphi \in T^m$ $u_k(\varphi_t(\varphi))$ є обмеженим розв'язком системи (10), маємо

$$\|\Psi_{\tau}^t(\varphi, k)\| \leq K_2 e^{-\gamma_2(t-\tau)} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} u_k(\varphi_t(\varphi)) = (A_0(\varphi_t(\varphi)) + A_1(\varphi_t(\varphi), u_{k-1}(\varphi_t(\varphi))))u_k(\varphi_t(\varphi)) + f(\varphi_t(\varphi)), t \neq t_i(\varphi), \\ \Delta u_k(\varphi_t(\varphi))|_{t=t_i(\varphi)} = (B_0(\varphi_t(\varphi)) + B_1(\varphi_t(\varphi), u_{k-1}(\varphi_t(\varphi))))u_k(\varphi_t(\varphi)) + g(\varphi_t(\varphi)). \end{aligned}$$

Віднімаючи $u_{k+1}(\varphi_t(\varphi))$ і $u_k(\varphi_t(\varphi))$, легко бачити, що $w_{k+1}(\varphi) = u_{k+1}(\varphi) - u_k(\varphi)$ є інваріантним тором системи

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} = a(\varphi), \dot{x} = (A_0(\varphi) + A_1(\varphi, u_k(\varphi)))x + (A_1(\varphi, u_k(\varphi)) - A_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi)))u_k(\varphi), \varphi \notin \Gamma, \\ \Delta x|_{\varphi \in \Gamma} = (B_0(\varphi) + B_1(\varphi, u_k(\varphi)))x + (B_1(\varphi, u_k(\varphi)) - B_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi)))u_k(\varphi). \end{aligned}$$

Тоді, враховуючи (14),

$$\begin{aligned} \max_{\varphi \in T^m} \|u_{k+1}(\varphi) - u_k(\varphi)\| \leq \frac{K_2}{\gamma_2} \|A_1(\varphi, u_k(\varphi)) - A_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi))\| \|u_k(\varphi)\| + \\ + \frac{K_2}{1 - e^{-\gamma_2 \theta}} \|B_1(\varphi, u_k(\varphi)) - B_1(\varphi, u_{k-1}(\varphi))\| \|u_k(\varphi)\|. \end{aligned}$$

Нехай функції $A_1(\varphi, x)$ і $B_1(\varphi, x)$ - L_B відповідно. Тоді ліпшицеві зі сталими Ліпшиця L_A та

$$\begin{aligned} \max_{\varphi \in T^m} \|u_{k+1}(\varphi) - u_k(\varphi)\| \leq \frac{K_2}{\gamma_2} L_A h \|u_k(\varphi) - u_{k-1}(\varphi)\| + \\ + \frac{K_2}{1 - e^{-\gamma_2 \theta}} L_B h \|u_k(\varphi) - u_{k-1}(\varphi)\| = \left(\frac{K_2 h}{\gamma_2} L_A + \frac{K_2 h}{1 - e^{-\gamma_2 \theta}} L_B \right) \|u_k(\varphi) - u_{k-1}(\varphi)\|. \end{aligned}$$

Вважаючи, що сталі Ліпшиця L_A і L_B настільки малі, що

$$\frac{K_2 h}{\gamma_2} L_A + \frac{K_2 h}{1 - e^{-\gamma_2 h}} L_B < 1,$$

робимо висновок про рівномірну збіжність послідовності функцій $\{u_k(\varphi)\}$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} u_k(\varphi) = u(\varphi).$$

Переходячи до границі при $k \rightarrow \infty$ в (12), бачимо, що функція $u(\varphi)$ допускає зображення

$$u(\varphi) = \int_{-\infty}^0 \Psi_\tau^0(\varphi) f(\varphi_\tau(\varphi)) d\tau + \\ + \sum_{t_i(\varphi) < 0} \Psi_{t_i(\varphi)+0}^0(\varphi) g(\varphi_{t_i(\varphi)}(\varphi)),$$

де $\Psi_\tau^t(\varphi)$ - матрицант системи

$$\dot{x} = (A(\varphi_t(\varphi)) + A_1(\varphi_t(\varphi), u(\varphi_t(\varphi))))x, t \neq t_i(\varphi), \\ \Delta x|_{t=t_i(\varphi)} = (B(\varphi_t(\varphi)) + B(\varphi_t(\varphi), u(\varphi_t(\varphi))))x,$$

який задовольняє оцінку

$$\|\Psi_\tau^t(\varphi)\| \leq K_2 e^{-\gamma_2(t-\tau)}$$

для будь-яких $t \geq \tau$ і деяких $K_2 \geq 1$, $\gamma_2 > 0$.
Отже, справедлива теорема

Теорема 3. Нехай в системі (10) матриці $A_0(\varphi)$ і $B_0(\varphi)$ на множині Ω сталі, тобто

$$A_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \tilde{A}, \\ B_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \tilde{B},$$

рівномірно по t існує скінченна границя

$$\lim_{\tilde{T} \rightarrow \infty} \frac{i(t, t + \tilde{T})}{\tilde{T}} = p \quad (15)$$

і виконується співвідношення

$$\gamma + p \ln \alpha < 0, \quad (16)$$

де

$$\gamma = \max_{j=1, \dots, n} \operatorname{Re} \lambda_j(\tilde{A}),$$

$$\alpha^2 = \max_{j=1, \dots, n} \lambda_j((E + \tilde{B})^T (E + \tilde{B})).$$

Тоді існують достатньо малі сталі a_1 і b_1 і достатньо малі сталі Ліпшиця L_A і L_B такі, що для будь-якої матриці $F(\varphi, x) \in C(T^m, \bar{J}_h)$ такої, що

$$\max_{\varphi \in T^m, x \in \bar{J}_h} \|A_1(\varphi, x)\| \leq a_1,$$

$$\max_{\varphi \in T^m, x \in \bar{J}_h} \|B_1(\varphi, x)\| \leq b_1$$

і для будь-яких $x', x'' \in \bar{J}_h$

$$\|A_1(\varphi, x') - A_1(\varphi, x'')\| \leq L_A \|x' - x''\|,$$

$$\|B_1(\varphi, x') - B_1(\varphi, x'')\| \leq L_B \|x' - x''\|$$

система (9) має асимптотично стійкий інваріантний многовид.

3 Частинні випадки і зауваження

Розглянемо деякі частинні випадки системи (10). Нехай матриця $B_0(\varphi)$ на ω -граничній множині Ω тотожно рівна нулю, а матриця $A_0(\varphi)$ на ω -граничній множині Ω як і раніше стала, тобто

$$A_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \tilde{A}, \\ B_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = 0.$$

Тоді для асимптотичної стійкості інваріантного тора $x = u(\varphi)$ системи (9) замість умови (16) достатньо вимагати, щоб

$$\max_{j=1, \dots, n} \operatorname{Re} \lambda_j(\tilde{A}) < 0.$$

Аналогічно, у випадку, коли

$$A_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = 0, \\ B_0(\varphi)|_{\varphi \in \Omega} = \tilde{B}$$

умова (16) матиме вигляд

$$\max_{j=1, \dots, n} \lambda_j((E + \tilde{B})^T (E + \tilde{B})) < 1.$$

Розглянемо систему (9) у випадку, коли множину Γ задано наступним чином

$$\Gamma = \{\varphi \in T^m : \langle b, \varphi \rangle = 0 \pmod{2\pi}\}, \quad (17)$$

де $b_i > 0$ - додатні раціональні числа ($i = 1, \dots, m$). Надалі, не зменшуючи загальності, вважатимемо, що компоненти b_i , $i = 1, \dots, m$ вектора b - цілі числа з найбільшим спільним дільником 1.

Лема 1. Нехай поверхню Γ задано співвідношенням (17). Якщо для довільного $\varphi \in T^m$ функції $a_i(\varphi) > 0$, $i = 1, \dots, m$, то відстань між будь-якими двома послідовними моментами імпульсного збурення в системі (9) допускає оцінку

$$t_{i+1}(\varphi) - t_i(\varphi) \geq \frac{2\pi}{\|b\|}.$$

Доведення. Легко бачити, що для будь-якого $\varphi \in T^m$

$$\langle b, a(\varphi) \rangle \neq 0,$$

тобто перетини траекторій $\varphi_t(\varphi)$ з поверхнею Γ трансверсальні. Нехай траекторія $\varphi_t(\varphi)$ перетинає деякий фрагмент поверхні Γ , а саме

$$\Gamma_k = \{\varphi \in \Gamma : \langle b, \varphi \rangle = 2k\pi\}, \varphi^{(1)} \in \Gamma_k.$$

З додатності $a_i(\varphi)$ і b_i ($i = 1, \dots, m$) випливає, що наступний імпульс виникне в момент перетину траекторією $\varphi_t(\varphi)$ фрагменту

$$\Gamma_{k+1} = \{\varphi \in \Gamma : \langle b, \varphi \rangle = 2(k+1)\pi\}, \varphi^{(2)} \in \Gamma_{k+1}.$$

Тоді

$$\langle b, \varphi^{(2)} - \varphi^{(1)} \rangle = 2\pi.$$

Звідки

$$\theta = \min_{\substack{\varphi^{(1)} \in \Gamma_k, \\ \varphi^{(2)} \in \Gamma_{k+1}}} \|\varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}\| = \frac{2\pi}{\|b\|}.$$

□

Отже, ми довели, що відстань між будь-якими двома моментами імпульсного збурення допускає оцінку

$$t_{i+1}(\varphi) - t_i(\varphi) \geq \frac{2\pi}{\|b\|}.$$

Легко показати, що у випадку, коли функції $a_i(\varphi)$, $i = 1, \dots, m$ є додатними сталими, тобто $\dot{\varphi} = \omega$, $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_m)$, $\omega_i > 0$, $i = 1, \dots, m$, моменти імпульсного збурення є рівновіддаленими і відстань θ між ними рівна

$$\theta = \frac{2\pi \|\omega\|}{\langle b, \omega \rangle}.$$

Тоді умова (16) матиме вигляд

$$\gamma + \frac{\langle b, \omega \rangle}{2\pi \|\omega\|} \ln \alpha < 0.$$

Розглянемо випадок, коли відстань між моментами імпульсного збурення допускає верхню і нижню оцінки

$$0 < \theta_1 \leq t_{i+1}(\varphi) - t_i(\varphi) \leq \theta_2, i \in \mathbb{Z}.$$

Тоді, якщо $\gamma > 0$, тобто система без імпульсних збурень нестійка, а стійкість імпульсної системи досягається за рахунок імпульсних збурень (так званий випадок імпульсної стабілізації), умову (16) можна записати у вигляді

$$\gamma + \frac{1}{\theta_2} \ln \alpha < 0.$$

Якщо ж $\gamma < 0$, тобто система без імпульсних збурень асимптотично стійка, достатньою буде умова

$$\gamma + \frac{1}{\theta_1} \ln \alpha < 0.$$

4 Висновки

В роботі встановлено достатні умови асимптотичної стійкості інваріантного тороїдального многовиду нелінійної імпульсної системи диференціальних рівнянь, визначеної в прямому добутку тора і евклідового простору. Досліджено деякі частинні випадки розглядуваної системи.

Список використаних джерел

1. Дудзяний С. І. Стійкість інваріантних торів імпульсних систем // Дис. на здобуття наук. ступеня канд. фіз.-мат. наук — 1999. — 124 с.
2. Дудзяний С. І., Перестюк М. О. Про стійкість тривіального інваріантного тора одного класу систем з імпульсним збуренням // Укр. мат. журн. — 1998. — 50, №3. — с. 338-349.
3. Перестюк М. О., Балоба С. І. Існування інваріантного тора одного класу систем диференціальних рівнянь // Нелінійні коливання. — 2008. — 11, №4. — с. 520-529.
4. Перестюк Н. А., Плотников В. Ф., Самойленко А. М., Скрипник Н. В. Импульсные дифференциальные уравнения с многозначной и разрывной правой частью. — К.: Инст. мат. НАН Украины, 2007. — 427 с.
5. Перестюк М. О., Фекета П. В. Існування інваріантного тора одного класу систем диференціальних рівнянь // Наук. Вісн. Ужг. ун-ту. — 2009. — 18. — с. 106-112.
6. Самойленко А. М. Элементы математической теории многочастотных колебаний. — М.: Наука, 1987. — 304 с.
7. Самойленко А. М., Перестюк Н. А. Дифференциальные уравнения с импульсным воздействием. — К.: Выща шк., 1987. — 288 с.
8. Samoilenko A. M. Elements Of The Mathematical Theory Of Multi-frequency Oscillations. — Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1991. — 336 p.
9. Samoilenko A. M., Perestyuk N. A. Impulsive differential equations. — Singapore: World Scientific, 1995. — 462 p.

Надійшла до редколегії 20.03.2010

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 519.81

Антосіак П.П., асистент.

Узагальнення медіанного підходу на випадок нечітких індивідуальних переваг

У роботі узагальнено підхід, що базується на понятті відстані між експертними оцінками, на випадок нечітких індивідуальних відношень переваги. Показано, що чітка строга медіана нечітких експертних переваг задовольняє нечіткі аналоги принципу Кондорсе.

Ключові слова: групове прийняття рішень, відстань між нечіткими перевагами, медіана нечітких переваг.

*E-mail: antosp@ukr.net, antosp@ukr.net

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Постановка задачі

Нехай на основі наявних експертних оцінок чи індивідуальних переваг ставиться задача побудови чіткого строгого колективного ранжування. Згідно [1] така експертиза – побудови групових ординальних експертних оцінок виникає при підведенні результатів конкурсів (мистецтво, архітектура тощо) також, як приклад, може слугувати проблема визначення списку кандидатів у народні депутати від деякої політичної сили.

В рамках класичного ординального підходу, чітка модель розглядуваної задачі, визначається таким чином.

Кожен із експертів множини $E = \{e_l : l \in N_l = \{1, \dots, n_l\}\}$ задає особисту «індивідуальну перевагу» у вигляді строгого ранжування на скінченній множині альтернатив $A = \{a_i : i \in N_A = \{1, \dots, n_A\}\}$, тобто задає строгий лінійний порядок P_l , $l \in N_l$ (асиметричне, транзитивне, зв'язне бінарне відношення) на множині A . Набір $\Pi = \{P_1, \dots, P_{n_l}\}$ індивідуальних переваг множини експертів E на множині альтернатив A називається профілем. Множину всіх профілів позначимо через P .

Нечіткість моделі зумовлена нечіткістю вхідної інформації та, зокрема, нечіткістю індивідуальних переваг.

Задання (чітке) моделі може полягати у виборі підмножини в деякому сенсі «найкращих» альтернатив, або ж у побудові агрегованого, узгодженого з урахуванням компетентності

P. P. Antosiak, assistant.

The median approach generalization in fuzzy individual preferences case is given

In work generalized approach which is based on the concept of distance between expert judgments, in case of individual fuzzy preference relations. It is shown that the crisp strict median of fuzzy expert preferences satisfies the fuzzy analogues of Condorcet principle.

Key words: group decision making, distance between fuzzy opinions, median of fuzzy preferences.

експертів, ранжування (чіткого) альтернатив, що відображає колективну думку.

У відповідності до роботи [2] найбільш універсальною формою представлення нечітких переваг є спосіб представлення переваги у вигляді нечіткого відношення переваги P на множині альтернатив A , яке характеризується функцією належності $\mu_P : A \times A \rightarrow D$, де D – область представлення степеня – переваги $\mu_P(a_i, a_j)$ альтернативи a_i над альтернативою a_j , або ж степеня впевненості в тому, що $(a_i, a_j) \in P$.

При невеликій кількості альтернатив відношення переваги експерта зручно представляти у вигляді матриці:

$$(p_{ij}^{(l)}) = (\mu_{P_l}(a_i, a_j)), \forall i, j \in N_A, \forall l \in N_l.$$

Нечіткі відношення переваги широко використовуються для моделювання переваг в задачах прийняття рішень. Зазвичай, в якості інтенсивності переваги, використовують міру відмінності у шкалі $[0, 1]$. Нечітке відношення переваги P характеризується функцією належності:

$$\mu_P : A \times A \rightarrow [0, 1].$$

Як правило, на нечітке відношення переваги накладають деякі додаткові умови. Зокрема припускають виконання властивості взаємності (оберненості):

$$\mu_P(a_i, a_j) + \mu_P(a_j, a_i) = 1, \forall i, j \in N_A, i \neq j,$$

Згідно [2], вищезгадане відношення називають *нечітким турніром*.

Важливою є властивість транзитивності, проблема щодо представлення якої у літературі соціального вибору через нечіткі індивідуальні переваги посідає центральне місце. У даній роботі розглядається найбільш слабка її форма, а саме *слабка транзитивність*, що визначається наступною умовою:

$$\min\{\mu_{ik}, \mu_{kj}\} \geq 0.5 \Rightarrow \mu_{ij} \geq 0.5, \forall i, j, k \in N_A.$$

Узагальнення медіанного підходу на випадок нечітких індивідуальних експертних переваг

Одним із основних способів, що використовується при аналізі та обробці чіткої експертної інформації, є міри близькості. Вони дозволяють визначити, наскільки близькими чи далекими є точки зору (переваги) експертів [3].

Характерною особливістю мір близькості є аксіоматичний спосіб їх введення. Міра близькості повністю визначається сукупністю вимог, яким вона повинна задовольняти. Вперше аксіоматична міра близькості та структура (система аксіом – теорема єдиності – формула для обчислення) підходу для такого роду задач була введена у роботі [4], а всі наступні роботи в цьому напрямку мали, як правило, аналогічну структуру.

Узагальнимо медіанний підхід, дотримуючись згаданої вище схеми, на випадок нечітко заданих експертних переваг.

Нехай P_1, P_2 і P_3 довільні нечіткі відношення переваги.

A1) $\delta(P_1, P_2) \geq 0, \delta(P_1, P_2) = 0$ тоді і лише тоді, коли $P_1 = P_2$.

$$A2) \delta(P_1, P_2) = \delta(P_2, P_1).$$

$$A3) \delta(P_1, P_2) \leq \delta(P_1, P_3) + \delta(P_3, P_2).$$

Скажемо, що нечітке відношення P_3 лежить між відношеннями P_1 та P_2 , якщо

$$P_1 \cap P_2 \subseteq P_3 \subseteq P_1 \cup P_2,$$

що, враховуючи операції об'єднання та перетину для нечітких множин, для елементів матриць, котрі відповідають цим відношенням, еквівалентно виконанню співвідношення

$$\min\{\mu_{ij}^{(1)}, \mu_{ij}^{(2)}\} \leq \mu_{ij}^{(3)} \leq \max\{\mu_{ij}^{(1)}, \mu_{ij}^{(2)}\}. \quad (1)$$

A4) Якщо нечітке відношення P_3 лежить між відношеннями P_1 та P_2 , то

$$\delta(P_1, P_2) = \delta(P_1, P_3) + \delta(P_3, P_2).$$

A5) Якщо P_1 і P_2 відрізняються на одній впорядкованій парі альтернатив (a_i, a_j) , то

$$\delta(P_1, P_2) = \delta_{ij}(P_1, P_2) = \mu_{(i_1 \setminus i_2) \cup (i_2 \setminus i_1)}(a_i, a_j).$$

Із визначення нечіткого турніру випливає, якщо P_1 і P_2 нечіткі турніри, які відрізняються впорядкованою парою альтернатив (a_i, a_j) , то вони відрізняються також впорядкованою парою (a_j, a_i) . Тому для нечітких турнірів введемо таку аксіому.

A5') Якщо P_1 і P_2 нечіткі турніри, які відрізняються на парі альтернатив a_i та a_j , то

$$\delta(P_1, P_2) = \delta_{ij}(P_1, P_2) + \delta_{ji}(P_1, P_2).$$

Твердження 1. Аксіоми A1)-A5) однозначно визначають міру близькості на довільних нечітких відношеннях.

Доведення. Проведемо його з допомогою індукції по кількості k – пар елементів (a_i, a_j) , для яких $\mu_{ij}^{(1)} \neq \mu_{ij}^{(2)}$. При $k=1$ справедливості твердження випливає із аксіоми A5). Припустимо правильність твердження при $k \leq r-1$ і покажемо його справедливості при $k=r$. Нехай P_1 і P_2 відрізняються на r впорядкованих парах. Побудуємо нечітке відношення P_3 , що лежить між P_1 і P_2 та відрізняється від P_1 і P_2 не більш ніж на $r-1$ впорядкованій парі елементів. Вибиремо довільну пару (a_{i_0}, a_{j_0}) серед пар, на яких P_1 та P_2 відрізняються. Визначимо P_3 наступним чином

$$\mu_{i_0 j_0}^{(3)} = \mu_{i_0 j_0}^{(2)}, \mu_{ij}^{(3)} = \mu_{ij}^{(1)}, \forall i \neq i_0, j \neq j_0. \quad (2)$$

Очевидно, що для нечітких відношень P_1, P_2, P_3 виконується (1). Тоді, згідно аксіоми A4), $\delta(P_1, P_2) = \delta(P_1, P_3) + \delta(P_3, P_2)$. P_3 відрізняється від P_1 однією парою, і тому за аксіомою A5) відстань $\delta(P_1, P_3)$ визначається однозначно. P_3 відрізняється від P_2 на $r-1$ парі і тому $\delta(P_3, P_2)$ визначається однозначно за припущенням індукції. Отже, $\delta(P_1, P_2)$ також визначається однозначно. $\square$

Твердження 2. Аксиоми A1)-A5) однозначно визначають міру близькості на слабо транзитивних нечітких відношеннях.

Доведення. Нехай (a_{i_0}, a_{j_0}) довільна пара, на якій відрізняються два слабо транзитивні нечіткі відношення P_1 та P_2 . Не обмежуючи загальності будемо вважати, що $\mu_{i_0/j_0}^{(2)} > \mu_{i_0/j_0}^{(1)}$ та визначимо нове нечітке відношення P_3 за правилом (2). Очевидно, що P_3 лежить між відношеннями P_1 і P_2 . Покажемо, що P_3 слабо транзитивне відношення. Виконання умов слабкої транзитивності для всіх можливих наборів індексів, які містять впорядковану пару (i_0, j_0) випливає із таких співвідношень:

$$\begin{aligned} \min\{\mu_{i_0/k}^{(3)}, \mu_{k/j_0}^{(3)}\} &= \min\{\mu_{i_0/k}^{(1)}, \mu_{k/j_0}^{(1)}\} \geq 0.5 \Rightarrow \mu_{i_0/j_0}^{(3)} > \mu_{i_0/j_0}^{(1)} \geq 0.5, \\ \min\{\mu_{i_0/j_0}^{(3)}, \mu_{j_0/k}^{(3)}\} &\geq \min\{\mu_{i_0/j_0}^{(1)}, \mu_{j_0/k}^{(1)}\} \geq 0.5 \Rightarrow \mu_{i_0/k}^{(3)} = \mu_{i_0/k}^{(1)} \geq 0.5, \\ \min\{\mu_{k/j_0}^{(3)}, \mu_{i_0/j_0}^{(3)}\} &\geq \min\{\mu_{k/j_0}^{(1)}, \mu_{i_0/j_0}^{(1)}\} \geq 0.5 \Rightarrow \mu_{k/j_0}^{(3)} = \mu_{k/j_0}^{(1)} \geq 0.5. \end{aligned}$$

На всіх інших трійках індексів умови слабкої транзитивності виконуються для нечіткого відношення P_3 , оскільки вони виконуються для відношення P_1 . Далі доведення твердження є аналогічним до попереднього твердження.

За аналогією до тверджень 1 та 2 можна переконатись у правильності наступних результатів.

Твердження 3. Аксиоми A1)-A5') однозначно визначають міру близькості на нечітких турнірах.

Твердження 4. Аксиоми A1)-A5') однозначно визначають міру близькості на слабо транзитивних нечітких турнірах.

Твердження 5. Міра близькості між довільними нечіткими відношеннями, слабо транзитивними нечіткими відношеннями, нечіткими турнірами та слабо транзитивними нечіткими турнірами визначається формулою

$$\delta(P_1, P_2) = \text{Card}((P_1 \setminus P_2) \cup (P_2 \setminus P_1)). \quad (3)$$

Доведення. Взявши до уваги визначення операцій різниці та об'єднання нечітких множин [5], отримуємо:

$$\begin{aligned} \delta_n(P_1, P_2) &= \max\{\max\{\mu_{ij}^{(1)} - \mu_{ij}^{(2)}, 0\}, \max\{\mu_{ij}^{(2)} - \mu_{ij}^{(1)}, 0\}\} = \\ &= \max\{\mu_{ij}^{(1)} - \mu_{ij}^{(2)}, \mu_{ij}^{(2)} - \mu_{ij}^{(1)}, 0\} = |\mu_{ij}^{(1)} - \mu_{ij}^{(2)}|, \end{aligned}$$

звідки, в силу визначення кардинального числа нечіткої множини [5], (3) перепишеться

$$\begin{aligned} \delta(P_1, P_2) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mu_{ij}^{(1) \vee (2) \vee (3)}(a_i, a_j) = \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |\mu_{ij}^{(1)} - \mu_{ij}^{(2)}|. \end{aligned} \quad (4)$$

Формула (4) називається відстанню Хемінга між нечіткими множинами [5]. Тепер неважко переконатися, що (4) задовольняє аксиоми A1) – A5) та аксиоми A1) – A5'). □

Колективний вибір через нечіткі індивідуальні переваги. Для заданого профілю нечітких індивідуальних переваг Π колективну перевагу R_c на чіткій множині альтернатив A будемо шукати у вигляді чіткого лінійного порядку із наступної умови:

$$R_c \in O_{\text{Кемпні}}(\Pi) = \text{Arg} \min_{R \in \Omega} \sum_{i \in N_c} \alpha_i \delta(R, P_i), \quad (5)$$

де Ω – множина всіх матриць, що відповідають лінійним порядкам.

Через $W_{\text{Кемпні}}$ позначимо множину максимальних альтернатив за відношеннями, які отримуються за правилом (5).

Аспекти раціонального групового вибору в чітких та нечітких умовах

Твердження 6. Задача (5) еквівалентна задачі лінійного впорядкування альтернатив (ЗЛВА) з елементами матриці цін:

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^m \alpha_l (\mu_{ij}^{(l)} - \mu_{ji}^{(l)})$$

Доведення. Оскільки шукана матриця відповідає деякому строгому ранжуванню, то в ній існує єдиний рядок з індексом p_1 , який містить $n-1$ одиницю; існує єдиний рядок з індексом p_2 , котрий містить $n-2$ одиниць і т.д. Іншими словами матриця лінійного порядку однозначно визначає перестановку множини

індексів альтернатив. Враховуючи цей факт та властивість асиметричності матриці строгого

лінійного порядку зробимо перетворення цільової функції задачі (5).

$$\begin{aligned} \sum_{i \in N_K} \alpha_i \delta(R, P_i) &= \sum_{i \in N_K} \alpha_i \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n |r_{ij} - \mu_{ij}^{(l)}| = \\ &= \sum_{i \in N_K} \alpha_i \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{l=1}^n (|1 - \mu_{ij}^{(l)}| + |0 - \mu_{ij}^{(l)}|) = \\ &= \frac{n(n-1)}{2} - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \left[\sum_{l=1}^n \alpha_i (\mu_{ij}^{(l)} - \mu_{ji}^{(l)}) \right]. \quad (6) \end{aligned}$$

Справедливість твердження випливає із еквівалентних перетворень (6). $\square$

Нечіткий аналог правила Кондорсе запропоновано в [7]. Традиційно більшість визначається як деяка порогова кількість індивідумів, тоді виправдане наступне визначення множини сильних переможців Кондорсе:

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\text{Condorcet}}^{(1)} &= \{a_i \in A : \neg \exists a_j \in A \setminus \{a_i\} \Rightarrow (a_i, a_j) \in R_{C1}\}, \\ (a_i, a_j) \in R_{C1} &\Leftrightarrow \text{Card}(\{l : \mu_{ij}^{(l)} \geq \alpha\}) > T, \quad \forall a_i, a_j \in A. \end{aligned}$$

Легко бачити, що відношення R_{C1} , в загальному випадку, не є зв'язним.

Будемо вимагати від переможця за Кондорсе виконання більш сильної умови.

$$W_{\text{Condorcet}}^{(1)} = \{a_i \in A : \forall a_j \in A \setminus \{a_i\} \Rightarrow (a_i, a_j) \in R_{C1}\},$$

Теорема 1. Нехай профіль Π утворюють нечіткі турніри. Якщо $T \geq \frac{m}{2\alpha}$ та $W_{\text{Condorcet}}^{(1)} \neq \emptyset$, тоді для цього профілю $W_{\text{Condorcet}}^{(1)} = W_{\text{Kemeny}}$.

Доведення. Нехай $a_i \in W_{\text{Condorcet}}^{(1)}$, $\forall j \in N_A, j \neq i$ справедлива наступна оцінка:

$$\begin{aligned} e_{ij} &= \sum_{l=1}^m (\mu_{ij}^{(l)} - \mu_{ji}^{(l)}) = \sum_{l=1}^m (\mu_{ij}^{(l)} - (1 - \mu_{ij}^{(l)})) = \\ &= 2 \cdot \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} - m = 2 \cdot \sum_{l: \mu_{ij}^{(l)} \geq \alpha} \mu_{ij}^{(l)} + \\ &+ 2 \cdot \sum_{l: \mu_{ij}^{(l)} < \alpha} \mu_{ij}^{(l)} - m \geq 2 \cdot \sum_{l: \mu_{ij}^{(l)} \geq \alpha} \alpha - m > \\ &> 2\alpha T - m. \quad (7) \end{aligned}$$

Із умови, що накладається на значення порогової величини $T \geq \frac{m}{2\alpha}$, визначення множини $W_{\text{Condorcet}}^{(1)}$ та оцінки (7) впливає виконання нерівності $e_{ij} > 0$, $\forall j \neq i$. Із достатніх

умов необхідності декомпозиції [6], можна стверджувати, що $a_i \in W_{\text{Kemeny}}$. Із властивості від'ємної симетричності матриці цін випливає, що a_i єдина альтернатива у множині $W_{\text{Condorcet}}^{(1)}$. $\square$

Можлива й інша інтерпретація принципу Кондорсе. Нечітка більшість є узагальненням концепції більшості і вперше запропонована у груповому прийнятті рішень у роботах [8,9]. Основна ідея такого підходу полягає у приведенні нечіткої більшості через нечіткий лінгвістичний квантифікатор, прикладами якого, як відмічалось у першому розділі, можуть слугувати висловлювання типу «більшість», «майже всі», тощо.

Розглянемо висловлювання: «більшість об'єктів володіє чіткою властивістю», що формально можна записати:

$$Q \text{ } P(x), \quad (8)$$

де Q позначає нечіткий лінгвістичний квантифікатор (у даному випадку «більшість»), $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ множина об'єктів, $P(\cdot)$ позначає властивість. Якщо властивість P є нечіткою, то її інтерпретація неформально (природно) може бути визначена через нечітку множину з функцією належності:

$$\text{вірогідність}(P(x_i)) = \mu_P(x_i).$$

Заде [10] запропонував підхід, який отримав назву обчислення лінгвістично квантованих висловлювань. Лінгвістичний квантифікатор представляє нечітку множину $Q \in F([0,1])$, де $F(A)$ – сімейство всіх нечітких множин, визначених на множині A . На практиці, як правило, використовують лінійно-ламані функції і в цьому випадку нечітка множина, що відповідає нечіткому квантифікатору Q : «більшість», може бути визначеною, наприклад, наступною функцією належності:

$$\mu_Q(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0.3; \\ 2x - 0.6, & 0.3 < x < 0.8; \\ 1, & 0.8 \leq x \leq 1. \end{cases}$$

Істинність (8) в такому випадку визначається як:

$$\text{вірогідність}(P(x_i)) = \mu_Q\left(\frac{1}{n} \sum_{r=1}^n \mu_P(x_r)\right).$$

При такому підході виправдана наступна інтерпретація принципу Кондорсе:

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{\text{Condorcet}}^{(2)} &= \{a_i \in A : \neg \exists a_j \in A \setminus \{a_i\} \Rightarrow (a_i, a_j) \in R_{1/2}\}, \\ (a_i, a_j) \in R_{1/2} &\Leftrightarrow \mu_{ij}^{(1)} > \alpha, \quad \forall a_i, a_j \in A. \end{aligned}$$

В загальному випадку відношення $R_{1/2}$ не є зв'язним.

Твердження 7. Нехай профіль P утворюють нечіткі турніри, а Q неспадний лінгвістичний квантифікатор з параметрами (a, b) . Якщо $\alpha > \frac{0.5-a}{b-a}$ та $a+b \leq 1$, тоді відношення $R_{1/2}$ є зв'язним.

Доведення. Виберемо довільні альтернативи $a_i, a_j \in A$. Припустимо, що $\mu_{ij}^{(1)} = 0$. У цьому випадку справедливий ланцюжок наступних імплікацій:

$$\begin{aligned} \mu_{ij}^{(1)} = 0 &\Leftrightarrow \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} < a \Leftrightarrow \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m (1 - \mu_{ji}^{(l)}) < a \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow 1 - a < \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ji}^{(l)} \Leftrightarrow b < \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ji}^{(l)} \Leftrightarrow \mu_{ji}^{(1)} = 1. \quad (9) \end{aligned}$$

Той факт, що $\alpha \in (0, 1]$ та (9) гарантують, що $(a_i, a_j) \in R_{1/2}$ або $(a_j, a_i) \in R_{1/2}$.

Нехай тепер $0 < \mu_{ij}^{(1)} < 1$. Припустимо, що $\mu_{ij}^{(1)} \leq \alpha$ та $\mu_{ji}^{(1)} \leq \alpha$. Тоді справедливий ланцюжок імплікацій:

$$\begin{aligned} \mu_{ij}^{(1)} + \mu_{ji}^{(1)} &\leq 2\alpha \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \frac{\frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} - a + \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ji}^{(l)} - a}{b-a} \leq 2\alpha \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \frac{1-2a}{b-a} \leq 2\alpha \Leftrightarrow \alpha \leq \frac{0.5-a}{b-a}. \quad (10) \end{aligned}$$

Але (10) суперечить припущенню твердження. Тобто і у цьому разі маємо $(a_i, a_j) \in R_{1/2}$ або $(a_j, a_i) \in R_{1/2}$. $\square$

Аналогічно, як і у попередньому випадку, будемо вимагати від переможця за Кондорсе виконання більш сильної умови:

$$\widetilde{W}_{\text{Condorcet}}^{(2)} = \{a_i \in A : \forall a_j \in A \setminus \{a_i\} \Rightarrow (a_i, a_j) \in R_{1/2}\}.$$

Теорема 2. Нехай профіль P утворюють нечіткі турніри, Q неспадний лінгвістичний квантифікатор з параметрами (a, b) . Якщо

$\alpha \geq \frac{0.5-a}{b-a}$ та $W_{\text{Condorcet}}^{(2)} \neq \emptyset$, тоді для цього профілю $W_{\text{Condorcet}}^{(2)} = W_{\text{Kemeny}}$.

Доведення. Нехай $a_i \in W_{\text{Condorcet}}^{(2)}$. Виберемо довільну альтернативу з індексом $j \neq i$. Легко бачити, що рівність $\mu_{ij}^{(1)} = 0$ є неможливою.

а) Припустимо, що $\frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} \geq b$. У цьому випадку справедливий ланцюжок наступних імплікацій:

$$\begin{aligned} e_{ij} &= 2 \cdot \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} - m = 2m \left(\frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} - 0.5 \right) \geq \\ &\geq 2m(b - 0.5) \geq 0. \end{aligned}$$

б) Нехай тепер $a < \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} < b$. У цьому випадку справедливий ланцюжок наступних імплікацій:

$$\begin{aligned} \mu_{ij} \left(\frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} \right) &> \alpha \Rightarrow \frac{\frac{1}{m} \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} - a}{b-a} > \alpha \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_{l=1}^m \mu_{ij}^{(l)} > m(\alpha(b-a) + a). \quad (11) \end{aligned}$$

Враховуючи (11) та еквівалентні перетворення у (7) $\forall j \neq i$ справедлива наступна оцінка:

$$e_i = 2 \cdot \sum_{j=1}^m \mu_{ij}^{(1)} - m > 2m(\alpha(b-a) + a) - m. \quad (12)$$

Умови твердження забезпечують невід'ємність правої частини (12). Отже, в обох випадках а) і б) маємо $e_{ij} > 0$. Із достатніх умов необхідності декомпозиції можна стверджувати, що $a_i \in W_{\text{Kemeny}}$. Із властивості від'ємної симетричності матриці цін ЗЛВА випливає, що a_i єдина альтернатива у множині $W_{\text{Condorcet}}^{(2)}$. $\square$

Наслідок 1. Нехай профіль P утворюють нечіткі турніри, а Q : «хоча б половина». Якщо $\alpha > \frac{0.5-a}{b-a}$ та $W_{\text{Condorcet}}^{(2)} \neq \emptyset$, тоді для цього профілю $W_{\text{Condorcet}}^{(2)} = W_{\text{Kemeny}}$.

У випадку нечіткого відношення переваги класичним вважається підхід Орловського [11], суть якого полягає у звуженні класу раціональних виборів за егалітарним принципом до множини недомінованих альтернатив. При

наявності декількох відношень переваги на множині альтернатив та інформації про значимість переваг у вигляді чітких вагових коефіцієнтів метод зводиться до виконання наступних кроків [11, с. 149].

1) Будується нечітке відношення Q_1 (перетин вихідних) та Q_2 (адитивна згортка чи утилітарний критерій) відповідно з функціями належності:

$$\mu_{ij}^{(Q_1)} = \min_{l \in N_A} \alpha_l \mu_{ij}^{(l)},$$

$$\mu_{ij}^{(Q_2)} = \sum_{l=1}^m \alpha_l \mu_{ij}^{(l)}.$$

2) Визначаються нечіткі підмножини невідомінованих альтернатив в множинах $(A, \mu^{(Q_1)})$ та $(A, \mu^{(Q_2)})$ відповідно:

$$\mu_{Q_1}^{NI}(a_i) = 1 - \sup_{j \in N} \{ \mu_{ij}^{(Q_1)} - \mu_{ij}^{(Q_1)} \}, \quad i \in N_A,$$

$$\mu_{Q_2}^{NI}(a_i) = 1 - \sup_{j \in N} \{ \mu_{ij}^{(Q_2)} - \mu_{ij}^{(Q_2)} \}, \quad i \in N_A.$$

3) Знаходиться перетин множин $\mu_{Q_1}^{NI}$ та $\mu_{Q_2}^{NI}$:

$$\mu^{NI}(a_i) = \min \{ \mu_{Q_1}^{NI}(a_i), \mu_{Q_2}^{NI}(a_i) \}, \quad i \in N_A.$$

4) Раціональним вважається вибір альтернатив із множини

$$S_{NI} = \left\{ a_i \in A : \mu^{NI}(a_i) = \sup_{j \in N_A} \mu^{NI}(a_j) \right\}.$$

Особливу цікавість складає множина чітко невідомінованих альтернатив:

$$S_{(NI)} = \{ a_i \in A : \mu^{NI}(a_i) = 1 \}.$$

Оскільки цю множину можна розглядати в деякому сенсі як чіткий розв'язок нечітко поставленої задачі.

Теорема 3. Якщо $S_{(NI)} \neq \emptyset$, то $S_{(NI)} = W_{\text{Кемени}}$.

Доведення. Нехай $a_i \in S_{(NI)}$. Справедливий наступний ланцюжок імплікацій:

$$\begin{aligned} a_i \in S_{(NI)} &\Leftrightarrow \mu^{NI}(a_i) = 1 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \min \{ \mu_{Q_1}^{NI}(a_i), \mu_{Q_2}^{NI}(a_i) \} = 1 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \mu_{Q_2}^{NI}(a_i) = 1 \Leftrightarrow 1 - \sup_{j \in N_A} \{ \mu_{ij}^{(Q_2)} - \mu_{ij}^{(Q_2)} \} = 1 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \mu_{ij}^{(Q_2)} - \mu_{ij}^{(Q_2)} \leq 0, \forall j \in N_A \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow e_{ij} \geq 0, \forall j \in N_A, \end{aligned} \quad (13)$$

Із (13) випливає, що для всіх чітко невідомінованих альтернатив (у випадку непорожності множини $S_{(NI)}$) і тільки для них виконується умова $e_{ij} \geq 0, \forall j \in N_A$. (1)

Список використаних джерел

1. Тоценко В.Г. Методы определения групповых многокритериальных ординальных оценок с учетом компетентности экспертов // Пробл. упр. и информатики. – 2005. – С. 84–89.
2. Kacprzyk J., Nurmi H. Fuzzy sets in decision analysis, operations research and statistics/ Ed. by Roman Slowinski. – Boston: Kluwer, 1998. – P. 103–136.
3. Литвак Б.Г. Экспертная информация: Методы получения и анализа. – М.: Радио и связь, 1982. – 184 с.
4. Kemeny J. Mathematics without numbers. – 1959. – P. 571–591.
5. Рыжов А.П. Элементы теории нечетких множеств и измерения нечеткости. – М.: Диалог-МГУ, 1998. – 116 с.
6. Антосяк П. П. Декомпозиційні процедури у задачі знаходження строгого результуючого ранжування у вигляді медіани Кемени-Снелла // Науковий вісник Ужгородського університету. – 2008. – Вип. 17. – С. 27–35.
7. Nurmi H. Approaches to collective decision making with fuzzy preference relations// Fuzzy Sets and Systems. – 1981. – no. 6. – P. 249–259.
8. Kacprzyk J. Group decision making with a fuzzy majority via linguistic quantifiers, part i: A consensory-like pooling// Cybernetics and Systems An International Journal. – 1985. – Vol. 16. – P. 119–129.
9. Kacprzyk J. Group decision making with a fuzzy majority via linguistic quantifiers, part ii: A competitive-like pooling// Cybernetics and Systems An International Journal. – 1985. – Vol. 16. – P. 131–144.
10. Zadeh L.A. A computational approach to fuzzy quantifiers in natural languages// Computers and Mathematics with Applications. – 1983. – Vol. 9. – P. 149–184.
11. Орловский С.А. Проблемы принятия решений при нечеткой исходной информации. – М.: Наука, 1981. – 208 с.

Надійшла до редколегії 01.03.2010

УДК 510.649

Афонін А.О., старший викладач

Про спрямовану парамодуляцію в методі елімінації моделей

Стаття присвячена дослідженням з вбудовування парамодуляційних правил у метод елімінації моделей та вхідну резолюцію. Даються результати про коректність та повноту побудованих розширень.

Ключові слова: резолюція, парамодуляція, метод елімінації моделей.

E-mail: andrew.afonin@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Вступ

Метод елімінації моделей Лавленда [1,4,5] займає особливе місце в автоматичному пошуку суперечності на базі резолюційної техніки [7]. Це викликано, по-перше, повною відсутністю в ньому техніки поглинання і, по-друге, можливістю відказа від звичайного правила факторизації. У даному дослідженні показується, як можна вбудувати в метод елімінації моделей парамодуляційні правила, що враховують "напрямок" їх дій, так, щоб при цьому були збережені ці привабливі для програмної реалізації властивості. Отримані результати дають змогу також побудувати парамодуляційні розширення вхідної резолюції. Відмітимо, що виклад даного матеріалу припускає знайомство з роботою [3], у зв'язку з чим він носить переважно ескізний характер.

Метод елімінації моделей

Розглядається класична логіка першого порядку з рівністю в її резолюційному трактуванні. При цьому вважаються відомими поняття терму, атомарної формули і формули.

Метод елімінації моделей має справу з впорядкованими диз'юнктами [2], які можуть містити так звані "обрамлені" літери.

Атомарна формула або її заперечення називається літерою.

Доповненням літери L називається результат приписування до L знака заперечення, якщо L є атомарна формула, і результат зняття з L знака заперечення, якщо ні. Якщо L - літера, то $\neg L$

A.O. Afonin, senior lecturer

On directed paramodulation in model elimination method

The paper is devoted to the research on the building-in of paramodulation rules into the model elimination method and input resolution. The results about the soundness and completeness of the constructed extensions are given.

Key Words: resolution, paramodulation, model elimination method.

позначає її доповнення. Рівність позначається символом " $=$ ".

Формула вигляду $L_1 \vee \dots \vee L_n$ називається диз'юнктом ($L_1, \dots, L_n$ - літери), який отожднюється з впорядкованою мультимножиною [2,8]. Деякі з літер диз'юнкта можуть бути обрамленими. Обрамлена літера L позначається $\underline{L}$; Λ позначає пусту формулу.

Відмітимо, що представлення диз'юнкту у вигляді формули дозволяє розрізняти різні входження однієї і тієї ж літери в один і той же диз'юнкт. Також слід відзначити, що важливим є той факт, що диз'юнкт являє собою "лінійний" вираз при читанні його як формули зліва направо, який задає лінійний порядок на входженнях літер в диз'юнкт.

Диз'юнкт, який є результатом перейменування в ньому деяких змінних називається варіантом.

Підстановка, уніфікатор і найбільш загальний уніфікатор (н.з.у.) згадуються в змісті роботи [7]. Якщо σ є підстановка і Ex є вираз, то результат застосування σ до Ex позначається $Ex \cdot \sigma$.

IS позначає далі множину так званих вхідних диз'юнктів.

Метод елімінації моделей має наступні правила виведення.

Правило модельної резолюції MR. Нехай диз'юнкти C_1 і C_2 , які не мають загальних змінних, мають вигляд $D_1 \vee L$ і $D_2 \vee E \vee D'_2$, де L і E - літери, D_1 , D_2 і D'_2 - диз'юнкти (можливо, порожні), причому D_2 належить IS . Нехай існує н.з.у. σ множини $\{L, \neg E\}$. Тоді говориться, що із C_1 і C_2 за правилом модельної резолюції MR може бути виведений диз'юнкт $(D_1 \vee \underline{L} \vee D_2 \vee D'_2) \cdot \sigma$.

Правило внутрішньої резолюції IR. Нехай диз'юнкт C має вигляд $D_1 \vee \underline{L} \vee D_2 \vee E$, де $\underline{L}$ і E - літери, причому $\underline{L}$ - сама крайня справа обрамлена літера і D_1 і D_2 - диз'юнкти (можливо, порожні). Нехай існує н.з.у. σ множини $\{L, \sim E\}$. Тоді говориться, що із C за правилом унарної резолюції вправо IR може бути виведений диз'юнкт $(D_1 \vee \underline{L} \vee D_2) \cdot \sigma$.

Правило скорочення вліво LD. Нехай диз'юнкт C має вигляд $D_1 \vee E \vee D_2 \vee \underline{L}$, де D_1 і D_2 - диз'юнкти і $\underline{L}$ - обрамлена літера, а E - перша справа необрамлена літера. Тоді говориться, що із C за правилом скорочення LD може бути виведений диз'юнкт $D_1 \vee E$.

В цієї системи понять метод елімінації моделей має наступне формулювання.

Послідовність диз'юнктів $C_1, \dots, C_n$ являється виведенням диз'юнкту C_n , який задовольняє методу елімінації моделей відносно диз'юнкту D із множини вхідних диз'юнктів IS , тоді і тільки тоді, коли C_1 є варіантом D , а кожен C_i із $C_2, \dots, C_n$ є висновком одного із правил MR, IR і LD, однією із посилок якого є варіант диз'юнкту C_i . Також припускаємо, що LD застосовується всякий раз, коли це можна зробити. (Звертаємо увагу на те, що в даному трактуванні методу елімінації моделей правило факторизації відсутнє.)

Теорема 1. Нехай D є диз'юнктом з множини вхідних диз'юнктів IS , таким, що множина $IS \setminus \{D\}$ є несуперечливою. IS являється суперечливою множиною тоді і тільки тоді, коли існує виведення пустої формули A відносно D , що задовольняє методу елімінації моделей.

Доведення (схема). Виходячи з властивостей н.з.у., очевидно, що досить розглянути випадок, коли диз'юнкти не містять змінних. Тому, для доведення коректності достатньо перевірити коректність правил в випадку доведення повноти.

Якщо ми розглянемо числення IT літеральних дерев із [3], то відповідно до властивостей цього числення, IS являється несумісною множиною тоді і тільки тоді, коли в численні IT існує виведення виродженого дерева Δ відносно D . Можна показати, що це виведення можна побудувати відповідно порядку "спочатку справа наліво і потім зверху вниз". Кожен крок цей побудови, при її "лінійній" проекції, буде відповідати одному з правил виведення MR, IR і LD. Маємо повноту метода. Q.E.D.

Приклад 1. Нехай $IS = \{L \vee L, \neg L \vee \neg L\}$. Наступний ланцюжок є виведенням в методі елімінації моделей:

- | | |
|---------------------------------------|---------------------------|
| 1. $L \vee L$ | ($\in IS$) |
| 2. $\neg L \vee \neg L$ | ($\in IS$) |
| 3. $L \vee \underline{L} \vee \neg L$ | (із (1) і (2), згідно MR) |
| 4. $L \vee \underline{L}$ | (із (3), згідно IR) |
| 5. L | (із (4), згідно LD) |
| 6. $\underline{L} \vee \neg L$ | (із (5) і (2), згідно MR) |
| 7. $\underline{L}$ | (із (6), згідно IR) |
| 8. A | (із (7), згідно LD) |

Значить, IS є суперечлива множина диз'юнктів. Цей приклад також демонструє, що IR є необхідним правилом, і що у випадку відмови від правила факторизації неможливо уникнути використання тавтологій (тобто диз'юнктів, що містять як деяку літеру, так і її заперечення).

Відомо, що вхідна резолюція є неповним методом у загальному випадку й повним для множин хорнових диз'юнктів. Цей факт впливає з наведеного прикладу й твердження нижче, якщо під вхідною резолюцією розуміти MEM, у якому є присутнім тільки правило MR. Більше того, якщо розуміти лінійне спростування звичайним образом [2], то для одержання повних вхідних резолюційних методів у випадку хорнових диз'юнктів можна обмежитися лінійною вхідною резолюцією.

Наслідок 1. Множина вхідних хорнових диз'юнктів IS являється суперечливою множиною тоді й тільки тоді, коли існує таке виведення пустої формули A відносно деякого диз'юнкта з IS , яке задовольняє лінійної вхідної резолюції з правилом MR.

Доведення. IS обов'язково містить хоча б один такий диз'юнкт вигляду $\neg E_1 \vee \dots \vee \neg E_m$, де $E_1, \dots, E_m$ - атомарні формули, що $IS \setminus \{\neg E_1 \vee \dots \vee \neg E_m\}$ є несуперечливою множиною. Відповідно до теореми 1 існує виведення пустої формули A відносно $\neg E_1 \vee \dots \vee \neg E_m$. Очевидно, що в цьому виведенні беруть участь тільки застосування правила MR. Отже, він є лінійним виведенням, що задовольняє умовам вхідної резолюції. Q.E.D.

Приклад 2. Якщо ми розглянемо суперечливу множину хорнових диз'юнктів $IS = \{L, \neg L \vee E, \neg E \vee \neg E\}$, де L і E - атомарні формули, то можна побудувати наступне виведення, що задовольняє лінійної вхідної резолюції:

- | | |
|-------------------------|---------------------------|
| 1. L | ($\in IS$) |
| 2. $\neg L \vee E$ | ($\in IS$) |
| 3. $\neg E \vee \neg E$ | ($\in IS$) |
| 4. $\neg L \vee \neg E$ | (із (3) і (2), згідно MR) |
| 5. $\neg L \vee \neg L$ | (із (4) і (2), згідно MR) |
| 6. $\neg L$ | (із (5) і (1), згідно MR) |
| 7. A | (із (6) і (1), згідно IR) |

Метод елімінації моделей з спрямованою парамодуляцією

Як і в [9], множина диз'юнктивів S називається E -несуперечливою тоді і тільки тоді, коли є n несуперечливою множина $S \cup Eq$, де Eq - мінімальна множина, що задовольняє наступним властивостям: для всяких термів t, t' і t'' , побудованих з констант і функціональних символів, що входять в диз'юнкти із S (якщо диз'юнкти із S не містять жодної константи, то спеціальна константа c_0 бере участь в побудові t, t' і t''), має місце: $t=t \in Eq$; якщо $t=t' \in Eq$, то $t'=t \in Eq$; якщо $t=t' \in Eq$ і $t'=t'' \in Eq$, то $t=t' t'=t'' \in Eq$.

Також нагадаємо, що вираз виду $f(x_1, \dots, x_k) = f(x_1, \dots, x_k)$, де f - k -арний функціональний символ і $x_1, \dots, x_k$ - змінні, називається аксіомою функціональної рефлексивності.

Для множини S , $AFR(S)$ позначає множину всіх аксіом функціональної рефлексивності для функціональних символів із S .

Метод елімінації моделей у формі, яка надана вище, допускає наступні спрямовані парамодуляційні правила, що базуються на звичайній парамодуляції [2,9].

Правило модельної парамодуляції MP_L (в вхідній диз'юнкт). Нехай диз'юнкти C_1 і C_2 , які не мають загальних змінних і мають вигляд $D_1 \vee L$ і $D_2 \vee E \vee D'_2$, де L і E - літери, D_1, D_2 і D'_2 - диз'юнкти (можливо, порожні), причому D_2 обов'язково належить IS та існує парамодуляція із L в E з парамодулянтном E' [2], і при цьому породжується н.з.у. σ . Тоді говориться, що із C_1 і C_2 за правилом модельної парамодуляції MP_L може бути виведений диз'юнкт $(D_1 \vee \underline{L} \vee D_2) \cdot \sigma \vee E' \vee D'_2 \cdot \sigma$.

Правило модельної парамодуляції MP_o (із вхідного диз'юнкта). Нехай диз'юнкти C_1 і C_2 , які не мають загальних змінних і мають вигляд $D_1 \vee L$ і $D_2 \vee E \vee D'_2$, де L і E - літери, D_1, D_2 і D'_2 - диз'юнкти (можливо, порожні), причому D_2 обов'язково належить IS та існує парамодуляція із E в L з парамодулянтном L' , і при цьому породжується н.з.у. σ . Тоді говориться, що із C_1 і C_2 за правилом модельної парамодуляції MP_o може бути виведений диз'юнкт $D_1 \cdot \sigma \vee \underline{L'} \vee (D_2 \vee \vee D'_2) \cdot \sigma$.

Правило модельної парамодуляції вліво MP_l . Нехай диз'юнкт C має вигляд $D_1 \vee \underline{L} \vee D_2 \vee E$, де $\underline{L}$ і E - літери, причому $\underline{L}$ - обрамлена літера, і D_1 і D_2 - диз'юнкти (можливо, порожні), та існує парамодуляція із E в L з парамодулянтном L' і при цьому породжується н.з.у. σ . Тоді говориться, що

із C за правилом модельної парамодуляції вліво MP_l може бути виведений диз'юнкт $(D_1 \vee \underline{L} \vee D_2 \vee E) \cdot \sigma \vee L'$.

Правило модельної парамодуляції вправо MP_r . Нехай диз'юнкт C має вигляд $D_1 \vee \underline{L} \vee D_2 \vee E$, де $\underline{L}$ і E - літери, причому $\underline{L}$ - обрамлена літера, і D_1 і D_2 - диз'юнкти (можливо, порожні), та існує парамодуляція із E в L з парамодулянтном E' і при цьому породжується н.з.у. σ . Тоді говориться, що із C за правилом модельної парамодуляції вправо MP_r може бути виведений диз'юнкт $(D_1 \vee \underline{L} \vee D_2 \vee E) \cdot \sigma \vee E'$.

Приведені правила, дозволяють задати два парамодуляційних розширення метода елімінації моделей. Має місце наступний результат.

Теорема 2. Нехай IS є множина вхідних диз'юнктивів, і C є такий диз'юнкт з IS , що множина $IS \setminus \{C\}$ є E -несуперечливою. Множина IS є E -суперечливою тоді і тільки тоді, коли існує виведення пустої формули $\perp$ з множини $IS \cup AFR(IS) \cup \{x=x\}$, і це виведення задовольняє парамодуляційному розширенню метода елімінації моделей, яке містить правила MP_L, MP_o і MP_r (MP_L, MP_o і MP_r).

Доведення (схема). Як і при доведенні теореми 1, досить розглянути випадок, коли диз'юнкти не містять змінних. Далі, для доведення повноти, можна скористатися численнями IT_d, IT_u із [3] для побудови таких "проекцій" дерев виведення в IT_d і IT_u , які можуть бути розглянуті як необхідні виведення в парамодуляційних розширеннях з правилами MP_L, MP_o і MP_r та MP_L, MP_o і MP_l . Для доведення коректності достатньо перевірити коректність правил виведення. Q.E.D.

Приклад 3. Наступний ланцюжок є виведенням в методі елімінації моделей з парамодуляцією (IS містить диз'юнкти 1 - 6.):

1. $a=b$ ($\in IS$)
2. $R_1(h_1(z, z))$ ($\in IS$)
3. $R_2(h_2(u, u))$ ($\in IS$)
4. $g_1(f(a), f(b))=h_1(f(a), f(b))$ ($\in IS$)
5. $g_2(f(a), f(b))=h_2(f(a), f(b))$ ($\in IS$)
6. $\neg R_1(g_1(x, x)) \vee \neg R_2(g_2(y, y))$ ($\in IS$)
7. $f(v) = f(v)$ ($\in AFR(IS)$)
(a і b - константи; x, y, z і u - змінні, R_1 і R_2 - предикатні символи; f, g_1, g_2, h_1 і h_2 - функціональні символи)
8. $\neg R_1(g_1(x, x)) \vee \neg R_2(g_2(f(v), f(v))) \vee \neg R_2(g_2(f(v), f(v)))$ (із (7) і (6), згідно MP_o)
9. $\neg R_1(g_1(x, x)) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(a))) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(a))) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(b)))$ (із (1) і (8), згідно MP_o)

10. $\neg R_1(g_1(x, x)) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(a))) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(b))) \vee \neg R_2(h_2(f(a), f(b)))$ (із (5) і (9), згідно MP_o)
11. $\neg R_1(g_1(x, x)) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(a))) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(b))) \vee \neg R_2(h_2(f(a), f(b))) \vee \neg R_2(h_2(f(a), f(a)))$ (із (1) і (10), згідно MP_o)
12. $\neg R_1(g_1(x, x)) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(a))) \vee \neg R_2(g_2(f(a), f(b))) \vee \neg R_2(h_2(f(a), f(b))) \vee \neg R_2(h_2(f(a), f(a)))$ (із (3) і (11), згідно MR)
13. $\neg R_1(g_1(x, x))$ (із (12), згідно LD)
14. $\neg R_1(g_1(f(v), f(v))) \vee \neg R_1(g_1(f(v), f(b)))$ (із (7) і (13), згідно MP_o)
15. $\neg R_1(g_1(f(a), f(a))) \vee \neg R_1(g_1(f(a), f(b)))$ (із (1) і (14), згідно MP_o)
16. $\neg R_1(g_1(f(a), f(a))) \vee \neg R_1(g_1(f(a), f(b))) \vee \neg R_1(h_1(f(a), f(b)))$ (із (4) і (15), згідно MP_o)
17. $\neg R_1(g_1(f(a), f(a))) \vee \neg R_1(g_1(f(a), f(b))) \vee \neg R_1(h_1(f(a), f(b))) \vee \neg R_1(h_1(f(a), f(a)))$ (із (1) і (16), згідно MP_o)
18. $\neg R_1(g_1(f(a), f(a))) \vee \neg R_1(g_1(f(a), f(b))) \vee \neg R_1(h_1(f(a), f(b))) \vee \neg R_1(h_1(f(a), f(a)))$ (із (2) і (17), згідно MR)
19. A (із (18), згідно LD)

Значить, IS є E -суперечлива множина.

Цей приклад також демонструє необхідність використання в методі аксіом функціональної рефлексивності.

Якщо розглянути випадок хорнових диз'юнктивів з літерами рівності, наслідок 1 може бути трансформованим в наступне твердження, доведення якого повторює, у деякому сенсі, доказ наслідку 1.

Наслідок 2. Множина вхідних хорнових диз'юнктивів IS являється E -суперечливою множиною тоді і тільки тоді, коли існує виведення пустої формули A з множини $IS \cup AFR(IS) \cup \{x=x\}$ відносно некоторого диз'юнкта з IS , що задовольняє лінійної вхідної резолюції з парамодуляційними правилами MP_n , MP_o і MP_r (MP_n , MP_o і MP_r).

Приклад вище може служити ілюстрацією до наслідку 2, тому що всі диз'юнкти з IS являються хорновими, а наведене виведення є лінійним і вхідним.

Висновок

Проведене дослідження демонструє, що метод елімінації моделей (MEM) допускає такі парамодуляційні розширення, які зберігають всі його позитивні риси. Це робить метод привабливим для його реалізації в різних інтелектуальних системах з дедуктивними

можливостями. Іншим достоїнством MEM є те, що перехід від MEM до вхідної резолюції здійснюється просто видаленням з MEM двох правил висновку. Сама ж вхідна резолюція в різних її модифікаціях є одним з методів, широко використовуваним в системах логічного програмування.

Список використаних джерел

1. Loveland D.W. Automated theorem proving: a logical basis / D.W. Loveland. - Netherlands: North-Holland, 1978. - 273 p.
2. Chang C. and Lee R. Symbolic logic and mechanical theorem proving / C. Chang C. and R. Lee. - Orlando, FL, USA: Academic Press, 1997. - 331 p.
3. Афонин А.А. О древовидной форме поиска опровержения в интеллектуальных системах с логическими возможностями / А.А. Афонин // Математичні машини і системи. - 2010. - № 2. - С. 87-95.
4. Loveland D.V. Mechanical theorem proving by model elimination / D.V. Loveland // Journal of the ACM. - 1968. - v.15, № 2. - P. 236-251.
5. Loveland D. W. A simplified format for the model elimination theorem-proving procedure / D.V. Loveland // Journal of the ACM. - 1969. - v.16, № 3. - P.349-363.
6. Stickel M.E. Automated deduction by Theory Resolution / M.E. Stickel // Journal of Automated Reasoning. - v.1, №4. - 1985. - P. 333-355.
7. Robinson J. A. A machine-oriented logic based on resolution principle / J. A Robinson // Journal of the ACM. - v.12. - 1965. - P. 23-41.
8. Bachmair L., Ganzinger H. Resolution theorem proving / L.Bachmair H.Ganzinger // Handbook of Automated Reasoning. - Elsevier Science Pub. - 2001. - P. 19 - 99.
9. Neuwenhuys R., Rubio A. Paramodulation-based theorem-proving / R.Neuwenhuys, A.Rubio // Handbook of Automated Reasoning. - Elsevier Science Pub. - 2001. - P.371 - 444.

Надійшла до редколегії 29.03.10

УДК [519.876.5:530.182]:553.98

Бомба А.Я.¹ д. т. н., проф.,
Ярошак С.В.² аспірант

Метод квазіконформних відображень моделювання нелінійних процесів витіснення у деформівних середовищах.

Розроблено алгоритм числового розв'язання обернених нелінійних модельних задач на квазіконформні відображення для моделі типу „нагнітальна та експлуатаційна свердловини” у горизонтальному схильному до суфозійних деформацій пласті, що автоматично вирішує проблему побудови рівномірної гідродинамічної сітки, знаходження положення лінії розділу різнокольорових рідин у різні моменти часу, частки витісняючої рідини (води) у загальній фільтраційній витраті (зокрема, час повного обводнення експлуатаційної свердловини).

Ключові слова: нелінійні крайові задачі, квазіконформні відображення, лінія розділу, суфозія, фільтрація, різнокольорові рідини, гідродинамічна сітка

Bomba A.Ya.¹, Dr. Sc., prof.,
Yaroschak S.V.² aspirant

The nonlinear processes modeling quasiconformal mappings method of displacement in deformable medias.

The algorithm of numerical solution of inverse nonlinear model problems on quasiconformal mappings to injection and production wells model in the horizontal prone to suffozion deformation reservoir which automatically solves the problem of a uniform hydrodynamic grid construction and the problem of finding of the colored liquids separation line in different time moments and displacing liquid (water) part in the total filtration (in particular, the time for complete operating irrigation wells) was built.

Keywords: nonlinear boundary value problems, quasiconformal mappings, separation line, suffusion, filtering, multi-colored liquid, hydrodynamic mesh

¹ E-mail: abomba@ukr.net ² E-mail: Yaroschak@mail.ru

Представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф. Г.

Вступ. Підвищення видобутку запасів сировини (наприклад, нафти) з продуктивних колекторів можливо забезпечити, частково, завдяки детальному вивченню геологічної будови і фільтраційної неоднорідності міжсвердловинного простору та математичному моделюванні процесу руху рідин (фільтрації), що відбувається в пласті. Це, як правило, дозволяє запобігти різкому росту обводнюваності продукції експлуатаційних свердловин при вході родовищ в пізню стадію розробки.

Причому важливим при проведенні математичного моделювання є врахування дючих градієнтів потенціалу, так як при перевищенні ними допустимого (критичного) значення для даного ґрунту в наколосвердловинній зоні відбувається втрата фільтраційної міцності ґрунтів за рахунок переміщення дрібних його частинок (суфозії), що зумовлює зміну коефіцієнта провідності (фільтрації). В роботах [1-3] проведено математичне моделювання нелінійних процесів фільтрації з урахуванням суфозійних явищ і розроблено методику розв'язання відповідних нелінійних задач з післядією руху води до дрени (свердловини), отримані співвідношення між

характеристиками недеформованого середовища та середовища, що деформується в залежності від гідродинамічної дії фільтраційного потоку та конструктивних параметрів дренажу.

У цій роботі нами поширено запропоновану методику [1-3] врахування суфозійних явищ на модель типу «нагнітальна та експлуатаційна свердловини» (НЕС) у горизонтальному пласті та здійснено прогнозування динаміки руху лінії розділу (фронту витіснення) різнокольорових рідин [4] з паралельним розрахунком основних фільтраційних параметрів та мажорант часу проходження частинками від нагнітальної до експлуатаційної свердловини вздовж тої чи іншої лінії течії (причому мажоранти будуються для початкового та «кінцевого» етапів деформації пласта, тобто, коли: а) середовище є однорідним, недеформівним; б) деформівним на стадії стабілізації суфозійно - фільтраційної взаємодії), зокрема, часу початку попадання води в експлуатаційну свердловину, та часу повного заводнення пласта, у припущенні, що: а) час стабілізації фільтраційно-суфозійної взаємодії є відносно малим у порівнянні з часом досягнення водою експлуатаційної свердловини; б) витісняюча та витісняєма рідини мають однакові

фізичні властивості (дана умова приймається лише для спрощення викладок).

Загальна постановка задачі. Розглянемо в деякій тризв'язній криволінійній області G_z ($z = x + iy$), обмеженій трьома гладкими замкненими контурами (рис. 1): $L_* = \{x + iy: x = x_*(t), y = y_*(t), \alpha_* < t < \beta_*,\}$, $L^* = \{x + iy: x = x^*(t), y = y^*(t), \alpha^* < t < \beta^*,\}$, $L_0 = \{x + iy: x = x_0(t), y = y_0(t), \alpha_0 < t < \beta_0,\}$ процес руху частинок (фільтрації в пористому пласті), який описується за допомогою рівняння руху $\dot{v} = k \cdot \text{grad} \varphi$ (закон Дарсі) та рівняння нерозривності $\text{div} \dot{v} = 0$, де $\dot{v} = (v_x(x, y), v_y(x, y))$ – швидкість фільтрації, а $\varphi = \varphi(x, y)$ – квазіпотенціал відповідного поля ($\varphi|_{L_*} = \varphi_*$, $\varphi|_{L^*} = \varphi^*$, $\frac{\partial \varphi}{\partial n}|_{L_0} = 0$, $-\infty < \varphi_* < \varphi^* < +\infty$, n – зовнішня нормаль до відповідної кривої), $k = k(x, y, \varphi_x, \varphi_y)$ – коефіцієнт провідності середовища.

Один із варіантів моделювання взаємовпливу коефіцієнта провідності k та градієнта I квазіпотенціала $\varphi = \varphi(x, y)$ ($\varphi_* < \varphi < \varphi^*$) при фільтрації від нагнітальної свердловини до експлуатаційної є виділення в присвердловинних зонах ділянок (рис. 1), в яких проводиться корекція значення коефіцієнта провідності в залежності від значень градієнтів квазіпотенціалу за наступною моделлю:

$$k = \begin{cases} k_* = k_0 + \varepsilon \beta (I_*^* - I_{kr}^B)(I_*^* - I_{kr}^3), I > I_{\varepsilon d}^*, I_\varphi < 0, \\ k_0 + \varepsilon \beta (I - I_{kr}^B)(I - I_{kr}^3), I_{kr}^3 \leq I \leq I_*^*, I_\varphi < 0, \\ k_0, I < I_{kr}^3, I_\varphi < 0 \text{ або } I < I_{kr}^0, I_\varphi > 0 \\ k_0 + \varepsilon \alpha (I - I_{kr}^0), I_{kr}^0 \leq I \leq I_*^*, I_\varphi > 0, \\ k^* = k_0 + \varepsilon \alpha (I^* - I_{kr}^0), I > I_*^*, I_\varphi > 0, \end{cases} \quad (1)$$

де $I = \sqrt{\varphi_x^2 + \varphi_y^2}$ – величина градієнту, а $I_{kr}^B, I_{kr}^0, I_{kr}^*, I_{kr}^3$ – критичні його значення, при переході через які відбувається вимив частинок (в околі відповідно нагнітальної та експлуатаційної свердловин), повний вимив (коли суфозійних частинок на даній ділянці уже немає), а також їх осідання (затримка) [3]. Параметри ε, α підбираються виходячи з фізичного експерименту, а β – із умови: $k_* = k^*$

$$(\beta = \alpha \frac{I_{kr}^* - I_{kr}^0}{(I_{kr}^* - I_{kr}^B)(I_{kr}^* - I_{kr}^3)}).$$

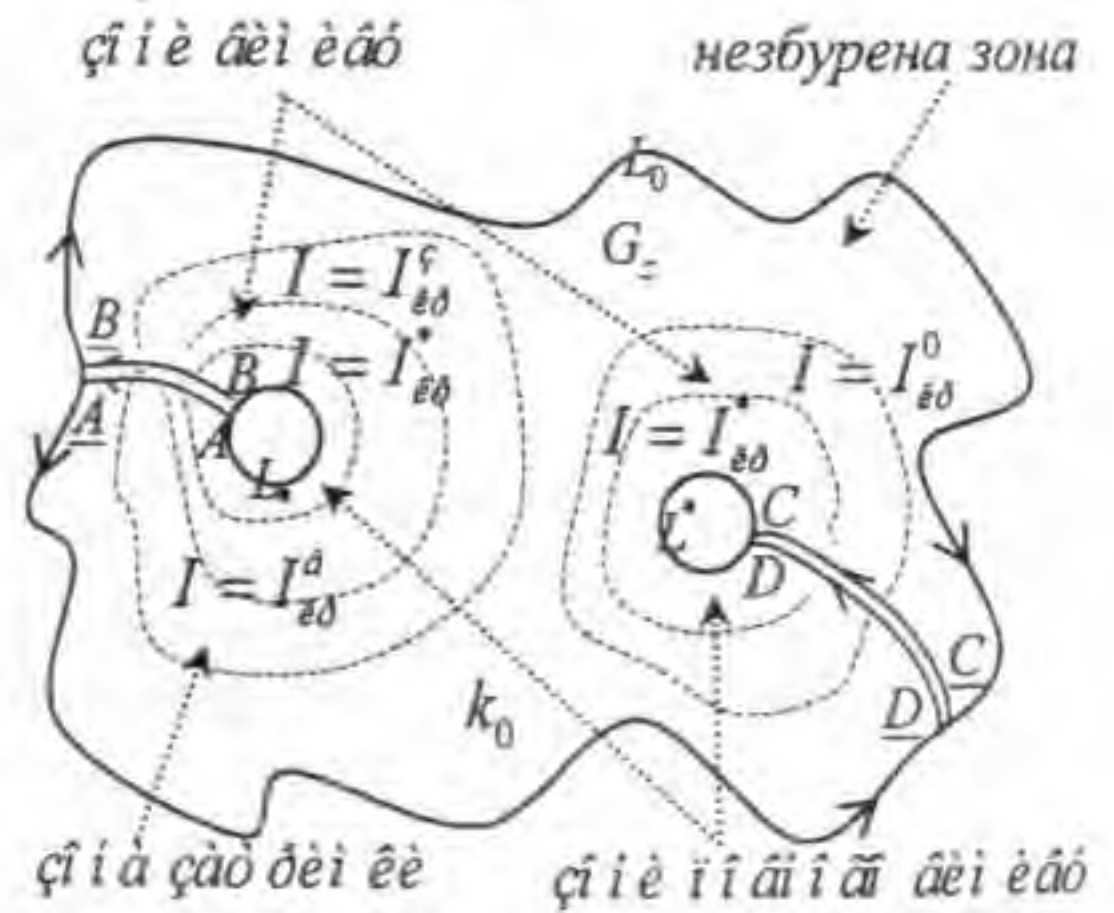


Рис. 1. Дві свердловини у пласті (із виділенням зон впливу критичних значень градієнта)

Залежності коефіцієнта провідності від величини градієнта, а також від величини квазіпотенціала φ вздовж однієї з ліній течії схематично зображено на рис. 2 (відповідно а), б)), де I_* – значення градієнта I у деякій точці $\varphi = \varphi_*$ такий, що $I_\varphi'(\varphi_*, \psi_0) = 0$; $\varphi_{kr}^B, \varphi_{kr}^3, \varphi_{kr}^0, \varphi_{kr}^*$ і φ_{kr}^{**} є розв'язки рівнянь $I(\varphi, \psi_0) = I_{kr}$, коли I_{kr} приймає відповідно значення $I_{kr}^B, I_{kr}^3, I_{kr}^0, I_{kr}^*$ (проміжки $[\varphi_{kr}^*, \varphi_{kr}^B]$, $[\varphi_{kr}^0, \varphi_{kr}^{**}]$, $[\varphi_{kr}^B, \varphi_{kr}^H]$, $[\varphi_*, \varphi_{kr}^*]$, $[\varphi_{kr}^{**}, \varphi^*]$, $[\varphi_{kr}^3, \varphi_{kr}^0]$ – належать відповідно до зон вимиву, затримки, повного вимиву та незбуреної зони).

Аналогічно до [4], ввівши квазікомплексно спряжену до $\varphi = \varphi(x, y)$ функцію течії $\psi = \psi(x, y)$, та здійснивши умовні розрізи Γ_* , Γ^* даної області вздовж ліній розділу течії (через $\underline{AA}$ та $\underline{BB}$, $\underline{CC}$ та $\underline{DD}$ на рис. 1 позначено відповідно верхній та нижній береги цих розрізів, де $\underline{A} = \underline{B} = (x_0^*, y_0^*)$, $\underline{C} = \underline{D} = (x_0^0, y_0^0)$ точки «призупинки» $A = B = (x_*, y_*) \in L_*$, $C = D = (x^*, y^*) \in L^*$) приходимо до відповідної задачі на квазіконформне відображення $\omega = \omega(z) = \varphi(x, y) + i\psi(x, y)$ [5] утвореної при цьому однозв'язної області $G_z^0 = G_z / (\Gamma_* \cup \Gamma^*)$ на відповідну прямокутну область квазікомплексного потенціалу $G_\omega = \{\omega = \varphi + i\psi:$

$\varphi_* < \varphi < \varphi^*$, $0 < \psi < Q$ з невідомими параметрами Q (повна витрата); $\underline{\varphi}$, $\bar{\varphi}$ (квазіпотенціали в шуканих точках «призупинки» – відповідно «розходження» та «сходження» течії); (x_0^*, y_0^*) , (x_*^0, y_*^0) ; (x_*, y_*) , (x^*, y^*) :

$$k \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, k \frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, (x, y) \in G_z^0, \varphi|_{AB} = \varphi_*,$$

$$\varphi|_{CD} = \varphi^*, \psi|_{AD} = 0, \psi|_{BC} = Q = \oint_L -v_y dx + v_x dy, \quad (2)$$

$$v(x_0^*, y_0^*) = 0, v(x_*^0, y_*^0) = 0, v(x, y) = |\vec{v}|.$$

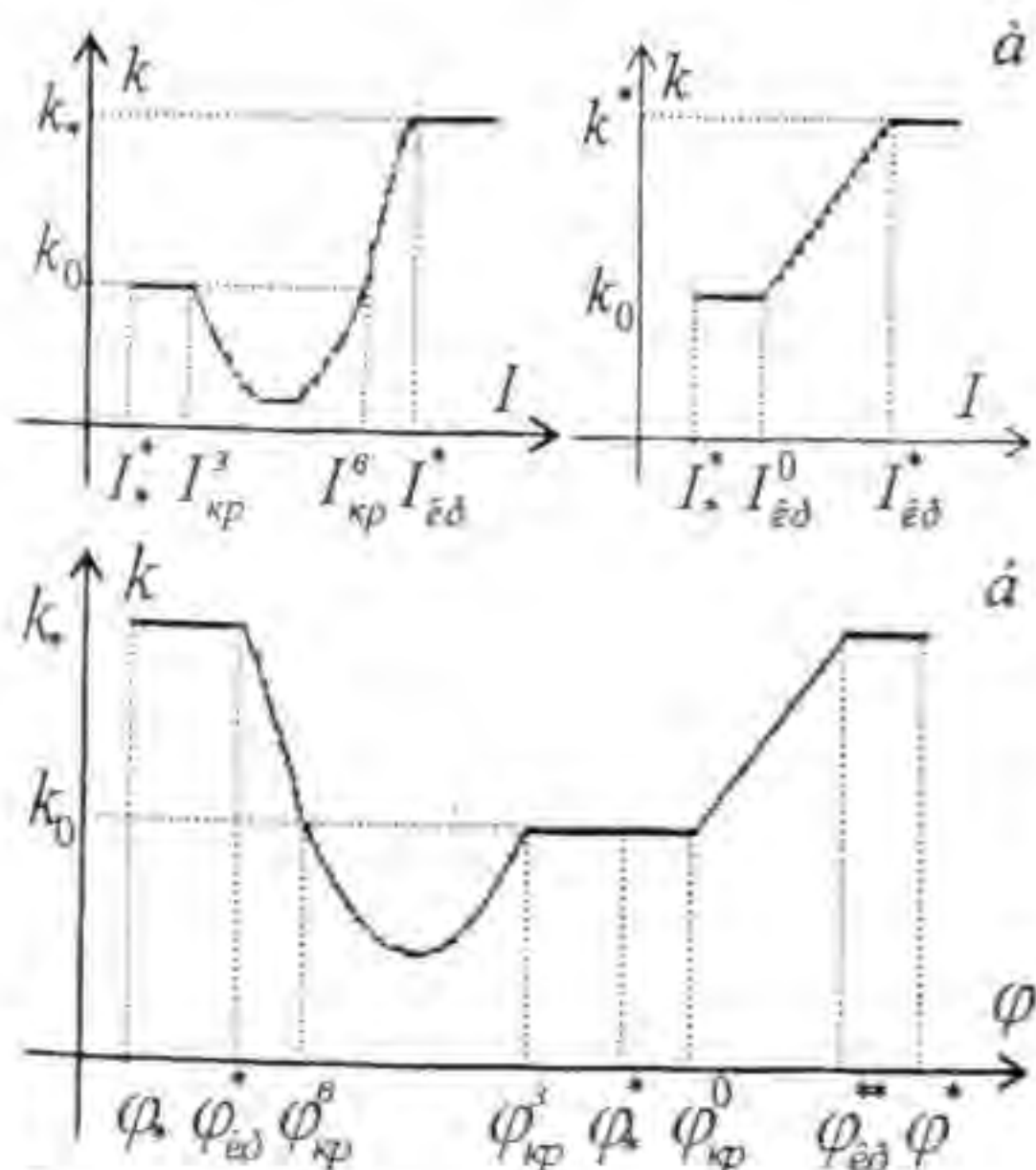


Рис. 2. Розподіл коефіцієнта провідності по відношенню до значень градієнту (а) та квазіпотенціалу (б)

Обернена крайова задача на квазіконформне відображення $z = z(\omega) = x(\varphi, \psi) + iy(\varphi, \psi)$ області G_ω на G_z^0 та рівняння для дійсної $x = x(\varphi, \psi)$ і уявної $y = y(\varphi, \psi)$ частини (виконання яких вимагатимемо і на розрізах для врахування їх «роздвоєння» при переході від області G_z до G_ω) функції течії при невідомих Q , $\underline{\varphi}$, $\bar{\varphi}$, та розрізах Γ_* , Γ^* одержимо у вигляді:

$$\begin{cases} k(x, y, \frac{y_\psi}{J}, -\frac{x_\psi}{J}) y_\psi = x_\varphi, & (\varphi, \psi) \in G_\omega, \\ k(x, y, \frac{y_\psi}{J}, -\frac{x_\psi}{J}) x_\psi = -y_\varphi, & J = x_\varphi y_\psi - x_\psi y_\varphi, \end{cases} \quad (3)$$

$$f_*(x(\varphi_*, \psi), y(\varphi_*, \psi)) = 0, f_0(x(\varphi, 0), y(\varphi, 0)) = 0,$$

$$f^*(x(\varphi^*, \psi), y(\varphi^*, \psi)) = 0, f_0(x(\varphi, Q), y(\varphi, Q)) = 0,$$

$$0 \leq \psi \leq Q, \varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^*, \quad (4)$$

$$x(\varphi, 0) = x(\varphi, Q), y(\varphi, 0) = y(\varphi, Q), \quad (5)$$

$$\varphi_* < \varphi \leq \underline{\varphi}, \underline{\varphi} \leq \varphi < \varphi^*,$$

$$\frac{\partial}{\partial \psi} \left(k \frac{\partial x}{\partial \psi} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{k} \frac{\partial x}{\partial \varphi} \right) = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \psi} \left(k \frac{\partial y}{\partial \psi} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{k} \frac{\partial y}{\partial \varphi} \right) = 0.$$

$$v(x(\varphi, \psi), y(\varphi, \psi)) = 0, v(x(\bar{\varphi}, \psi), y(\bar{\varphi}, \psi)) = 0, \psi = \{0, Q\}.$$

Час t проходження частинкою шляху від точки $(\varphi_*, \bar{\psi}_0)$ до біжучої точки $(\varphi, \bar{\psi}_0)$ вздовж лінії течії $\psi(x, y) = \bar{\psi}_0$ знаходимо використовуючи формулу для компонент швидкості ($v_x = \frac{k}{J(\varphi, \psi)} \frac{\partial y}{\partial \psi}$, $v_y = -\frac{k}{J(\varphi, \psi)} \frac{\partial x}{\partial \psi}$, $J(\varphi, \psi) = x'_\varphi y'_\psi - x'_\psi y'_\varphi$) та наступну формулу [4]

$$t = \Phi(\varphi, \bar{\psi}_0) = \int_{\varphi_*}^{\varphi} \sigma v^{-2}(x(\bar{\psi}_0, \bar{\psi}_0), y(\bar{\psi}_0, \bar{\psi}_0)) d\bar{\psi}_0 \quad (7)$$

де $\varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^*$, σ – пористість ґрунту (вважатимемо, що пористість обчислюється за формулою $\sigma = ak$, де a – деяке додатне дійсне число). Використовуючи (7) знаходимо положення лінії розділу $\Phi(\varphi, \psi) = \bar{t}$ різнокольорових рідин в довільний фіксований момент часу $t = \bar{t}$ зокрема – час початку заводнення $\Phi(\varphi^*, \underline{\psi}) = \min_{\psi \in [0, Q]} \Phi(\varphi^*, \psi)$ та повного затоплення $\Phi(\varphi^*, \bar{\psi}) = \max_{\psi \in [0, Q]} \Phi(\varphi^*, \psi)$

експлуатаційної свердловини.

Різницьевий аналог і алгоритм розв'язку. Введемо в області G_ω рівномірну ортогональну сітку

$$G_\omega^I = \{(\varphi_i, \psi_j) : \varphi_i = \varphi_* + i\Delta_i\varphi,$$

$$\Delta_i\varphi = \Delta\varphi_1 = \frac{\varphi - \varphi_*}{n_1 + 1} \quad \text{при} \quad i = \overline{0, n_1};$$

$$\varphi_i = \underline{\varphi} + (i - n_1 - 1)\Delta_i\varphi, \quad \Delta_i\varphi = \Delta\varphi_2 = \frac{\bar{\varphi} - \underline{\varphi}}{n_2 - 1} \quad \text{при}$$

$$\begin{aligned} i = \overline{n_1 + 1, n_1 + n_2}; \quad \varphi_i = \bar{\varphi} + (i - n_1 - n_2)\Delta\varphi, \\ \Delta_i\varphi = \Delta\varphi_3 = \frac{\varphi^* - \bar{\varphi}}{n_3 + 1} \quad \text{при} \quad i = \overline{n_1 + n_2 + 1, n}; \\ \psi_j = j\Delta\psi, \quad \Delta\psi = \frac{Q}{m}, \quad j = \overline{0, m}; \quad \gamma_l = \frac{\Delta\varphi_l}{\Delta\psi}, l = \overline{1, 3} \end{aligned}$$

де $n = n_1 + n_2 + n_3 + 1$, $n_1, n_2, n_3, m \in \mathbb{N}$ – параметри розбиття області комплексного потенціалу, $\Delta\varphi_1, \Delta\varphi_2, \Delta\varphi_3, \Delta\psi$ – кроки сітки відповідно по змінним φ та ψ , γ_l – квазіконформні інваріанти.

Рівняння (6) апроксимуємо використовуючи метод скінченних об'ємів [6], що забезпечує консервативність числової схеми:

$$\begin{cases} \gamma_l^2 (k_{i,j+1/2} (x_{i,j+1} - x_{i,j}) - k_{i,j-1/2} (x_{i,j} - x_{i,j-1})) + \\ + \frac{x_{i+1,j} - x_{i,j}}{k_{i+1/2,j}} - \frac{x_{i,j} - x_{i,j-1}}{k_{i-1/2,j}} = 0, \\ \gamma_l^2 (k_{i,j+1/2} (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - k_{i,j-1/2} (y_{i,j} - y_{i,j-1})) + \\ + \frac{y_{i+1,j} - y_{i,j}}{k_{i+1/2,j}} - \frac{y_{i,j} - y_{i,j-1}}{k_{i-1/2,j}} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

де

$$\begin{aligned} k_{i\pm 1/2,j} &= k((x_{i\pm 1,j} + x_{i,j})/2, (y_{i\pm 1,j} + y_{i,j})/2, \\ & (y_{i\pm 1,j+1} + y_{i,j+1} - y_{i\pm 1,j-1} - y_{i,j-1})/(4\Delta\psi J_{i\pm 1/2,j}), \\ & (x_{i\pm 1,j-1} + x_{i,j-1} - x_{i\pm 1,j+1} - x_{i,j+1})/(4\Delta\psi J_{i\pm 1/2,j})), \\ k_{i,j\mp 1/2} &= k((x_{i,j\mp 1} + x_{i,j})/2, (y_{i,j\mp 1} + y_{i,j})/2, \pm(y_{i,j} - \\ & - y_{i,j\mp 1})/(\Delta\psi J_{i,j\mp 1/2}), \pm(x_{i,j\mp 1} - x_{i,j})/(\Delta\psi J_{i,j\mp 1/2})), \\ J_{i\mp 1/2,j} &= \frac{\pm 1}{4\Delta\psi\Delta\varphi_l} ((x_{i,j} - x_{i\mp 1,j})(y_{i\mp 1,j+1} + y_{i,j+1} - \\ & - y_{i\mp 1,j-1} - y_{i,j-1}) - (y_{i,j} - y_{i\mp 1,j})(x_{i\mp 1,j+1} + x_{i,j+1} - \\ & - x_{i\mp 1,j-1} - x_{i,j-1})), \\ J_{i,j\mp 1/2} &= \frac{\pm 1}{4\Delta\psi\Delta\varphi_l} ((y_{i,j} - y_{i,j\mp 1})(x_{i+1,j\mp 1} + x_{i+1,j} - \\ & - x_{i-1,j\mp 1} - x_{i-1,j}) - (x_{i,j} - x_{i,j\mp 1})(y_{i+1,j\mp 1} + y_{i+1,j} - \\ & - y_{i-1,j\mp 1} - y_{i-1,j})), i = \overline{1, n_1}, l = 1; i = \overline{n_1 + 1, n_1 + n_2}, \\ l = 2; j = \overline{1, m-1}, i = \overline{n_1 + n_2 + 1, n-1}, l = 3. \end{aligned}$$

Крайові умови – функції та умови періодичності (4), (5), що визначають фізичну область G_z – апроксимуємо наступним чином:

$$\begin{cases} f_1(x_{0,j}, y_{0,j}) = 0, f_2(x_{n,j}, y_{n,j}) = 0, j = \overline{0, m}, \\ f(x_{i,0}, y_{i,0}) = 0, f(x_{i,m}, y_{i,m}) = 0, i = \overline{n_1 + 1, n_1 + n_2}, \\ x_{i,0} = x_{i,m}, y_{i,0} = y_{i,m}, i = \overline{0, n_1 + 1}, \\ x_{i,0} = x_{i,m}, y_{i,0} = y_{i,m}, i = \overline{n_1 + n_2, n}. \end{cases} \quad (9)$$

Умови ортогональності, різницевої аналогії умов типу Коші-Рімана (3), у сітковій області G'_z записуються у вигляді:

$$\begin{aligned} (4x_{1,j} - 3x_{0,j} - x_{2,j})(x_{0,j+1} - x_{0,j-1}) + \\ + (4y_{1,j} - 3y_{0,j} - y_{2,j})(y_{0,j+1} - y_{0,j-1}) = 0, \\ (3x_{n,j} + x_{n-2,j} - 4x_{n-1,j})(x_{n,j+1} - x_{n,j-1}) + \\ + (3y_{n,j} + y_{n-2,j} - 4y_{n-1,j})(y_{n,j+1} - y_{n,j-1}) = 0, \\ (4x_{i,1} - 3x_{i,0} - x_{i,2})(x_{i+1,0} - x_{i-1,0}) + \\ + (4y_{i,1} - 3y_{i,0} - y_{i,2})(y_{i+1,0} - y_{i-1,0}) = 0, \\ (3x_{i,m} + x_{i,m-2} - 4x_{i,m-1})(x_{i+1,m} - x_{i-1,m}) + \\ + (3y_{i,m} + y_{i,m-2} - 4y_{i,m-1})(y_{i+1,m} - y_{i-1,m}) = 0, \\ j = \overline{0, m-1}, i = \overline{n_1 + 1, n_1 + n_2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Невідому витрату Q шукаємо за формулою

$$Q = m\Delta\psi, \quad \text{де} \quad \Delta\psi = \frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 \frac{\Delta\varphi_l}{\gamma_l}, \quad \gamma_l - \text{одержуємо на}$$

підставі умови «квазіконформної подібності» малому» відповідних елементарних чотирикутників двох областей:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{1}{m(n_1 + 1)} \sum_{i,j=0}^{n_1, m-1} \gamma_{i,j}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{m(n_2 - 1)} \sum_{i,j=n_1+1,0}^{n_1+n_2-1, m-1} \gamma_{i,j}, \\ \gamma_3 &= \frac{1}{m(n - n_1 - n_2)} \sum_{i,j=n_1+n_2,0}^{n-1, m-1} \gamma_{i,j}, \end{aligned} \quad (11)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma_{i,j} &= \frac{1}{k_{i+1/2,j+1/2}} \frac{a_{i,j} + a_{i,j+1}}{b_{i,j} + b_{i,j+1}}, \quad k_{i+1/2,j+1/2} = k((x_{i,j} + \\ & + x_{i+1,j} + x_{i,j+1} + x_{i+1,j+1})/4, (y_{i,j} + y_{i+1,j} + y_{i,j+1} + \\ & + y_{i+1,j+1})/4, (y_{i+1,j+1} + y_{i,j+1} - y_{i+1,j} - \\ & - y_{i,j})/(2\Delta\psi J_{i,j}), (x_{i+1,j} + x_{i,j} - x_{i+1,j+1} - \\ & - x_{i,j+1})/(2\Delta\psi J_{i,j})), \quad J_{i,j} = \frac{1}{4\Delta\psi\Delta\varphi_l} ((x_{i+1,j} + \\ & + x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1} - x_{i,j})(y_{i+1,j+1} + y_{i,j+1} - y_{i+1,j} - \\ & - y_{i,j}) - (x_{i,j+1} + x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j} - x_{i,j})(y_{i+1,j+1} + \\ & + y_{i+1,j} - y_{i,j+1} - y_{i,j})), \quad l = \overline{1, 3}, \end{aligned}$$

$$a_{i,j} = \sqrt{(x_{i,j+1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j})^2},$$

$$b_{i,j} = \sqrt{(x_{i,j+1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j})^2}.$$

У процесі ітераційного розв'язку задачі невідомі φ , $\bar{\varphi}$ шукаємо за формулами:

$$\varphi = \varphi_* + (n_1 + 1)\Delta\psi\gamma_1, \quad \bar{\varphi} = \bar{\varphi}^* - (n_3 + 1)\Delta\psi\gamma_3.$$

Формули для розрахунку швидкості записуються аналогічно як і в роботі [4].

Згідно з (7) маємо формулу для наближеного розрахунку часу проходження частинкою шляху вздовж j -тої лінії течії від i_* до i^* кватіеквіпотенціалей:

$$t_{j(i_*, i^*)} = a \sum_{i=i_*}^{i^*} \frac{k_{i,j} \Delta\varphi}{v^2(x(\varphi_i, \psi_j), y(\varphi_i, \psi_j))}, \quad j = \overline{0, m},$$

$(i_*, i^*) = \overline{0, n}$ (зокрема, $t_{j(0,n)}$ - час руху частинки рідини від нагнітальної свердловини до експлуатаційної).

Алгоритм розв'язку різницевої задачі (8) – (11) в загальному повторює кроки запропонованого в роботі [4] алгоритму, лише з тією відмінністю, що після уточнення внутрішніх вузлів динамічної сітки $(x_{i,j}^{(k)}, y_{i,j}^{(k)})$ за формулами, отриманими шляхом розв'язання (8) відносно $x_{i,j}$ та $y_{i,j}$, необхідно ще шукати значення градієнту та функції k у вузлах сітки G_w^* використовуючи значення $x_{i,j}, y_{i,j}$ з попереднього кроку ітерації.

Числові розрахунки проведено для області з коефіцієнтом провідності, що визначається вище запропонованою моделлю (1) при $k_0 = 1$, $\varepsilon = 0.1$, $\alpha = 180$, $a = 3$, $I_{kp}^* = 0.208$, $I_{kp}^3 = 0.1$, $I_{kp}^B = 0.151$, $I_{kp}^0 = 0.151$; $\varphi_* = 0$, $\varphi^* = 1$, $x_*(t) = 0.82 \cos(t) - 6.6$, $y_*(t) = 0.82 \sin(t)$, $x^*(t) = 0.82 \cos(t) + 6.6$, $y^*(t) = 0.82 \sin(t)$, $x_0(t) = 20(\cos(t) + 0.1 \cos(2t))$, $y_0(t) = 20(\sin(t) - 0.1 \sin(2t))$.

На рисунку 3 зображено гідродинамічну сітку руху (при наступному співвідношенні параметрів $n_1 \times n_2 \times n_3 \times m = 41 \times 94 \times 45 \times 189$) з побудованими на ній лініями розділу різнокольорових рідин в різні моменти часу, для випадку деформівного а) (коли суфозійний процес стабілізувався) та недеформівного б) середовищ, де криві 2, 3 (у випадку деформівного середовища) є положеннями фронту в моменти часу $t = \Phi(\varphi^*, \psi) = 459.98$ (початок заводнення

експлуатаційної свердловини), та $t = 1124.74$ (положення фронту за умови коли в експлуатаційну свердловину потрапляє однакова кількість води і нафти). Зауважимо, що положення ліній розділу рідин для випадку руху в деформівному пласті мажоруються побудованими вище лініями для однорідного пласта та відповідного деформівного на стадії стабілізації суфозійно - фільтраційної взаємодії.

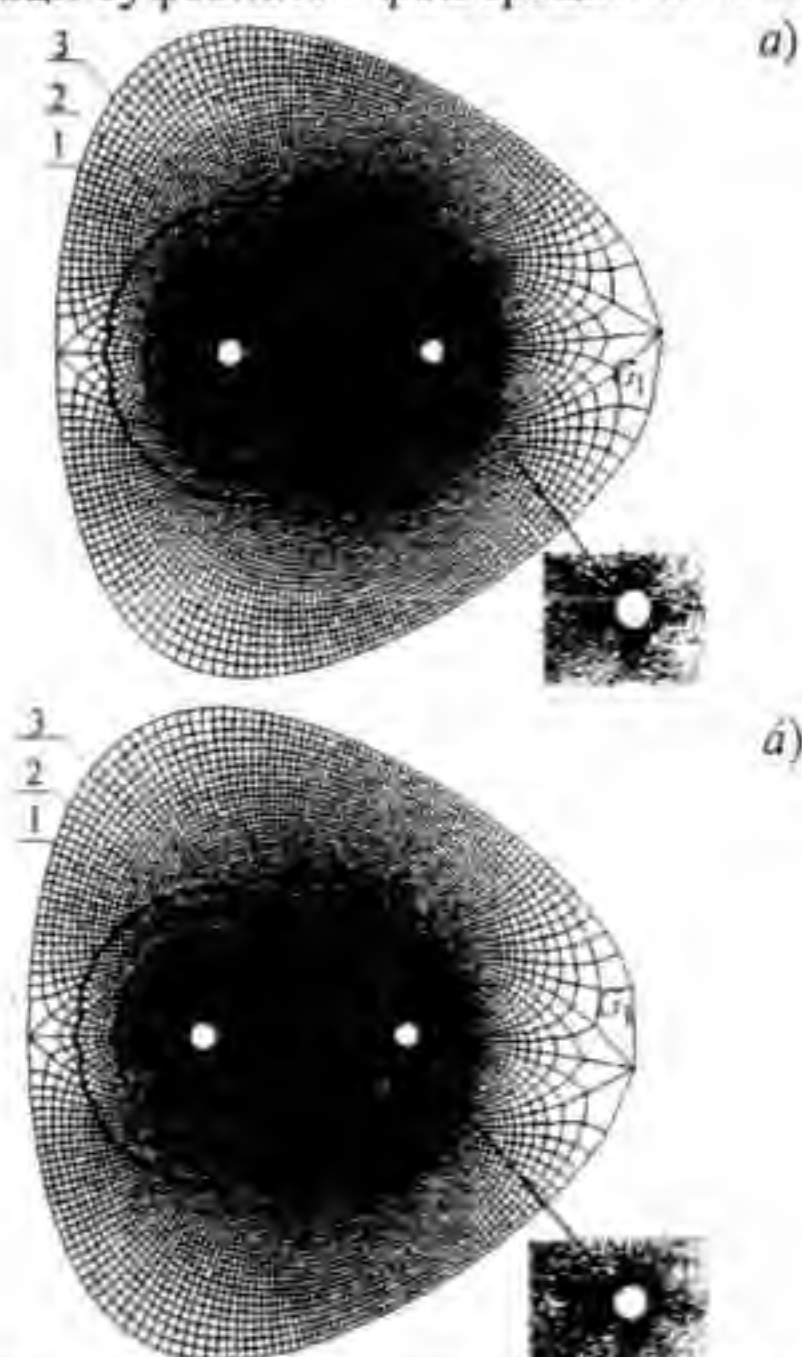


Рис. 3 Дві свердловини відповідно в неоднорідному а) та однорідному б) пластах з побудованими контурами розділу в різні моменти часу

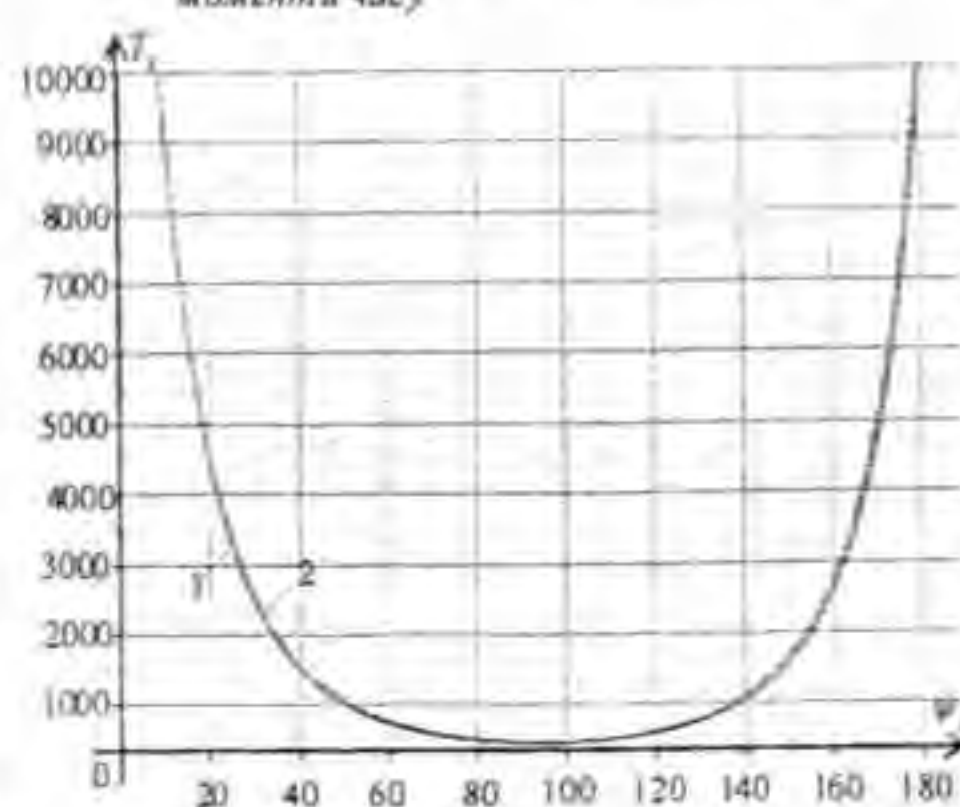


Рис. 4 Залежність часу T , проходження частинок від нагнітальної свердловини до експлуатаційної відносно ψ , для деформівного 1 та недеформівного 2 середовищ

Як бачимо, на початковій стадії нагнітання поблизу нагнітальної свердловини течія є близькою до радіальної. Далі лінія фронту витіснення витягується, загострюючись в напрямку експлуатаційної свердловини.

На рис. 4 проілюстровано залежність часу $T_j = \Phi(\varphi^*, \psi_j)$ проходження частинкою шляху від нагнітальної до експлуатаційної свердловини відносно до конкретної лінії течії ψ_j ($j = \overline{0, m}$, 1 – для деформівного пласта, 2 – для недеформівного).

На рис. 5 зображено залежність частки витісняючої рідини у загальній фільтраційній витраті експлуатаційної свердловини від часу.

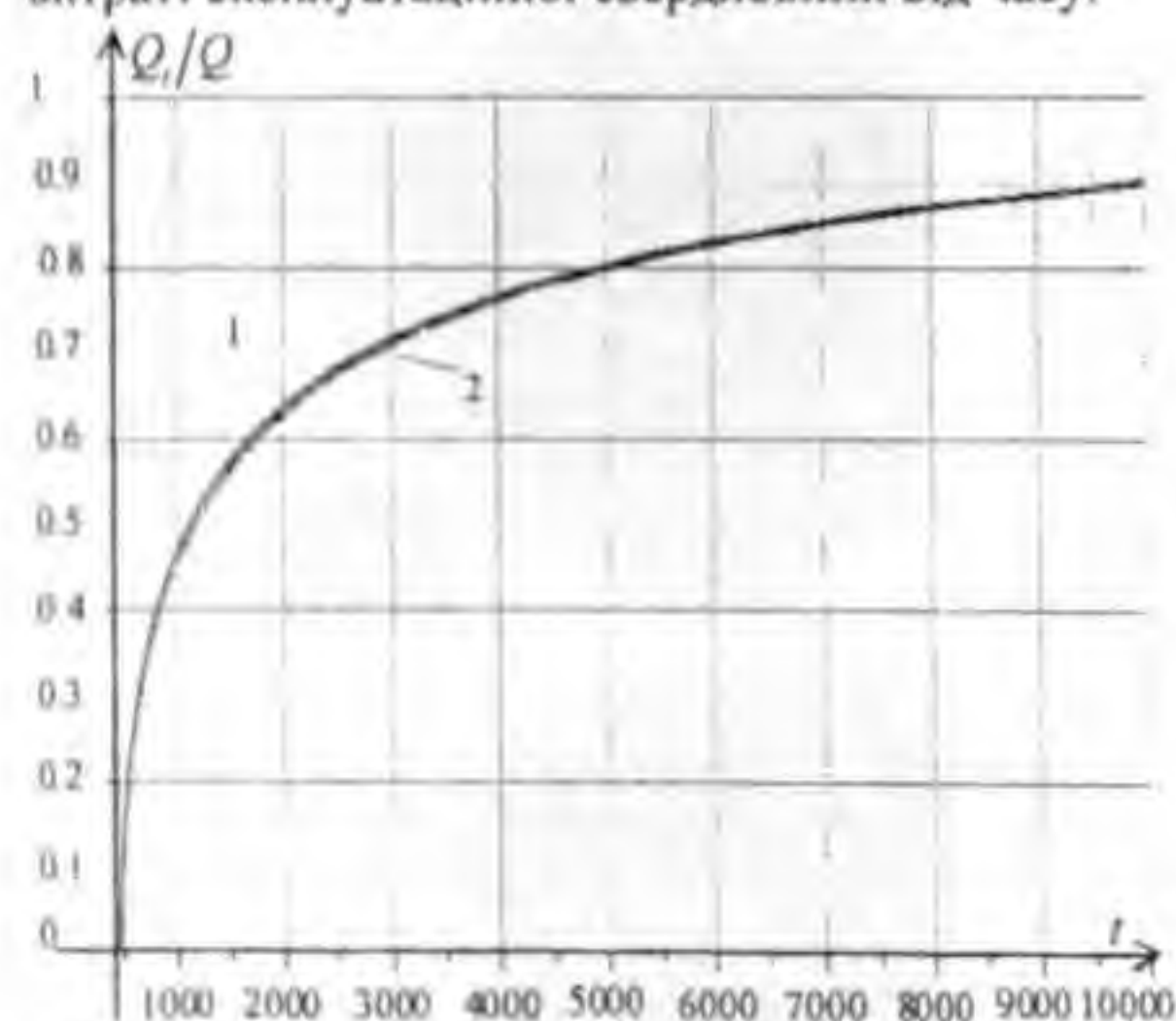


Рис. 5 Залежність частки витісняючої рідини в загальній фільтраційній витраті від часу у випадку деформівного 1 та недеформівного 2 пластів

Висновки. Розроблено алгоритм числового розв'язання обернених нелінійних модельних задач на квазіконформні відображення для моделі типу „нагнітальна та експлуатаційна свердловини” у горизонтальному схильному до суфозійних деформацій пласті, що автоматично вирішує проблему побудови рівномірної гідродинамічної сітки, знаходження положення лінії розділу різнокольорових рідин у різні моменти часу, частки витісняючої рідини (води) у загальній фільтраційній витраті (зокрема час повного обводнення експлуатаційної свердловини).

Особливо актуальним є можливість встановлення часу, коли заводненість пласта перевищує встановлену норму, а це в свою чергу означає, що подальша експлуатація свердловини економічно не вигідна і необхідно її зупинити, або ж провести водоізоляційні роботи [7].

Врахування явища суфозії за вище вказаним законом викликало збільшення шуканої витрати Q у порівнянні з витратою для однорідного (недеформівного) середовища та зменшення часу

початку потрапляння витісняючої рідини до експлуатаційної свердловини та повного її заводнення.

Список використаних джерел

1. Бомба А. Я. Математичне моделювання нелінійних процесів фільтрації з урахуванням малих деформацій середовища / А. Я. Бомба, М. М. Хлапук, Б. П. Сидорчук // Актуальні проблеми водного господарства. Т. 1. Вид-во УДАВГ. – Рівне, 1997. – С. 11–15.
2. Бомба А. Я. Про моделювання взаємовпливу фільтрації та механічної суфозії / А. Я. Бомба, М. М. Хлапук, Б. П. Сидорчук // Сучасні проблеми теорії фільтрації. Вісник УДАВГ. – Рівне, 1998. – С. 157–166.
3. Бомба А. Я. Чисельне розв'язання нелінійних модельних крайових задач на квазіконформні відображення в умовах взаємовпливу градієнтів потенціалу та характеристик середовища / А. Я. Бомба, Д. О. Пригорницький, В. В. Скопечкий // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2003. – Вип. 1. – С. 126–135.
4. Бомба А. Я. Метод конформних відображень математичного моделювання процесів витіснення у нафтогазових пластах: прогнозування динаміки руху лінії розділу різнокольорових рідин / А. Я. Бомба, С. В. Ярошак // Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика. Випуск 6 (15) – Рівне: РДГУ, 2009. – С. 20–35.
5. Бомба А. Я. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки / А. Я. Бомба, В. М. Булавацький, В. В. Скопечкий – Київ: Наукова думка, 2007. – 308 с.
6. Versteeg H. An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method / H. K. Versteeg, W. Malalasekera - Longman Scientific & Technical. New York, 1995. – 267 с.
7. Газизов А. Ш. Повышение эффективности разработки нефтяных месторождений на основе ограничения движения вод в пластах / А. Ш. Газизов, А. А. Газизов – М.: ООО «Недра-Бизнесцентр», 1999. – 285 с.

Надійшла до редколегії 10.03.2010

УДК 519.6

Булигін В. С., аспірант.

Метод дискретних особливостей у задачі дифракції електромагнітної хвилі на ідеально провідній поверхні обертання

Розглядається задача дифракції електромагнітної хвилі на ідеально провідній поверхні обертання, розташованій в безмежному однорідному ізотропному середовищі. Задача зводиться до систем сингулярних і гіперсингулярних інтегральних рівнянь, які вирішуються методом дискретних особливостей, використовуючи квадратурні формули інтерполяційного типу. Через рішення цих систем виражається розсіяне поле і діаграми спрямованості.

Ключові слова: гіперсингулярні та сингулярні інтегральні рівняння, діаграми спрямованості, квадратурні формули інтерполяційного типу.

Bulygin V. S., post-graduate student

E-mail: Vital_Bulya@rambler.ru

Статтю представив: д.т.н, проф. Ф.Г.Гарашенко

Вступ

Задача дифракції електромагнітної хвилі на поверхні обертання розглядалася у цілому ряді робіт, серед яких відзначимо [1-3,5]. В основу математичних моделей у роботах [1-2] були покладені не крайові задачі для рівнянь Максвелла, а їх ідеалізоване уявлення. До цих ідеалізацій відносяться методи геометричної і фізичної оптики. У запропонованій статті в основу математичних моделей покладені точні рівняння Максвелла, поля в яких задовольняють умовам випромінювання Зоммерфельда на нескінченності, граничним умовам для ідеально провідної поверхні, і умовам Майкснера на ребрах екрану.

У роботі [3] автори зводять вищезазначену задачу до систем одновимірних інтегро-диференціальних рівнянь і шукають невідому функцію у вигляді кусково-постійної. Але, взагалі кажучи, цей метод не гарантує збіжність наближених рішень до точного. Збіжність наближених рішень до точного доведена лише в осесиметричному випадку Е-поляризації, коли система одновимірних інтегро-диференціальних рівнянь в [1] вироджується в інтегральне рівняння першого роду з логарифмічною особливістю [4].

The method of discrete singularities in electromagnetic diffraction problem by perfectly electrically conducting surface.

A problem of a monochromatic electromagnetic wave diffraction by a perfectly electrically conducting surface of rotation located in an infinite homogeneous isotropic medium is investigated. The problem is reduced to sets of hypersingular and singular integral equations which are solved by the method of discrete singularities, using interpolation type quadrature formulas. From the solutions of these sets the scattered electric field expression and the scattering patterns is obtained. The scattering patterns for some resonance frequencies of the spherical disk are given.

Key Words: hypersingular and singular integral equations, scattering patterns, interpolation type quadrature formulas

В [5] за допомогою методу аналітичної регуляризації вирішена задача дифракції на сферичному екрані з круглим отвором. Метод, описаний в [5], має контрольовану точність і досить швидку збіжність, але з його допомогою можна вирішити задачу дифракції лише у випадку, коли хвильовий вектор падаючої хвилі паралельний осі обертання сферичного екрана з отвором.

Запропонований в даній роботі метод має гарантовану збіжність для довільного падаючого поля і для довільної поверхні обертання з гладкою твірною.

Задача зводиться до систем гіперсингулярних і сингулярних інтегральних рівнянь і чисельно розв'язується за допомогою методу дискретних особливостей, використовуючи квадратурні формули інтерполяційного типу. Це забезпечує збіжність наближених розв'язків до точному з високою швидкістю [6,7]. Завдяки тому, що невідома функція розшукується у вигляді інтерполяційного полінома, а поведінка на ребрі враховується аналітично, то, на відміну від підходу [1], де невідома функція представлялася кусково-постійною, для досягнення необхідної точності можна брати значно меншу кількість розрахункових точок, ніж в підході [1], що

прискорює процес знаходження наближеного розв'язку.

1. Постановка задачі

Розглядається задача дифракції монохроматичної електромагнітної хвилі $(\vec{E}^0, \vec{H}^0)$ на ідеально провідній поверхні обертання S , розташованій у безмежному однорідному ізотропному середовищі. Залежність полів від часу задається множителем $e^{i\omega t}$.

Поза поверхні S розсіяне поле $(\vec{E}, \vec{H})$ задовольняє рівнянням Максвелла:

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -i\omega\mu\vec{H} \quad (1)$$

$$\operatorname{rot} \vec{H} = i\omega\varepsilon\vec{E} \quad (2)$$

де ε і μ - абсолютна діелектрична і магнітна проникність середовища.

На ідеально провідній поверхні S дотична складова повного поля перетворюється на нуль:

$$[\vec{n}, \vec{E}(x)] = -[\vec{n}, \vec{E}^0(x)], \quad x \in S \quad (3)$$

На нескінченності виконуються умови випромінювання Зоммерфельда:

$$\frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} + ik \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix} = \vec{o}(r^{-1}), \quad r \rightarrow +\infty \quad (4)$$

Щоб рішення задовольняло умові на ребрах поверхні, вимагатимемо виконання умов Майкснера в інтегральній формі:

$$\int_{\Omega} (\varepsilon |\vec{E}|^2 + \mu |\vec{H}|^2) dV < \infty \quad (5)$$

Тут $\Omega \in R^3$ - обмежена область.

Введемо циліндричну систему координат ρ, φ, z таким чином, щоб полярна вісь збіглася з віссю поверхні обертання S . Тоді поверхня S утворена обертанням деякого контуру Γ навколо осі z . Введемо також систему криволінійних ортогональних координат обертання q, τ, φ так, щоб поверхня мала параметризацію: $S: q = q_0, \tau \in [-1, 1], \varphi \in [0, 2\pi]$. Визначені в даній точці орти $(\vec{q}^0, \vec{\tau}^0, \vec{\varphi}^0)$ утворюють праву трійку векторів, а зв'язок координат обертання q, τ з циліндричними координатами ρ, z виражається формулами:

$$\rho = \rho(q, \tau), \quad z = z(q, \tau).$$

Коефіцієнти Ламе системи координат q, τ, φ позначимо відповідно l_q, l_τ, l_φ . Вони дорівнюють

$$l_q = \sqrt{(\rho'_q)^2 + (z'_q)^2}, \quad l_\tau = \sqrt{(\rho'_\tau)^2 + (z'_\tau)^2}, \quad l_\varphi = \rho.$$

У випадку, коли точка $X \in S$, тобто $X = (\rho(q_0, t) \cos \psi, \rho(q_0, t) \sin \psi, z(q_0, t))$, $t \in [\alpha, \beta]$ і по змінній t проводиться інтегрування, будемо позначати всюди $\rho_0 := \rho(q_0, t)$, $z_0 := z(q_0, t)$, $h_\tau = l_\tau(q_0, t)$. Якщо $Y = (\rho(q, \tau) \cos \psi, \rho(q, \tau) \sin \psi, z(q, \tau))$ - точка спостереження, яка може лежати як на поверхні, так і поза нею, то всюди введемо позначення $\rho := \rho(q, \tau)$, $z := z(q, \tau)$ (Рис. 1).

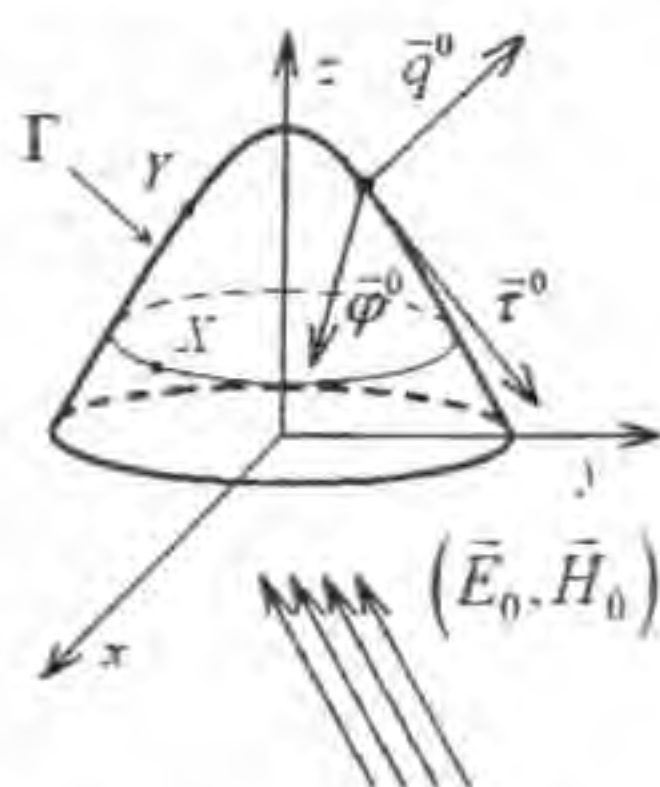


Рис. 1 Геометрія задачі

2. Інтегро-диференціальні рівняння задачі

Компоненти щільності струму j_τ, j_φ і компоненти первинного поля $\vec{E}^0$ електромагнітної хвилі на поверхні S розкладаються в ряд Фур'є:

$$j_\nu(t, \psi) = \sum_{m=0}^{\infty} j_\nu^{(m)}(t) e^{im\psi}, \quad \nu = \tau, \varphi \quad (6)$$

$$E_\nu^0(t, \psi) = \sum_{m=0}^{\infty} E_\nu^{0(m)}(t) e^{im\psi}, \quad \nu = \tau, \varphi \quad (7)$$

У наведеній системі координат q, τ, φ крайова умова (3) еквівалентна співвідношенням

$$E_\nu^0(x) = -E_\nu^0(x), \quad x \in S, \nu = \tau, \varphi \quad (8)$$

У роботі [1] показано, що крайові умови (3) за допомогою виразів вектора електричної напруженості через векторний і скалярний потенціали, еквівалентні наступним системам інтегро-диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \lim_{q \rightarrow q_0} \left[\int_{\alpha}^{\beta} A^{(m)}(q, \tau, t) j_{\tau}^{(m)}(t) dt + \right. \\ \left. \int_{\alpha}^{\beta} B^{(m)}(q, \tau, t) j_{\varphi}^{(m)}(t) dt \right] = f_1^{(m)}(\tau) \\ \lim_{q \rightarrow q_0} \left[\int_{\alpha}^{\beta} C^{(m)}(q, \tau, t) j_{\tau}^{(m)}(t) dt + \right. \\ \left. \int_{\alpha}^{\beta} D^{(m)}(q, \tau, t) j_{\varphi}^{(m)}(t) dt \right] = f_2^{(m)}(\tau), \\ \tau \in [\alpha, \beta] \end{cases}$$

Тут

$$A^{(m)}(q, \tau, t) = \frac{\partial^2 S_m}{\partial t \partial \tau} \rho_0 - k^2 \rho_0 (\rho_{0t} \rho_{\tau} S_m^+ + z_{0t} z_{\tau} S_m^-)$$

$$B^{(m)}(q, \tau, t) = -im \frac{\partial S_m}{\partial \tau} h_{\tau}(t) + k^2 \rho_0 \rho_{\tau} S_m^- h_{\tau}(t)$$

$$C^{(m)}(q, \tau, t) = \frac{im}{\rho} \frac{\partial S_m}{\partial t} \rho_0 - k^2 \rho_0 \rho_{0t} S_m^-$$

$$D^{(m)}(q, \tau, t) = h_{\tau}(t) \left(\frac{m^2}{\rho} S_m - k^2 \rho_0 S_m^+ \right)$$

$$f_1^{(m)}(\tau) = 4\pi i k \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E_{\tau c}^{(m)}(q_0, \tau) h_{\tau}(\tau)$$

$$f_2^{(m)}(\tau) = 4\pi i k \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E_{\varphi s}^{(m)}(q_0, \tau)$$

$$S_m = S_m(q, \tau, t) = \int_0^{2\pi} \frac{e^{-ikL}}{L} \cos(m\psi) d\psi,$$

$$S_m^{(+)} = \frac{1}{2} (S_{m+1} + S_{m-1}), \quad S_m^{(-)} = \frac{1}{2i} (S_{m+1} - S_{m-1}),$$

$$L = \sqrt{\rho^2 + \rho_0^2 - 2\rho\rho_0 \cos\psi + (z - z_0)^2}$$

3. Гіперсингулярні і сингулярні інтегральні рівняння задачі

Щоб забезпечити виконання умов Майкснера (5), покладемо:

$$\rho(t) j_{\tau}^{(m)}(t) = u^{(m)}(t) \sqrt{1-t^2},$$

$$j_{\varphi}^{(m)}(t) h_{\tau}(t) = \frac{w^{(m)}(t)}{\sqrt{1-t^2}},$$

де $w^{(m)}(t)$ і $u^{(m)}(t)$ - обмежені функції

Введемо у розгляд наступні оператори [2]:

гіперсингулярний інтегральний оператор, що розуміється у сенсі кінцевої частини по Адамару[2]:

$$(Au)(\tau) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{u(t)}{(\tau-t)^2} \sqrt{1-t^2} dt$$

сингулярні інтегральні оператори, що розуміються у сенсі головного значення по Коші

$$\begin{aligned} (Tu)(\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{u(t)}{\tau-t} \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \\ (9) \quad (T^{-1}u)(\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{u(t)}{\tau-t} \sqrt{1-t^2} dt \end{aligned}$$

інтегральні оператори з логарифмічним ядром:

$$\begin{aligned} (L'u)(\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \ln|\tau-t| u(t) \sqrt{1-t^2} dt \\ (L''u)(\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \ln|\tau-t| u(t) \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \end{aligned}$$

інтегральні оператори, підінтегральні функції яких задовольняють умові Гельдера по кожній змінній рівномірно по другій:

$$\begin{aligned} (K_{l,\tau}^I u)(\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 K_{l,\tau}(\tau, t) u(t) \sqrt{1-t^2} dt, \\ (K_{l,\varphi}^{II} u)(\tau) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 K_{l,\varphi}(\tau, t) u(t) \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}}, \end{aligned}$$

$l = 1, 2$

Можна показати [8], що система (9) еквівалентна наступній системі гіперсингулярних і сингулярних інтегральних рівнянь:

$$\begin{cases} \left((a_{1\tau} A + b_{1\tau} T^{-1} + c_{1\tau}^{(m)} L' + K_{1\tau}^{(m)I}) u^{(m)}(\tau) + \right. \\ \left. + (b_{1\varphi}^{(m)} T + c_{1\varphi}^{(m)} L'' + K_{1\varphi}^{(m)II}) w^{(m)}(\tau) \right) = \frac{f_1^{(m)}(\tau)}{\pi} \\ \left((b_{2\tau} T^{-1} + c_{2\tau}^{(m)} L' + K_{2\tau}^{(m)I}) u^{(m)}(\tau) + \right. \\ \left. + (c_{2\varphi}^{(m)} L'' + K_{2\varphi}^{(m)II}) w^{(m)}(\tau) \right) = \frac{f_2^{(m)}(\tau)}{\pi} \end{cases} \quad (10)$$

Тут введені позначення:

$$a_{1\tau}(y) = -\frac{2}{\rho}, \quad b_{1\tau}(y) = -\frac{\rho'}{\rho^2}$$

$$c_{1\tau}^{(m)}(y) = -\frac{3\rho'^2 + z'^2}{4\rho^3} + k^2 \frac{\rho'^2 + z'^2}{\rho} + \frac{m^2}{\rho^3} (\rho'^2 + z'^2)$$

$$b_{1\varphi}^{(m)}(y) = \frac{2m \cdot i}{\rho}, \quad c_{1\varphi}^{(m)}(y) = -m \cdot i \frac{\rho'}{\rho^2}$$

$$b_{2\tau}^{(m)}(y) = \frac{2m \cdot i}{\rho^2}, \quad c_{2\tau}^{(m)}(y) = m \cdot i \frac{\rho}{\rho^3},$$

$$c_{2\varphi}^{(m)}(y) = -\frac{2}{\rho} \left(\frac{m^2}{\rho} - k^2 \rho \right),$$

$$K_{1r}^{(m)}(\tau, t) = \frac{\partial^2 S_m}{\partial t \partial \tau} - k^2 (\rho'_0 \rho' S_+^{(m)} + z'_0 z' S_m) -$$

$$\frac{a_{1r}(\tau)}{(\tau-t)^2} - \frac{b_{1r}(\tau)}{(\tau-t)} - c_{1r}^{(m)}(\tau) \ln|\tau-t|$$

$$K_{1\varphi}^{(m)}(\tau, t) = -i \cdot m \frac{\partial S_m}{\partial \tau} + k^2 \rho'_0 \rho' S_-^{(m)} -$$

$$\frac{b_{1\varphi}^{(m)}(\tau)}{\tau-t} - c_{1\varphi}^{(m)}(y) \ln|\tau-t|$$

$$K_{2r}^{(m)}(\tau, t) = \frac{i \cdot m}{\rho} \frac{\partial S_m}{\partial t} - k^2 \rho'_0 S_-^{(m)} - \frac{b_{2r}^{(m)}(y)}{\tau-t}$$

$$- c_{2r}^{(m)}(y) \ln|\tau-t|$$

$$K_{2\varphi}^{(m)}(\tau, t) = \frac{m^2}{\rho} S_m - k^2 \rho'_0 S_+^{(m)} - c_{2\varphi}^{(m)}(\tau) \ln|\tau-t|,$$

Нехай $u_{n-2}^{(m)}(y)$, $f_{1,n-2}^{(m)}(y)$ - поліноми степені $n-2$, побудовані по корням полінома Чебишева другого роду:

$$U_{n-1}(t) = \sin(n \cdot \arccos(t)) / \sin(\arccos(t))$$

$$\{t_{0m}^n\}_{m=0}^{n-2} = \left\{ \cos \frac{m+1}{n} \pi \right\}_{m=0}^{n-2}$$

а $w_{n-1}^{(m)}(y)$, $f_{2,n-1}^{(m)}(y)$ - поліноми степені $n-1$, побудовані по корням полінома Чебишева першого роду:

$$T_n(t) = \cos(n \cdot \arccos(t))$$

$$\{t_m^n\}_{m=0}^{n-2} = \left\{ \cos \frac{2m+1}{2n} \pi \right\}_{m=0}^{n-1},$$

Разом з системою рівнянь (10) розглянемо її дискретну математичну модель:

$$\left(a_{1r} A + b_{1r} \Gamma^{-1} + c_{1r}^{(m)} L^I + K_{1r}^{(m)I} \right) u_{n-2}^{(m)}(\tau) +$$

$$+ \left(b_{1\varphi}^{(m)} \Gamma + c_{1\varphi}^{(m)} L^{II} + K_{1\varphi}^{(m)II} \right) w_{n-1}^{(m)}(\tau) = \frac{f_{1,n-2}^{(m)}(\tau)}{\pi} \quad (11)$$

$$\left(b_{2r}^{(m)} \Gamma^{-1} + c_{2r}^{(m)} L^I + K_{2r}^{(m)I} \right) u_{n-2}^{(m)}(\tau) +$$

$$+ \left(c_{2\varphi}^{(m)} L^{II} + K_{2\varphi}^{(m)II} \right) w_{n-1}^{(m)}(\tau) = \frac{f_{2,n-1}^{(m)}(\tau)}{\pi} \quad (12)$$

Скористаємося квадратурними формулами інтерполяційного типу, що описані в [6,7,9]. Квадратурна формула для гіперсингулярного інтеграла:

$$A u_{n-2}(t_{0l}^n) = \sum_{k=0}^{n-2} A_{l,k} u_{n-2}(t_{0k}^n)$$

$$A_{l,k} = \begin{cases} \frac{1}{n} \frac{(1-(-1)^{l+k})}{(t_{0l}^n - t_{0k}^n)^2} (1 - (t_{0k}^n)^2), & l \neq k, \\ -\frac{n}{2}, & l = k \end{cases} \quad (13)$$

Квадратурна формула для сингулярних інтегралів:

$$\Gamma^{-1} u_{n-2}(t_{0l}^n) = \sum_{k=0}^{n-2} \Gamma_{l,k}^{-1(I)} u_{n-2}(t_{0k}^n)$$

$$\Gamma_{l,k}^{-1(I)} = \begin{cases} \frac{1}{n} \frac{(1-(-1)^{l+k})}{t_{0l}^n - t_{0k}^n} (1 - (t_{0k}^n)^2), & l \neq k \\ 0, & l = k \end{cases} \quad (14)$$

$$\Gamma^{-1} u_{n-2}(t_l^n) = \sum_{m=0}^{n-2} \Gamma_{l,k}^{-1(II)} u_{n-2}(t_{0k}^n)$$

$$\Gamma_{l,k}^{-1(II)} = \frac{1}{n} \frac{1}{t_l^n - t_{0k}^n} (1 - (t_{0k}^n)^2) \quad (15)$$

$$\Gamma u_{n-2}(t_{0l}^n) = \sum_{k=0}^{n-2} \Gamma_{l,k} u_{n-2}(t_k^n), \quad \Gamma_{l,k} = \frac{1}{n} \frac{1}{t_{0l}^n - t_k^n} \quad (16)$$

Квадратурна формула для інтегралів з логарифмічним ядром:

$$L^I u_{n-2}(\tau) = \sum_{m=0}^{n-2} L_k^I(\tau) u_{n-2}(t_{0k}^n)$$

$$L_k^I(\tau) = \frac{-1}{n} (1 - (t_{0k}^n)^2) \quad (17)$$

$$\left[\ln 2 + 2 \sum_{p=1}^{n-1} \frac{T_p(t_{0k}^n)}{p} T_p(\tau) + \frac{(-1)^j}{n} T_n(\tau) \right]$$

$$L^{II} u_{n-2}(\tau) = \sum_{k=0}^{n-2} L_k^{II}(\tau) u_{n-2}(t_k^n)$$

$$L_k^{II}(\tau) = \frac{-1}{n} \left[\ln 2 + 2 \sum_{p=1}^{n-1} \frac{T_p(t_k^n)}{p} T_p(\tau) \right] \quad (18)$$

Квадратурна формула для інтегралів, ядра яких задовольняють умові Гельдера:

$$K^{(I)} u_{n-2}(\tau) = \sum_{k=0}^{n-2} K_k^{(I)}(\tau) u_{n-2}(t_{0k}^n) \quad (19)$$

$$K_k^{(I)}(\tau) = \frac{1}{n} K_{1r}(\tau, t_{0k}^n) (1 - (t_{0k}^n)^2)$$

$$K^{(II)} u_{n-2}(\tau) = \sum_{k=0}^{n-2} K_k^{(II)}(\tau) u_{n-2}(t_k^n) \quad (20)$$

$$K_k^{(II)}(\tau) = \frac{1}{n} K_{1r}(\tau, t_k^n)$$

Розглядаючи рівняння (11) у точках $\tau = t_{0k_1}^n$,
 $k_1 = 0, 1, \dots, n-2$ і рівняння (12) у точках $\tau = t_{12}^n$,
 $k_2 = 0, 1, \dots, n-1$, використавши квадратурні
формули інтерполяційного типу (13-20),
отримаємо систему лінійних алгебраїчних
рівнянь (СЛАР):

$$C^{(m)} x^{(m)} = b^{(m)} \quad (21)$$

де вектор невідомих:

$$x^{(m)} = \left(x^{(m)\tau}, x^{(m)\varphi} \right) =$$

$$= \left(\left\{ u_{n-2}^{(m)}(t_{0k_1}^n) \right\}_{k_1=0}^{n-2}, \left\{ w_{n-1}^{(m)}(t_{k_2}^n) \right\}_{k_2=0}^{n-1} \right)^T$$

права частина:

$$b^{(m)} = \left(\left\{ f_{1,n-2}^{(m)}(t_{0k_1}^n) \right\}_{k_1=0}^{n-2}, \left\{ f_{1,n-1}^{(m)}(t_{12}^n) \right\}_{k_2=0}^{n-1} \right)^T$$

і матриця $C^{(m)} = \begin{pmatrix} C^{(m)\tau\tau} & C^{(m)\tau\varphi} \\ C^{(m)\varphi\tau} & C^{(m)\varphi\varphi} \end{pmatrix}$,

де

$$C^{(m)\tau\tau} = \left\{ C_{k_1, k_1}^{(m)\tau\tau} \right\}_{k_1=0}^{n-2}, \text{ причому}$$

$$C_{k_1, k_1}^{(m)\tau\tau} = a_{1\tau}^{(m)}(t_{0k_1}^n) A_{k_1, k_1} + b_{1\tau}^{(m)}(t_{0k_1}^n) \Gamma_{k_1, k_1}^{-1(I)} +$$

$$+ c_{1\tau}^{(m)}(t_{0k_1}^n) L_{k_1}''(t_{0k_1}^n) + K_{k_1}^{(m)\tau\tau}(t_{0k_1}^n)$$

$$C^{(m)\tau\varphi} = \left\{ C_{k_1, k_2}^{(m)\tau\varphi} \right\}_{k_1=0, k_2=0}^{n-2, n-1}, \text{ причому:}$$

$$C_{k_1, k_2}^{(m)\tau\varphi} = b_{1\varphi}^{(m)}(t_{0k_1}^n) \Gamma_{k_1, k_2} + c_{1\varphi}^{(m)}(t_{0k_1}^n) L_{k_2}''(t_{0k_1}^n) +$$

$$+ K_{k_2}^{(m)\tau\varphi}(t_{0k_1}^n)$$

$$C^{(m)\varphi\tau} = \left\{ C_{k_2, k_1}^{(m)\varphi\tau} \right\}_{k_2=0, k_1=0}^{n-1, n-2}, \text{ причому:}$$

$$C_{k_2, k_1}^{(m)\varphi\tau} = b_{2\tau}^{(m)}(t_{12}^n) \Gamma_{k_2, k_1}^{-1(II)} +$$

$$+ c_{2\tau}^{(m)}(t_{12}^n) L_{k_1}'(t_{12}^n) + K_{k_1}^{(m)\varphi\tau}(t_{12}^n)$$

$$C^{(m)\varphi\varphi} = \left\{ C_{k_2, k_2}^{(m)\varphi\varphi} \right\}_{k_2=0}^{n-1}, \text{ причому:}$$

$$C_{k_2, k_2}^{(m)\varphi\varphi} = c_{1\varphi}^{(m)}(t_{12}^n) L_{k_2}''(t_{12}^n) + K_{k_2}^{(m)\varphi\varphi}(t_{12}^n)$$

Нехай $u_{n-2}^{(m)}(t)$ і $w_{n-1}^{(m)}(t)$ - поліноми степені $n-2$
і $n-1$ відповідно, причому

$$u_{n-2}^{(m)}(t_{0k_1}^n) = x_{k_1}^{(m)\tau}, \quad k_1 = 0, 1, \dots, n-2$$

$$w_{n-1}^{(m)}(t_{k_2}^n) = x_{k_2}^{(m)\varphi}, \quad k_2 = 0, 1, \dots, n-1,$$

де $x^{(m)} = (x^{(m)\tau}, x^{(m)\varphi})$ - рішення СЛАР (21).

Використовуючи техніку, описану в [6,7], можна
показати, що у випадку, коли
 $\rho_0(t), z_0(t), t \in [-1, 1]$ - поліноми, між

інтерполяційними поліномами $u_{n-2}^{(m)}(t)$, $w_{n-1}^{(m)}(t)$ і

рішенням інтегрального рівняння (10) існує
зв'язок:

$$\|u_{n-2}^{(m)} - u^{(m)}\|_{L^I} \leq c_1 / n^{1-\varepsilon} \quad (22)$$

$$\|w_{n-1}^{(m)} - w^{(m)}\|_{L^{II}} \leq c_2 / n^{1-\varepsilon}, \quad (23)$$

де

$c_1, c_2 > 0$ - константи, $\varepsilon > 0$ - як завгодно мале
число, L^I - гільбертів простір зі скалярним
добутком:

$$(u, v)_{L^I} = \int_{-1}^1 u(t) \overline{v(t)} \sqrt{1-t^2} dt +$$

$$+ \int_{-1}^1 \left(u(t) \sqrt{1-t^2} \right) \left(\overline{v(t)} \sqrt{1-t^2} \right) \sqrt{1-t^2} dt$$

L^{II} - гільбертів простір зі скалярним добутком:

$$(u, v)_{L^{II}} = \int_{-1}^1 u(t) \overline{v(t)} \sqrt{1-t^2} dt$$

Таким чином, збільшуючи кількість точок
розбиття, можна отримати функцію, як завгодно
близьку до рішень системи (10).

4. Вирази для напруженості електричного поля і діаграм спрямованості

Через рішення систем інтегральних рівнянь (10)
виражається поле електричної напруженості і
діаграми спрямованості:

$$E_v(\rho, z, \psi) = \sum_{m=0}^{\infty} E_v^{(m)}(\rho, z) e^{im\psi}, \quad v = \rho, \varphi, z$$

$$E_v^{(m)}(\rho, z) =$$

$$= \frac{i}{4k} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \left[\int_{-1}^1 Q_{v\tau}^{(m)}(\rho, z, t) u^{(m)}(t) \sqrt{1-t^2} dt + \right. \quad (24)$$

$$\left. + \int_{-1}^1 Q_{v\varphi}^{(m)}(\rho, z, t) \frac{w^{(m)}(t) dt}{\sqrt{1-t^2}} \right], \quad v = \rho, \varphi, z$$

$$Q_{v\tau}^{(m)}(\rho, z, t) = \frac{\partial^2 S_m}{\partial v \partial t} - k^2 \rho_0' S_m^*, \quad v = \rho, z$$

$$Q_{v\tau}^{(m)}(\rho, z, t) = \frac{im}{\rho} \frac{\partial S_m}{\partial t} - k^2 \rho_0' S_m^-$$

$$Q_{v\varphi}^{(m)}(\rho, z, t) = \rho_0 k^2 S_m^- - im \frac{\partial S_m}{\partial \rho}$$

$$Q_{z\varphi}^{(m)}(\rho, z, t) = (-im) \frac{\partial S_m}{\partial z}$$

$$Q_{\varphi\varphi}^{(m)}(\rho, z, t) = \frac{m^2}{\rho} S_m - k^2 \rho_0 S_m^*$$

Якщо ми позначимо:

$$F_\eta(\theta, \varphi) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{E_\eta(R, \theta, \varphi) R}{e^{-ikR}}, \quad \eta = \theta, \varphi,$$

і представимо $F_\eta(\theta, \varphi)$ у вигляді ряду Фур'є по азимутальній змінній:

$$F_\eta(\theta, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im\varphi} F_\eta^{(m)}(\theta), \quad \eta = \theta, \varphi,$$

тоді

$$\begin{aligned} F_\eta^{(m)}(\theta) = & \\ = \frac{i}{4k} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} & \left[\int_{-1}^1 u^{(m)}(t) U_{\eta r}^{(m)}(\theta, t) \sqrt{1-t^2} dt + \right. \\ & \left. + \int_{-1}^1 U_{\eta \varphi}^{(m)}(\theta, t) \frac{w^{(m)}(t) dt}{\sqrt{1-t^2}} \right], \quad \eta = \theta, \varphi \\ U_{\varphi r}^{(m)}(\theta, t) = & -k^2 \rho_0' \frac{f^{(m+1)} - f^{(m-1)}}{2i} \\ U_{\varphi \varphi}^{(m)}(\theta, t) = & -k^2 \rho_0' \frac{f^{(m+1)} + f^{(m-1)}}{2} \\ U_{\theta r}^{(m)}(\theta, t) = & k^2 \left[z_0' f^{(m)} \sin \theta - \rho_0' \frac{f^{(m+1)} + f^{(m-1)}}{2} \cos \theta \right] \\ U_{\theta \varphi}^{(m)}(\theta, t) = & k^2 \rho_0' \frac{f^{(m+1)} - f^{(m-1)}}{2i} \cos \theta \end{aligned} \quad (25)$$

Тут:

$$f^{(m)}(\theta, t) = i^m 2\pi e^{ik \cos(\theta) z_0} J_m(T), \quad T = k \rho_0 \sin \theta$$

За допомогою квадратурних формул (19), (20) знаходяться наближені значення гармонік полів (24)

$$\begin{aligned} E_v^{n(m)}(\rho, z) = & \\ = \frac{i}{4k} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} & \left[\sum_{k_1=0}^{n-2} Q_{v r}^{(m)}(\rho, z, t_{0k_1}^n) x_{k_1}^{(m)r} (1 - (t_{0k_1}^n)^2) + \right. \\ & \left. + \sum_{k_2=0}^{n-1} Q_{v \varphi}^{(m)}(\rho, z, t_{k_2}^n) x_{k_2}^{(m)\varphi} \right], \quad v = \rho, \varphi, z \end{aligned} \quad (26)$$

і гармонік діаграм спрямованості (25):

$$\begin{aligned} F_\eta^{n(m)}(\rho, z) = & \\ = \frac{i}{4k} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} & \left[\sum_{k_1=0}^{n-2} U_{\eta r}^{(m)}(\rho, z, t_{0k_1}^n) x_{k_1}^{(m)r} (1 - (t_{0k_1}^n)^2) + \right. \\ & \left. + \sum_{k_2=0}^{n-1} U_{\eta \varphi}^{(m)}(\rho, z, t_{k_2}^n) x_{k_2}^{(m)\varphi} \right], \quad \eta = \theta, \varphi \end{aligned} \quad (27)$$

Із оцінок (22), (23) та нерівності Коші-Буняковського випливає, що між наближеними значеннями гармонік полів (26) і гармонік діаграм спрямованості (27) та їх точними значеннями (24), (25) існує зв'язок:

$$\|E_v^{n(m)} - E_v^{(m)}\|_{l_2} \leq b_1 / n^{1-\varepsilon}, \quad v = \rho, \varphi, z$$

$$\|F_\eta^{n(m)} - F_\eta^{(m)}\|_{l_2} \leq b_2 / n^{1-\varepsilon}, \quad \eta = \theta, \varphi$$

де

$b_1, b_2 > 0$ - константи, $\varepsilon > 0$ - як завгодно мале число.

5. Результати чисельного експерименту для розімкненого сферичного екрана.

Розглянемо випадок, коли поверхня S - сферичний розімкнутий екран, на який падає плоска електромагнітна хвиля в напрямку орта осі x з вектором $\vec{E}^0(\vec{x})$, протилежно напрямленим до орта осі z (Рис.2):

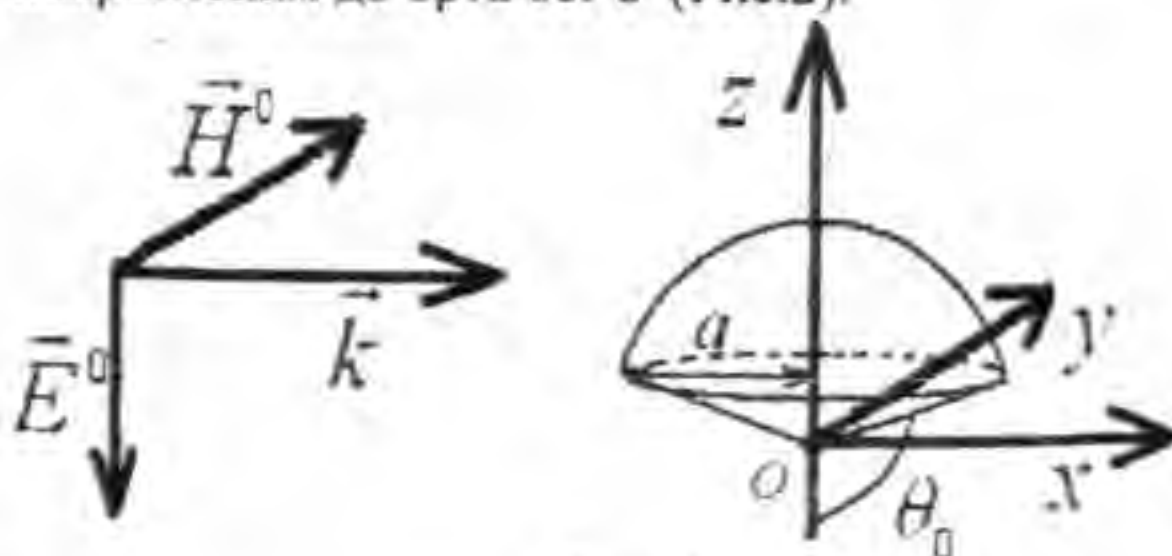


Рис. 2

На Рис.3 представлені графіки перетину

$$\text{зворотного розсіювання } \sigma_B = 4\pi \frac{|\vec{F}(\pi + \gamma, 0)|^2}{|\vec{E}^0(\pi + \gamma, 0)|^2} \text{ як}$$

функції від нормованого хвильового числа для $\theta_0 = \pi/3$ (графік I), $\theta_0 = \pi/2$ (графік II), $\theta_0 = 2\pi/3$ (графік III).

Ці графіки демонструють, що сферичний диск (сферичний розімкнутий екран), на відміну від диска, навіть у випадку ковзного падіння має значне зворотне розсіювання. Більш того, можна бачити, що сферичний диск має частоти резонансного розсіювання, коли зворотній перетин розсіювання може досягати значно більших (або менших) значень, ніж у інших точках.

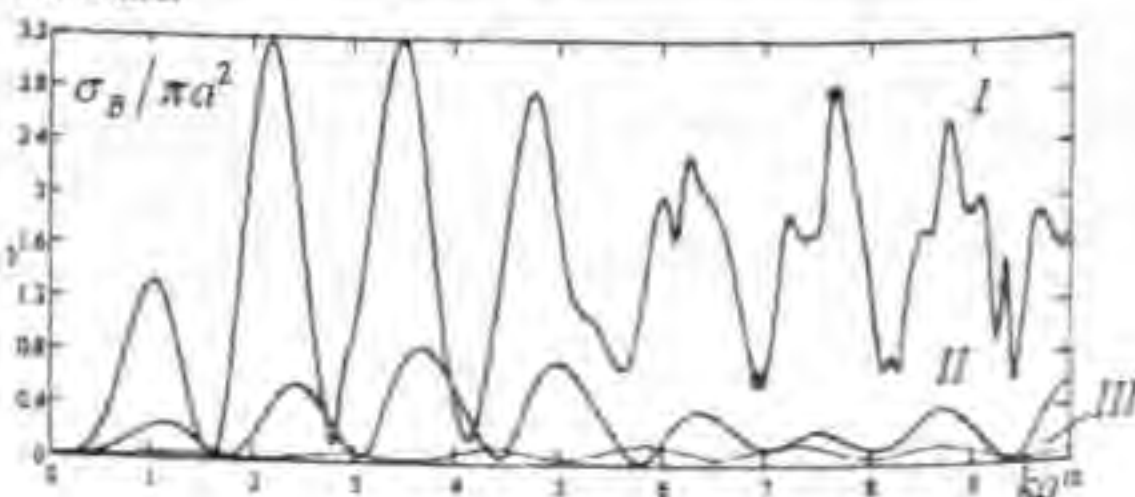


Рис 3

На Рис. 4-7 представлені діаграми спрямованості та поле у ближній зоні для зазначеного на рис. 3 резонансного значення: $ka = 7.65$, $\sigma_B = 2.812$, $\theta_0 = \pi/3$

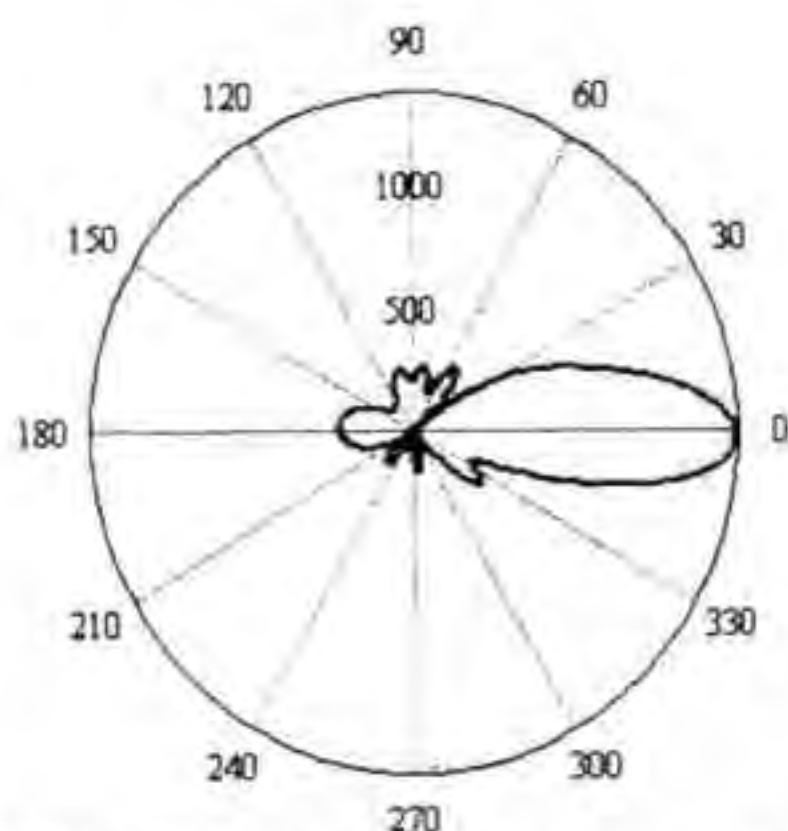


Рис. 4 Діаграма спрямованості в площині xOz
для $ka = 7.65$, $\sigma_B = 2.812$, $\theta_0 = \pi/3$

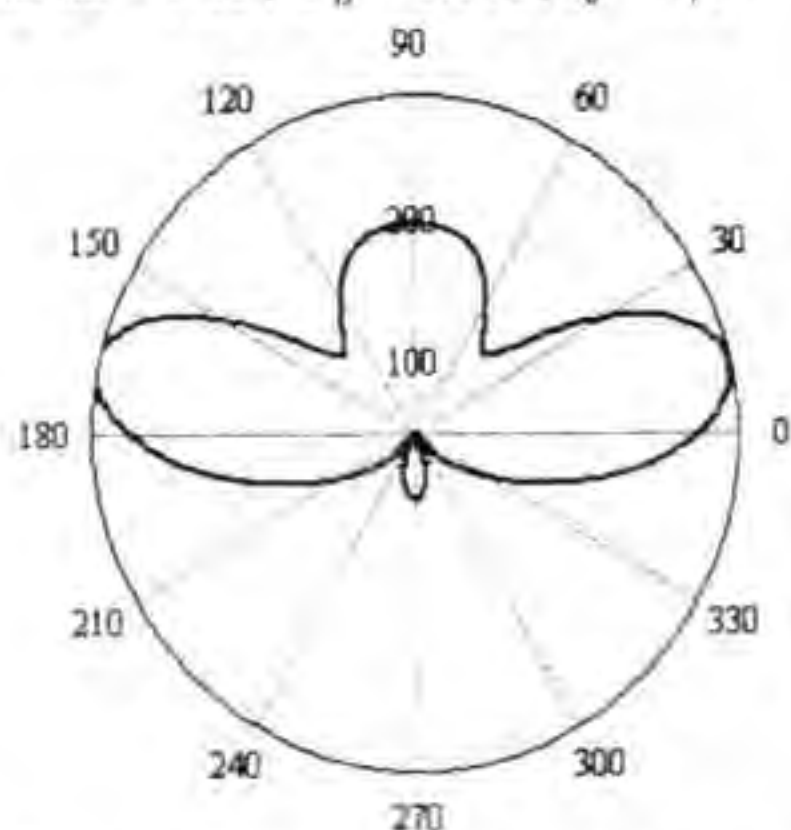


Рис. 5 Діаграма спрямованості в площині yOz
для $ka = 7.65$, $\sigma_B = 2.812$, $\theta_0 = \pi/3$

На Рис. 6 зображене поле у ближній зоні
відміченого на Рис. 3 резонансного значення
в площині xOz :

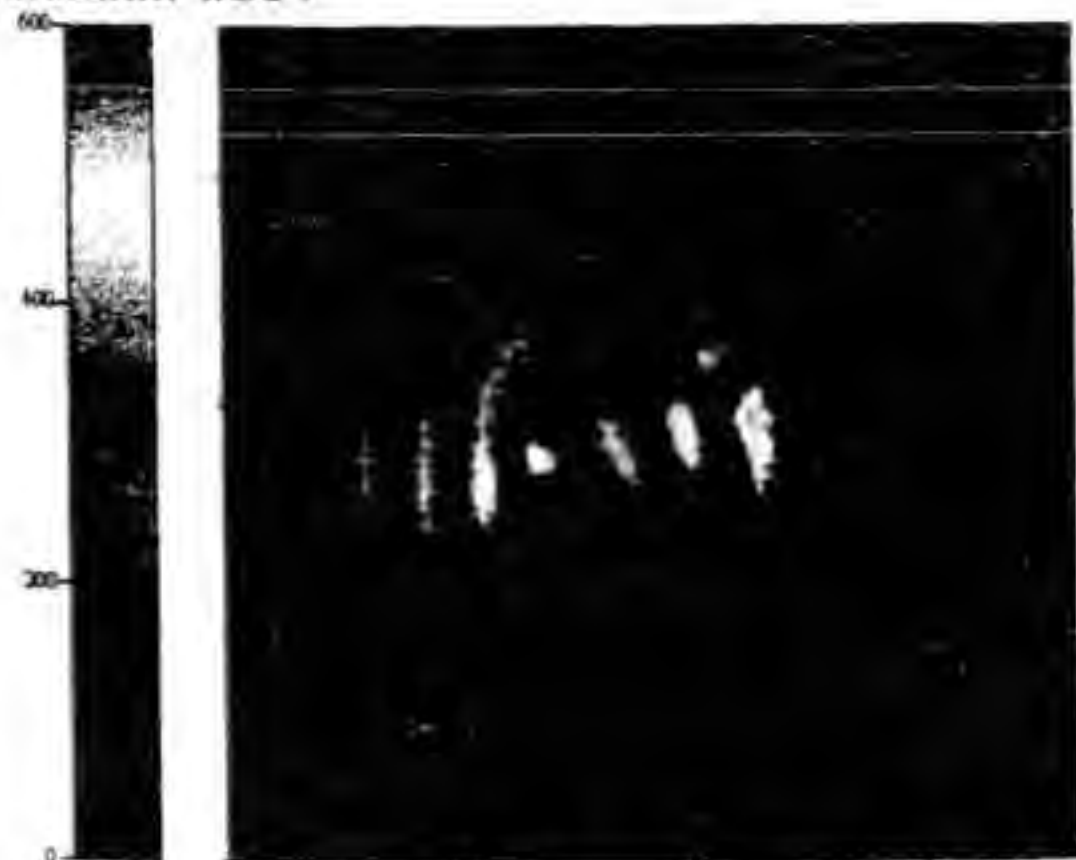


Рис. 6 Поле у ближній зоні в площині xOz
для $ka = 7.65$, $\sigma_B = 2.812$, $\theta_0 = \pi/3$

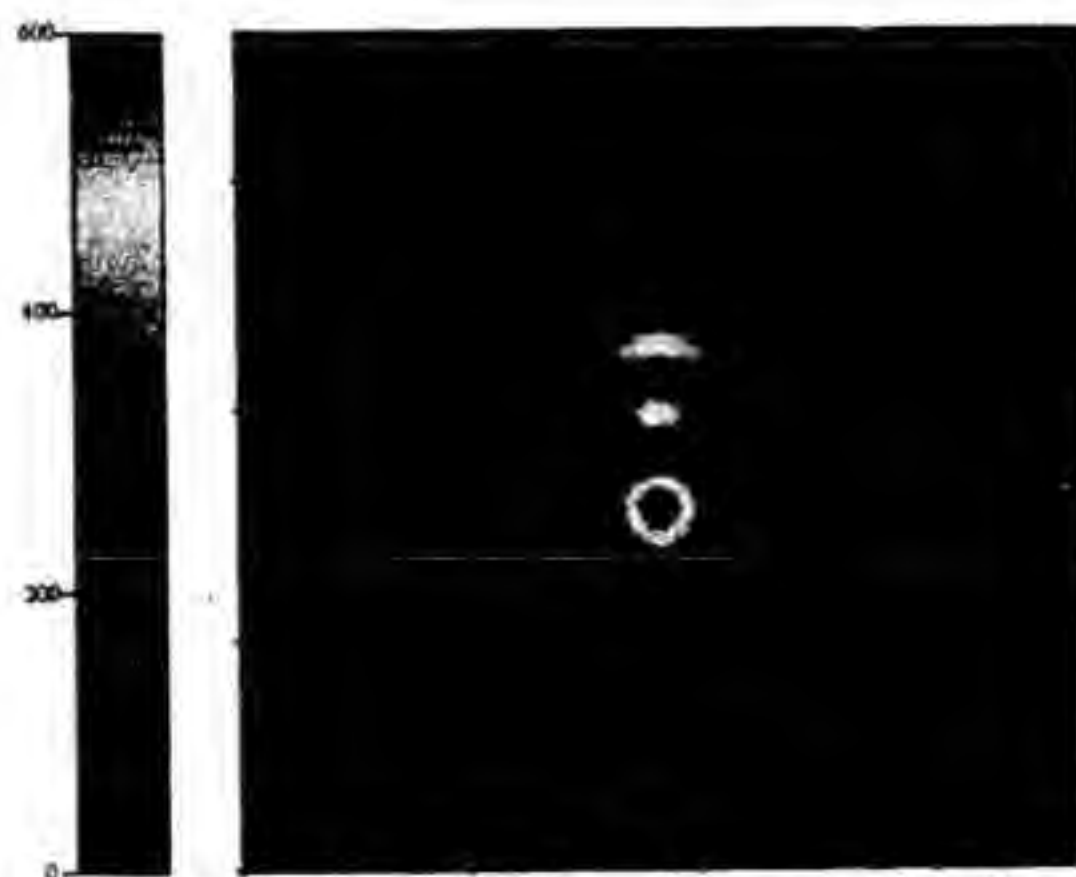


Рис. 7 Поле у ближній зоні в площині yOz
для $ka = 7.65$, $\sigma_B = 2.812$, $\theta_0 = \pi/3$

На Рис. 8-11 представлені діаграма
спрямованості та поле у ближній зоні для
зазначеного на рис. 3 резонансного
значення: $ka = 6.93$, $\sigma_B = 0.646$, $\theta_0 = \pi/3$

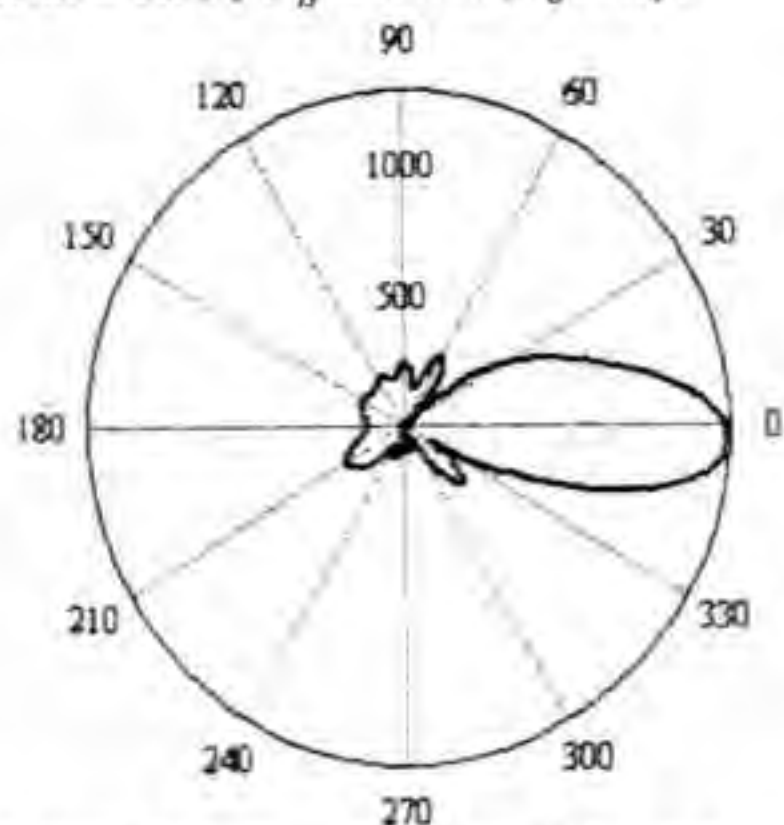


Рис. 8 Діаграма спрямованості в площині xOz
для $ka = 6.93$, $\sigma_B = 0.646$, $\theta_0 = \pi/3$

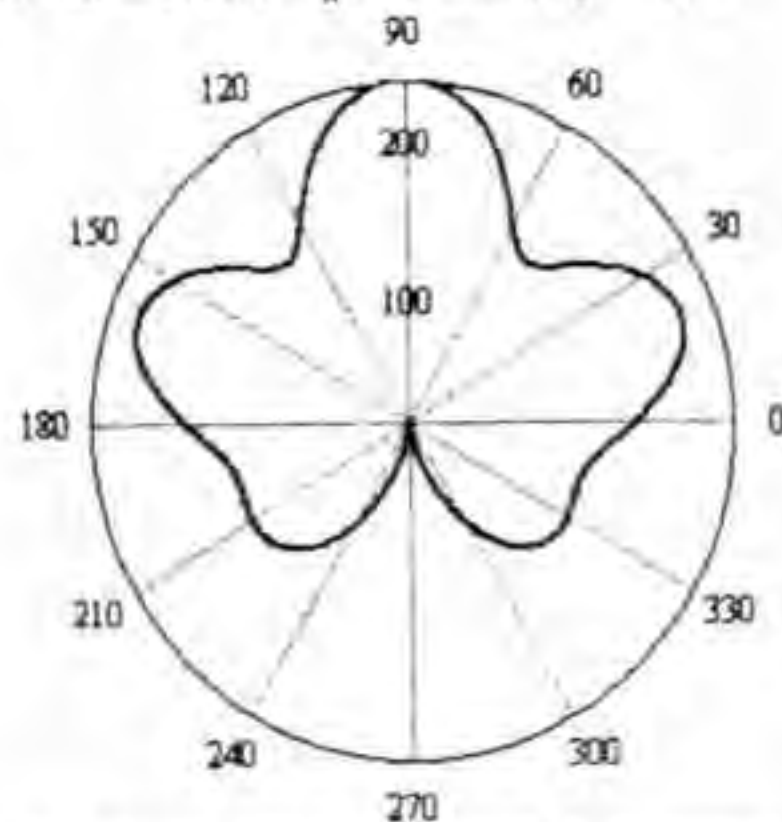


Рис. 9 Діаграма спрямованості в площині yOz
для $ka = 6.93$, $\sigma_B = 0.646$, $\theta_0 = \pi/3$

На Рис. 10 зображене поле у ближній зоні
відміченого на Рис. 3 резонансного значення
в площині xOz :



Рис. 10 Поле у ближній зоні в площині xOz
для $ka = 6.93$, $\sigma_B = 0.646$, $\theta_0 = \pi/3$



Рис. 11 Поле у ближній зоні в площині yOz
для $ka = 6.93$, $\sigma_B = 0.646$, $\theta_0 = \pi/3$

Список використаних джерел

1. H. Chou, P. H. Pathak, J. Burkholder "Novel Gaussian Beam method for Rapid Analysis of Large Reflector Antennas" IEEE transaction on antennas and propagation, Vol 49, No. 6, 2001, pp. 880-893
2. G. Morris "Coupling Between Closely Spaced Back-to-Back Paraboloidal Antennas", IEEE transaction on antennas and propagation, Vol, AP-28, No.1, 1980, pp. 60-64
3. Захаров Е. В., Пименов Ю. В. Численный анализ дифракции электромагнитных волн на идеально проводящих экранах. М.: Ротапринт ИРЭ АН СССР, 1984, 71 с.
4. Воронин В. В., Цехохо В. А. Интерполяционный метод решения интегрального уравнения первого рода с логарифмической особенностью. ДАН СССР, 1974, №6, т. 216, с. 1209-1211
5. S. S. Vinogradov "Reflectivity of spherical shield, pp 78 – 88, 1983
6. Гандель Ю.В. Введение в методы вычислений сингулярных и

гиперсингулярных интегралов.- Харьков-2001, 92 с.

7. Гандель Ю.В., Еременко С. В., Т. С. Полянская Математические вопросы метода дискретных токов. Обоснование численного метода дискретных особенностей решения двумерных задач дифракции электромагнитных волн: Учеб. пособие. Ч. 2 – Харьков: ХГУ, 1992. -145 с.
8. Булыгин В. С., "Задача дифракции электромагнитной волны на поверхности вращения" у збірнику наукових праць "Крайові задачі для диференціальних рівнянь" Чернівці, видавництво "Прут". С. 208 - 235
9. Гандель Ю. В., Кононенко А. С. Обоснование численного решения одного гиперсингулярного интегрального уравнения // Дифференц. уравнения. 2006. Т. 42. №8. С. 1-7
10. Ильинский А. С., Кравцов В. В., Свешников А. Г. Математические модели электродинамики. – М.: «Высшая школа», 1991, 224
11. Захаров Е. В. Численный анализ дифракции радиоволн.- М.: Радио и связь, 1982. - 184 с.
12. Жученко С. В. Численное моделирование осесимметричного решения задачи о дифракции электромагнитного поля в открытом гофрированном резонаторе // Электромагнитные явления.-2005.- Т.5, №1(14).-С.21-25
13. Гандель Ю. В., Полянская Т. С. Математические вопросы метода дискретных зарядов : Учеб. пособие. Ч. 1. – Харьков: ХГУ, 1991. – 65 с.
14. Назарчук З. Т. Численное исследование дифракции волн на цилиндрических структурах. – Киев: Наук. думка, 1989.- 256 с.
15. Лифанов И. К. Метод сингулярных интегральных уравнений и численный эксперимент. – М.: ТОО «Янус», 1995.-520 с.
16. Вайникко Г.М., Лифанов И.К., Полтавский Л.Н. Численные методы в гиперсингулярных интегральных уравнениях и их приложения. -М.: "Янус-К", 2001, С.508 с.

Подано до редакції 18.03.2010

УДК 519.876.5:624.131.542

Власюк* А.П., д.т.н., проф.,
Мартинюк* П.М., к.ф.-м.н., доц.

Математичне моделювання взаємних процесів фільтраційної консолідації тіла греблі та розмиву ґрунту в її основі в умовах тепло-солепереносу

Побудовано математичну модель фільтраційної консолідації тіла ґрунтової греблі з урахуванням можливості контактного розмиву ґрунту в її основі за наявності переносу солей в неізотермічних умовах. В області розмиву враховано рух суспензії. Числовий розв'язок відповідної двовимірної крайової задачі знайдено методом радіальних базисних функцій. Проведено ряд числових експериментів, які засвідчили залежність розмірів зони розмиву від урахування вищевказаних факторів.

Ключові слова: контактний розмив, фільтраційна консолідація, тепло-солеперенесення, метод радіальних базисних функцій.

*E-mail: Vlasyuk.rv@gmail.com, Martinyuk@ukr.net

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Вступ. В роботі [1] вказано, що на 2% великих ґрунтових гребель (висотою більше 15 метрів) траплялись інциденти, пов'язані з ерозією та утворенням зосереджених шляхів фільтрації (статистичні дані наведені до 1986-го року). При цьому половина з них пов'язані з фільтраційним руйнуванням тіла греблі, 40 % - основи греблі, 10% - з фільтрацією з тіла в основу греблі. Час від зафіксованого початку ерозії до руйнування греблі в 20% випадків становить менше 12-ти годин, а в 18% - менше 6-ти годин. Тобто, якщо процес руйнування розпочався, то його зупинити практично неможливо. А тому важливого значення набуває прогнозування, в тому числі, на основі математичного та комп'ютерного моделювання, для передбачення і недопущення критичних ситуацій при експлуатації гідротехнічних споруд.

В роботі [2] відмічається, що основними причинами аварій ґрунтових гребель з водоводами є виникнення контактної зосередженої фільтрації вздовж водоводу, що супроводжується розмивом ґрунту тіла та основи греблі, а також суфозія ґрунту тіла греблі при пошкодженні напірного водоводу.

Ризик фільтраційного руйнування підвищується, якщо гребля та її основа перебувають в стані фільтраційної консолідації.

A.P.Vlasyuk*, Doctor of technical sciences,
P. M. Martinyuk*, Candidate of physics and
mathematics sciences

The mathematical modeling of a soil dam filtration consolidation with taking into account soil wash-out below one, suspension flow and heat and salt transfer

The mathematical model of a soil dam filtration consolidation problem with taking into account soil wash-out below one and salt transfer in no isothermal conditions has been formulated. The suspension flow in the zone of erosion has been taken into account too. The numerical solution of the correspondent two-dimensional boundary-value problem has been found by the radial basis function method with discontinuous radial basis function. The numerical experiments have been lead. There has been shown that proposed method can be effective one.

Key Words: filtration erosion; filtration consolidation; heat and mass transfer; radial basis function method.

Цей процес супроводжується підвищеними напорами в порах ґрунту, що збільшує швидкість руху порової рідини.

В роботі [3] досліджено питання фільтраційної консолідації ґрунтових гребель в умовах тепло-масопереносу.

В роботах [4, 5] побудовано математичні моделі фільтраційного розмиву вздовж межі контакту піщаної основи та глинистого тіла греблі. Однак, в даних роботах не враховано залежності параметрів фільтрації від фізико-хімічного стану ґрунтового середовища. Крім того, досліджувані процеси вважались стаціонарними.

Тому, метою даної статті є урахування взаємних процесів фільтраційної консолідації, контактного розмиву, а також залежності параметрів фільтрації від теплового та сольового режимів порової рідини.

Математичні моделі контактного розмиву, фільтраційної консолідації та тепло-масопереносу були розвинуті та досліджені в роботах [6-8]. Однак, складність і відмінність розглядуваної задачі полягає в тому, що тіло греблі та її основа можуть складатись з ґрунтів різних типів. Крім того, виникає потреба у визначенні положення не лише межі області розмиву, а і депресійної кривої.

1. Постановка задачі та її математична модель. Нехай тіло ґрунтової греблі (область Ω_3 на рис. 1) та її основа (область Ω_1) під впливом власної ваги ґрунту знаходяться в стані фільтраційної консолідації. Область Ω_2 , яку займає суспензія, утворюється в результаті контактного розмиву ґрунту основи греблі вздовж межі E_1E_2 .

Математичну модель двовимірної задачі фільтраційної консолідації тіла греблі та її основи з урахуванням перенесення солей в неізотермічному режимі та руху суспензії в області контактної розмиву можна описати наступною крайовою задачею [6-8]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{(1+e)(1+\xi)}{2\gamma a} \nabla \cdot (\mathbf{K}_h(c, T) \nabla h - \mathbf{K}_c(c, T) \nabla c - \mathbf{K}_T(c, T) \nabla T), \quad X \in \Omega_1 \cup \Omega_3, t > 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla u_1 = \nu \Delta u_1 - g \frac{\partial h}{\partial x}, \quad X \in \Omega_2, t > 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla u_2 = \nu \Delta u_2 - g \frac{\partial h}{\partial y}, \quad X \in \Omega_2, t > 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} = 0, \quad X \in \Omega_2, \quad (4)$$

$$n \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_c(c, T) \nabla c + \mathbf{D}_T(c, T) \nabla T) - \mathbf{u} \nabla c - \gamma_m(c - C_m), \quad X \in \Omega, t > 0, \quad (5)$$

$$c_T \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda(c, T) \nabla T) - \rho c_p \mathbf{u} \nabla T, \quad X \in \Omega, t > 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_s \nabla s) - (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \nabla s, \quad X \in \Omega_2, t > 0, \quad (7)$$

$$(\mathbf{q}_c, \mathbf{n})|_{AHK \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2} = 0, \quad c|_{AE_1 \cup \Gamma_1 \cup E_2 \cup \Gamma} = C_1(X, t), \quad (8)$$

$$(\mathbf{q}_T, \mathbf{n})|_{ABFD} = 0, \quad T|_{AE_1 \cup \Gamma} = T_1(X, t), \quad (9)$$

$$(\mathbf{u}, \mathbf{n})|_{ABFD} = 0, \quad (\mathbf{u}, \mathbf{n})|_{\Gamma_1} = 0, \quad h|_{AE_1 \cup \Gamma} = H_1(X, t), \quad (10)$$

$$h|_{G_2 \cup \Gamma_2} = H_2(X, t), \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial u_2}{\partial y} \right|_{E_2 G_2} = 0, \quad u_1|_{E_2 G_2} = 0, \quad h|_{E_2 G_2} = H_2(X, t), \quad (12)$$

$$(\mathbf{q}_s, \mathbf{n})|_{G_1 E_2} = 0, \quad s|_{E_2 G_2} = 0, \quad (13)$$

$$(\mathbf{q}_s, \mathbf{n})|_{\Gamma_{12}} = -(1-n)\dot{\Gamma}_{12}, \quad (14)$$

$$[h]|_{\Gamma_2} = 0, \quad \left[\frac{\partial h}{\partial n} \right]_{\Gamma_{12} \cup \Gamma_{23}} = 0, \quad [\mathbf{u}]|_{\Gamma_2} = 0, \quad (15)$$

$$[c]|_{\Gamma_2} = 0, \quad [\mathbf{q}_c]|_{\Gamma_2} = 0, \quad (16)$$

$$[T]|_{\Gamma_2} = 0, \quad [\mathbf{q}_T]|_{\Gamma_2} = 0, \quad (17)$$

$$h|_{\Gamma} = -y, \quad (\mathbf{u}, \mathbf{n})|_{\Gamma} = -n\dot{\phi}(t), \quad X \in \Gamma, \quad (18)$$

$$s(X, t)((\mathbf{v}, \mathbf{n}) + |(\mathbf{v}, \mathbf{d})|) = -(1-n)\rho_T \dot{\Gamma}_{12}, \quad X \in \Gamma_{12}, \quad (19)$$

$$\mathbf{u} = e\mathbf{v} - \mathbf{K}_h(c, T) \nabla h + \mathbf{K}_c(c, T) \nabla c + \mathbf{K}_T(c, T) \nabla T, \quad X \in \Omega_1 \cup \Omega_3, \quad (20)$$

$$\mathbf{q}_c = \mathbf{u}c - \mathbf{D}_c(c, T) \nabla c - \mathbf{D}_T(c, T) \nabla T, \quad X \in \Omega, \quad (21)$$

$$\mathbf{q}_T = \rho c_p \mathbf{u} T - \lambda(c, T) \nabla T, \quad X \in \Omega, \quad (22)$$

$$\mathbf{q}_s = (\mathbf{u} - \mathbf{w})s - \mathbf{D}_s \nabla s, \quad X \in \Omega_2, \quad (23)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{F}(X, t, \mathbf{u}), \quad X \in \Gamma_{12}, \quad (24)$$

$$h(X, 0) = h_0(X), \quad X \in \bar{\Omega}_1 \cup \bar{\Omega}_3, \quad (25)$$

$$\mathbf{u}(X, 0) = \mathbf{u}_0(X), \quad s(X, 0) = s_0(X), \quad X \in \bar{\Omega}_2, \quad (26)$$

$$c(X, 0) = c_0(X), \quad T(X, 0) = T_0(X), \quad X \in \bar{\Omega}. \quad (27)$$

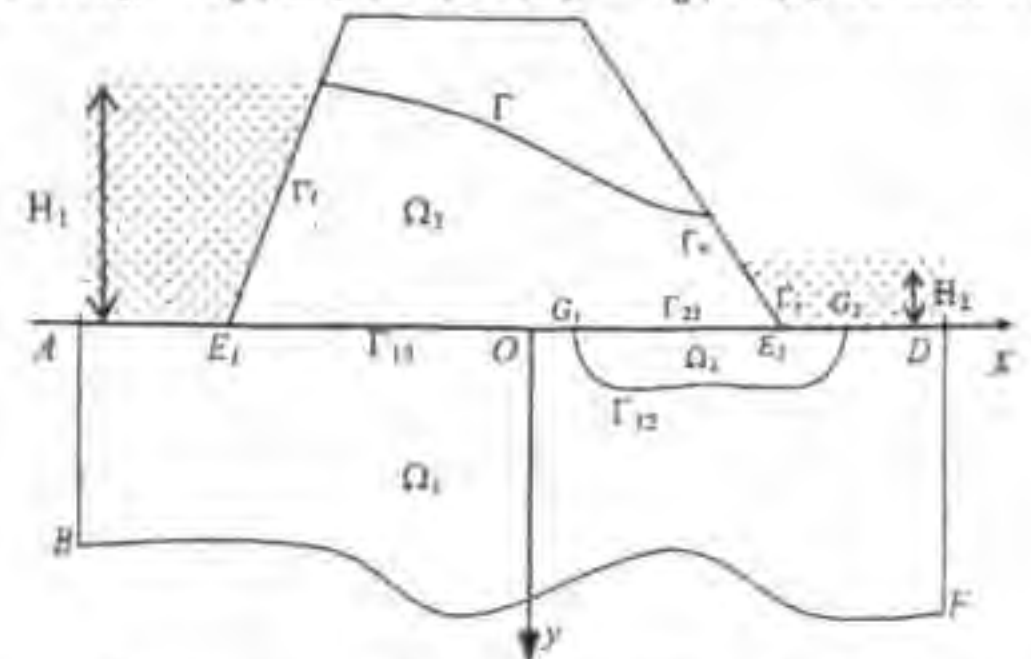


Рис. 1. Фільтраційна консолідація та контактний розмив ґрунту в основі греблі

Рівняння (1) описує процеси фільтраційної консолідації тіла ґрунтової греблі та масиву ґрунту в її основі. Рівняння (2)-(4) є системою рівнянь Нав'є-Стокса і описують процес руху суспензії в зоні розмиву Ω_2 [9]. Рівняння (5), (6) описують сольовий та тепловий режим ґрунту і суспензії в зоні розмиву. При цьому в зоні розмиву пористість $n=1$. Рівняння (7) описує зміну концентрації суспензії в зоні розмиву Ω_2 [10]. Припускається, що на межах контакту Γ_{12} , Γ_{13} , Γ_{23} областей Ω_1 , Ω_2 та Ω_3 виконуються умови спряження ідеального контакту (13)-(15) [11]. Функція $\mathbf{v} = \mathbf{F}(x, y, t, \mathbf{u})$ пов'язує вектор швидкості фільтрації $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ та вектор швидкості руху твердих частинок ґрунту $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ на рухомій межі Γ_{12} . Залежність $\phi(X, t) = h(X, t) + y$ задає рівняння вільної поверхні Γ [11]. Тут: $h(x, y, t)$ - напір; $c(x, y, t)$ - масова концентрація солей в поровій рідині; $T(x, y, t)$ - температура; $s(x, y, t)$ - об'ємна концентрація суспензії в області розмиву; e - коефіцієнт пористості ґрунту; ρ_T - густина твердих частинок ґрунту; γ - питома вага порової рідини; a - коефіцієнт стискуваності

грунту; ξ - коефіцієнт бічного тиску ґрунту; ν - кінематична в'язкість суспензії; g - прискорення вільного падіння; c_T - об'ємна теплоємність; c_p - питома теплоємність порового розчину; K_h - тензор коефіцієнтів фільтрації; K_c , K_T - тензори коефіцієнтів хімічного та термічного осмосів; D_c , D_T - тензори коефіцієнтів конвективної дифузії та термодифузії; D_s - тензор коефіцієнтів дисперсії суспензії; λ - тензор коефіцієнтів теплопровідності; $\mathbf{n}$ - вектор напрямних косинусів зовнішньої нормалі; $\mathbf{d}$ - вектор напрямних косинусів дотичної; $\mathbf{w} = (0; w_2)$ - вектор швидкості осідання твердих частинок суспензії; $X = (x, y)$; $\Gamma_z = \Gamma_{12} \cup \Gamma_{13} \cup \Gamma_{23}$; $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_r \cup \Gamma_v \cup \Gamma$; $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$.

Зрозуміло, що значення всіх вищенаведених коефіцієнтів залежать від того, в якій області досліджується процес. Для уникнення зайвої індексації та громіздкості, ми не будемо даний аспект відображати у формулах, але будемо мати його на увазі.

Умова (17) задає кінематичну граничну умову на межі Γ_{12} можливого контактного розриву [6]. Третя з умов спряження (13) пов'язує між собою швидкості руху рідини на межі Γ . Тому замість вектора $\mathbf{u}$ з боку областей Ω_1 та Ω_3 потрібно брати вектор $\mathbf{u}/n$.

Аналогічно [9], з (2)-(4) отримуємо

$$\Delta h(X, t) = \frac{2}{g} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial u_2}{\partial y} - \frac{\partial u_1}{\partial y} \frac{\partial u_2}{\partial x} \right), \quad X \in \Omega_2, \quad t > 0. \quad (4')$$

2. Чисельне розв'язання методом РБФ.

Покриємо замикання областей $\overline{\Omega_j}$, $j = \overline{1, 3}$,

вузловими точками $X_i = (x_i, y_i)$, $i = \overline{1, N_j}$.

Вимагаємо, що на межах Γ_{12} , Γ_{13} , Γ_{23} координати відповідних вузлів в областях співпадають. Нехай ω_j - множини номерів вузлів, які належать областям Ω_j відповідно,

$j = \overline{1, 3}$. Замикання $\overline{\omega_j}$ будуть містити рівно N_j

вузлів і складатися із самих множин ω_j , $j = \overline{1, 3}$,

та наступних множин: ω_1^{AB1} , ω_1^{G2D} , ω_1^q , ω_1^{f12} ,

ω_1^{f13} , ω_2^{E2G2} , ω_2^{f12} , ω_2^{f23} , ω_2^{f1} , $\omega_2^{f_r}$, $\omega_2^{f_v}$, ω_2^f ,

ω_2^{f11} , ω_2^{f23} - множини номерів вузлів, які

належать відповідним частинам межі. Тут $q = ABFD$.

Наближений розв'язок задачі (1)-(25), в якій рівняння (4) замінено на (4'), методом РБФ шукаємо у вигляді

$$T(X, t) \approx \sum_{j=1}^{N_k} a_{j, k-1}^{k-1}(t) \varphi_j(r_j, \varepsilon), \quad X \in \overline{\Omega_k}, \quad k = \overline{1, 3};$$

$$c(X, t) \approx \sum_{j=1}^{N_k} b_{j, k-1}^{k-1}(t) \varphi_j(r_j, \varepsilon), \quad X \in \overline{\Omega_k}, \quad k = \overline{1, 3};$$

$$h(X, t) \approx \sum_{j=1}^{N_k} c_{j, k-1}^{k-1}(t) \varphi_j(r_j, \varepsilon), \quad X \in \overline{\Omega_k}, \quad k = \overline{1, 3};$$

$$u_1(X, t) \approx \sum_{j=1}^{N_2} p_j(t) \varphi_j(r_j, \varepsilon), \quad u_2(X, t) \approx \sum_{j=1}^{N_2} q_j(t) \varphi_j(r_j, \varepsilon),$$

$$s(X, t) \approx \sum_{j=1}^{N_2} s_j(t) \varphi_j(r_j, \varepsilon), \quad X \in \overline{\Omega_2},$$

де $a_j(t)$, $b_j(t)$, $c_j(t)$, $j = \overline{1, \sum_{i=1}^3 N_i}$; $p_j(t)$, $q_j(t)$,

$s_j(t)$, $j = \overline{1, N_2}$, - деякі невідомі коефіцієнти;

$\varphi(r_j, \varepsilon)$ - деякі розривні РБФ,

$$r_j = |X - X_j| = \sqrt{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2}.$$

Тоді, з рівнянь (1)-(3), (4'), (5)-(7), умов (8)-(15), (23)-(25), отримаємо наступну задачу Коші для системи нелінійних диференціальних рівнянь відносно векторів невідомих $\mathbf{A}(t) = \{a_i(t)\}_{i=1}^N$,

$$\mathbf{B}(t) = \{b_i(t)\}_{i=1}^N, \quad \mathbf{C}(t) = \{c_i(t)\}_{i=1}^N,$$

$$\mathbf{P}(t) = \{p_i(t)\}_{i=1}^{N_2}, \quad \mathbf{Q}(t) = \{q_i(t)\}_{i=1}^{N_2}, \quad \mathbf{S}(t) = \{s_i(t)\}_{i=1}^{N_2};$$

$$\mathbf{M}^{(6)} \cdot \dot{\mathbf{A}}(t) + \mathbf{L}^{(6)} \cdot \mathbf{A}(t) = \mathbf{F}^{(6)}, \quad (26)$$

$$\mathbf{M}^{(3)} \cdot \dot{\mathbf{B}}(t) + \mathbf{L}^{(3)} \cdot \mathbf{B}(t) = \mathbf{G}^{(3)} \cdot \mathbf{A}(t) + \mathbf{F}^{(3)}, \quad (27)$$

$$\mathbf{M}^{(4)} \cdot \dot{\mathbf{C}}(t) + \mathbf{L}^{(4)} \cdot \mathbf{C}(t) =$$

$$= \mathbf{G}^{(4)} \cdot \mathbf{B}(t) + \mathbf{G}^{(12)} \cdot \mathbf{A}(t) + \mathbf{F}^{(12)}, \quad (28)$$

$$\mathbf{M}^{(1)} \cdot \dot{\mathbf{P}}(t) + \mathbf{L}^{(1)} \cdot \mathbf{P}(t) = \mathbf{G}^{(1)} \cdot \mathbf{C}(t) + \mathbf{F}^{(1)}, \quad (29)$$

$$\mathbf{M}^{(2)} \cdot \dot{\mathbf{Q}}(t) + \mathbf{L}^{(2)} \cdot \mathbf{Q}(t) = \mathbf{G}^{(2)} \cdot \mathbf{C}(t) + \mathbf{F}^{(2)}, \quad (30)$$

$$\mathbf{M}^{(1)} \cdot \dot{\mathbf{S}}(t) + \mathbf{L}^{(1)} \cdot \mathbf{S}(t) = \mathbf{F}^{(1)}, \quad (31)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}^{(6)} \cdot \mathbf{A}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(6)}, \quad \tilde{\mathbf{M}}^{(5)} \cdot \mathbf{B}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(5)}, \quad \tilde{\mathbf{M}}^{(4)} \cdot \mathbf{C}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(4)},$$

$$\tilde{\mathbf{M}}^{(3)} \cdot \mathbf{P}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(3)}, \quad \tilde{\mathbf{M}}^{(2)} \cdot \mathbf{Q}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(2)}, \quad \tilde{\mathbf{M}}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(0)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(1)}, \quad (32)$$

$$\text{де } \mathbf{A}^{(0)} = \{a_i(0)\}_{i=1}^N, \quad \mathbf{B}^{(0)} = \{b_i(0)\}_{i=1}^N,$$

$$\mathbf{C}^{(0)} = \{c_i(0)\}_{i=1}^N, \quad \mathbf{P}^{(0)} = \{p_i(0)\}_{i=1}^{N_2}, \quad \mathbf{Q}^{(0)} = \{q_i(0)\}_{i=1}^{N_2},$$

$$\mathbf{S}^{(0)} = \{s_i(0)\}_{i=1}^{N_2}; \quad \mathbf{M}^{(k)} = \{m_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^N, \quad \mathbf{L}^{(k)} = \{l_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^N,$$

$$\mathbf{F}^{(k)} = \{f_i^{(k)}\}_{i=1}^N, \quad k = 4, 5, 6; \quad \tilde{\mathbf{M}}^{(k)} = \{\tilde{m}_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^N,$$

$$\tilde{\mathbf{F}}^{(k)} = \{\tilde{f}_i^{(k)}\}_{i=1}^N, \quad k = 5, 6; \quad \mathbf{G}^{(k)} = \{g_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^{N_2, N},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{(k)} &= \{m_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^{N_2}, \quad \mathbf{L}^{(k)} = \{l_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^{N_2}, \quad \mathbf{F}^{(k)} = \{f_i^{(k)}\}_{i=1}^{N_2}, \\ \bar{\mathbf{M}}^{(k)} &= \{\bar{m}_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^{N_2}, \quad \bar{\mathbf{F}}^{(k)} = \{\bar{f}_i^{(k)}\}_{i=1}^{N_2}, \quad k=1,2,3; \\ \mathbf{G}^{(k)} &= \{g_{ij}^{(k)}\}_{i,j=1}^N, \quad k=4,5; \quad \mathbf{G}^{(4)} = \{g_{ij}^{(4)}\}_{i,j=1}^N, \\ \bar{\mathbf{M}}^{(4)} &= \{\bar{m}_{ij}^{(4)}\}_{i,j=1}^{N_1}, \quad \bar{\mathbf{F}}^{(4)} = \{\bar{f}_i^{(4)}\}_{i=1}^{N_1}; \quad m_{ij}^{(6)} = c_T \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \\ m_{ij}^{(5)} &= n \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \quad i \in \bigcup_{m=1}^3 \omega_m, \quad j \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m; \\ m_{ij}^{(4)} &= \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \quad i \in \omega_1 \cup \omega_3, \quad j \in \bar{\omega}_1 \cup \bar{\omega}_3; \\ \bar{m}_{ij}^{(k)} &= \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \quad i \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m, \quad j \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m, \quad k=5,6; \\ \bar{m}_{ij}^{(4)} &= \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \quad i \in \bar{\omega}_1 \cup \bar{\omega}_3, \quad j \in \bar{\omega}_1 \cup \bar{\omega}_3; \\ \bar{f}_i^{(7)} &= h_0(X_i), \quad i \in \bar{\omega}_1 \cup \bar{\omega}_3; \quad \bar{f}_i^{(5)} = c_0(X_i), \\ \bar{f}_i^{(6)} &= T_0(X_i), \quad i \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m; \quad m_{ij}^{(k)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \quad i \in \omega_2; \\ \bar{m}_{ij}^{(k)} &= \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \quad i \in \bar{\omega}_2, \quad j \in \bar{\omega}_2, \quad k=1,2,3; \\ \bar{f}_i^{(3)} &= (u_1)_0(X_i), \quad \bar{f}_i^{(2)} = (u_2)_0(X_i), \quad \bar{f}_i^{(1)} = s_0(X_i), \\ i \in \bar{\omega}_2; \quad r_{ij} &= |X_j - X_i|; \quad N = \sum_{m=1}^3 N_m. \end{aligned}$$

Спеціального визначення потребують елементи матриць $\mathbf{L}^{(k)}$, $k=1,6$; $\mathbf{G}^{(k)}$, $k=2,5$; $\mathbf{G}^{(4)}$ та вектор-стовпців $\mathbf{F}^{(k)}$, $k=1,6$. Так, $l_{ij}^{(6)} = -\nabla \cdot (\lambda \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)) + \rho c_p \mathbf{u} \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$ при $i \in \bigcup_{m=1}^3 \omega_m$, $j \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m$. Якщо $i \in \omega_1^{AEI} \cup \omega_1^{G_2D} \cup \omega_2^{E_2G_2} \cup \omega_3^r$, то $l_{ij}^{(6)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $j \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m$. У випадку $i \in \omega_1^q$ маємо $l_{ij}^{(6)} = (-\lambda \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \mathbf{n})$, $j \in \bar{\omega}_1$. Для елементів вектор-стовпця $\mathbf{F}^{(6)}$ маємо $f_i^{(6)} = T_1$, $i \in \omega_1^{AEI} \cup \omega_1^{G_2D} \cup \omega_2^{E_2G_2} \cup \omega_3^r$.

При $i \in \bigcup_{m=1}^3 \omega_m$, $j \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m$ маємо $l_{ij}^{(3)} = -\nabla \cdot (\mathbf{D}_e \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)) + \mathbf{u} \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon) + \gamma_m \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $g_{ij}^{(3)} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_T \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon))$. Якщо $i \in \omega_1^{AEI} \cup \omega_1^{G_2D} \cup \omega_2^{E_2G_2} \cup \omega_3^r$, то $l_{ij}^{(3)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $j \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m$.

У випадку $i \in \omega_1^q \cup \omega_3^r \cup \omega_3^{r_1}$ маємо $l_{ij}^{(3)} = (-\mathbf{D}_e \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \mathbf{n})$, $j \in \bar{\omega}_1 \cup \bar{\omega}_3$. Для

елементів вектор-стовпця $\mathbf{F}^{(5)}$ маємо наступні значення:

$$f_i^{(5)} = C_m, \quad i \in \omega_1^{AEI} \cup \omega_3^{r_1}; \quad f_i^{(5)} = C_1, \quad i \in \omega_1^{G_2D} \cup \omega_2^{E_2G_2} \cup \omega_3^{r_1}; \quad f_i^{(5)} = \gamma_m C_m, \quad i \in \bigcup_{m=1}^3 \bar{\omega}_m.$$

При $i \in \omega_1 \cup \omega_3$, $j \in \bar{\omega}_1 \cup \bar{\omega}_3$ маємо $l_{ij}^{(4)} = \beta \nabla \cdot (\mathbf{K}_b \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon))$, $g_{ij}^{(4)} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_c \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon))$, $g_{ij}'^{(4)} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_T \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon))$, де $\beta = \frac{(1+\varepsilon)(1+\xi)}{2\gamma_0}$.

При $i \in \omega_2$, $j \in \bar{\omega}_2$ $l_{ij}^{(4)} = \Delta \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$. Якщо $i \in \omega_1^{AEI} \cup \omega_1^{G_2D}$, то $l_{ij}^{(4)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $j \in \bar{\omega}_1$. У випадку $i \in \omega_1^q$ маємо $l_{ij}^{(4)} = (-\mathbf{K}_b \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \mathbf{n})$, $j \in \bar{\omega}_1$. Якщо $i \in \omega_2^{E_2G_2}$ то $l_{ij}^{(4)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $j \in \bar{\omega}_2$. Якщо $i \in \omega_3^{r_1} \cup \omega_3^{r_2}$, то $l_{ij}^{(4)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $j \in \bar{\omega}_3$. Для елементів вектор-стовпця $\mathbf{F}^{(4)}$ маємо наступні значення:

$$\begin{aligned} f_i^{(4)} &= H_1, \quad i \in \omega_1^{AEI}; \quad f_i^{(4)} = H_2, \quad i \in \omega_1^{G_2D}; \\ f_i^{(4)} &= H_2, \quad i \in \omega_2^{E_2G_2}; \\ f_i^{(4)} &= \frac{2}{g} \left(\frac{\partial u_1}{\partial y} \frac{\partial u_2}{\partial x} - \frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial u_2}{\partial y} \right) \Big|_{X_i}, \quad i \in \omega_2; \\ f_i^{(4)} &= H_1, \quad i \in \omega_3^{r_1}; \quad f_i^{(4)} = H_2, \quad i \in \omega_3^{r_2}. \end{aligned}$$

При $i \in \omega_2$, $j \in \bar{\omega}_2$ маємо $l_{ij}^{(k)} = -\nu \Delta \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon) + \mathbf{u} \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $k=2,3$; $g_{ij}^{(3)} = -g \frac{\partial \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)}{\partial x}$, $g_{ij}^{(2)} = -g \frac{\partial \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)}{\partial y}$. При $i \in \omega_2^{E_2G_2}$: $l_{ij}^{(3)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $l_{ij}^{(2)} = \frac{\partial \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)}{\partial y}$, $j \in \bar{\omega}_2$.

При $i \in \omega_2$, $j \in \bar{\omega}_2$ маємо $l_{ij}^{(1)} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_s \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)) - (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$. Якщо $i \in \omega_2^{E_2G_2}$, то $l_{ij}^{(1)} = \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon)$, $j \in \bar{\omega}_2$. Якщо $i \in \omega_2^{G_1E_2} \cup \omega_2^{r_{12}}$, то $l_{ij}^{(1)} = (\mathbf{u} - \mathbf{w}, \mathbf{n}) \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon) - (\mathbf{D}_s \nabla \varphi_j(r_{ji}, \varepsilon), \mathbf{n})$, $j \in \bar{\omega}_2$. При $i \in \omega_2^{r_{12}}$ маємо $f_i^{(1)} = -(1-n) \frac{d\Gamma_{12}(X_i, t)}{dt}$.

Якщо $s \in \omega_1^{r_{12}}$, $k \in \omega_2^{r_{12}}$ є номерами двох вузлів на межі Γ_{12} , координати яких співпадають, то

$$\begin{aligned} l_{kj}^{(2)} &= \varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{kj}^{(3)} = \varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad j \in \overline{\omega_2}; \\ f_k^{(3)} &= u_1(X_s, t), \quad f_k^{(2)} = u_2(X_s, t); \\ l_{kj}^{(4)} &= -\varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{sj}^{(4)} = -\frac{\partial \varphi_j(r_{sj}, \varepsilon)}{\partial n}, \quad j \in \overline{\omega_1}; \\ l_{kj}^{(4)} &= \varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{sj}^{(4)} = \frac{\partial \varphi_j(r_{sj}, \varepsilon)}{\partial n}, \quad j \in \overline{\omega_2}; \\ l_{kj}^{(5)} &= -\varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{sj}^{(5)} = -D_c \frac{\partial \varphi_j(r_{sj}, \varepsilon)}{\partial n}, \quad j \in \overline{\omega_1}; \\ l_{kj}^{(5)} &= \varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{sj}^{(5)} = D_c \frac{\partial \varphi_j(r_{sj}, \varepsilon)}{\partial n}, \quad j \in \overline{\omega_2}; \\ l_{kj}^{(6)} &= -\varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{sj}^{(6)} = -\lambda \frac{\partial \varphi_j(r_{sj}, \varepsilon)}{\partial n}, \quad j \in \overline{\omega_1}; \\ l_{kj}^{(6)} &= \varphi_j(r_{kj}, \varepsilon), \quad l_{sj}^{(6)} = \lambda \frac{\partial \varphi_j(r_{sj}, \varepsilon)}{\partial n}, \quad j \in \overline{\omega_2}. \end{aligned}$$

Значення $u_1(X_s, t)$, $u_2(X_s, t)$ визначаються згідно (18). Аналогічне стосується вузлів, які лежать на межах Γ_{11} та Γ_{21} .

Зауважимо, що якщо при деякому наборі індексів коефіцієнт однієї із матриць або вектор-стовпця задачі Коші (26)-(32) згідно вищенаведених формул не визначений, то він приймається рівним нулю. Також, якщо номер елемента матриці чи вектор-стовпця визначений для вузла із замикання області $\overline{\Omega_k}$, $k = \overline{1, 3}$, то до даного номера потрібно додати $\sum_{m=1}^{k-1} N_m$.

Числовий розв'язок задачі Коші (26)-(32) можна знайти, аналогічно роботам [6-8, 11].

Кінематична гранична умова (17) використовувалась для апроксимації положення межі розмиву $\Gamma_{12}(X, t)$. Якщо на часовому шарі під номером (S) крайова задача (1)-(25) розв'язана, то положення $\Gamma_{12}^{(S+1)}$ межі $\Gamma_{12}(X, t)$ на часовому шарі $(S+1)$ визначається з умови

$$-\frac{\Gamma_{12}^{(S+1)}(X) - \Gamma_{12}^{(S)}(X)}{\tau} = (\mathbf{v}^{(S)}, \mathbf{n}) + |(\mathbf{v}^{(S)}, \mathbf{d})|,$$

$S = \overline{0, M-1}$. При $t = 0$ межа $\Gamma_{12}(X, t)$ складається з одного вузла, який розміщений в точці E_2 .

Умови (16) використовуються для апроксимації положення вільної межі Γ ґрунтової греблі.

3. Результати чисельних експериментів. Вияснення можливості контактного розмиву основи ґрунтової греблі у випадку її фільтраційної консолідації в умовах впливу тепло-солепереносу проведено на тестовому

прикладі. В зв'язку з цим розглянуто задачу, де межа BF (див. рис.1) є прямою і паралельною до осі ox . При цьому координати точок області Ω_1 наступні: $A(-20; 0)$, $B(-20; 10)$, $E_1(-10; 0)$, $E_2(10; 0)$, $D(20; 0)$, $F(20; 10)$. Розмірність визначається у метрах. Висота тіла греблі – 15 метрів, а ширина верхньої основи – 4 метри.

Ґрунти основи та тіла греблі вважались ізотропними за своїми характеристиками. Коефіцієнт фільтрації чистої води при температурі $T = 20^\circ \text{C}$ для ґрунту основи покладался рівним $0,01 \text{ м/с}$, а для ґрунту греблі – 10^{-6} м/с . Залежність коефіцієнта фільтрації від температури та концентрації розчинених солей взята з роботи [7].

Значення інших числових характеристик для ґрунту основи греблі та початковий розподіл напорів $h_0(X)$, $X \in \overline{\Omega_1}$, визначались як і в роботі [7]. Початковий розподіл напорів для тіла греблі визначався згідно роботи [3]. Причому, $H_1 = 15 \text{ м}$, $H_2 = 1 \text{ м}$. Параметри тепло-масопереносу вибирались такими ж, як і в роботі [7] і однаковими для обох типів ґрунтів.

Чисельні експерименти проводились при початковій кількості вузлів в області основи 861, а в області греблі – 311. Для дискретизації в часі використовувалась чисто неявна різницева схема з кроком $\tau = 15 \text{ с}$. В ході обчислень в околі меж Γ та Γ_{12} проводилось згущення вузлових сіток.

Для проведення чисельних експериментів та побудови розривних РБФ використовувалась мультікватратична РБФ $\varphi(r, \varepsilon) = \sqrt{1 + (r\varepsilon)^2}$, де $\varepsilon > 0$ – так званий параметр форми. В області основи та тіла греблі покладалось $\varepsilon = 1.3$, а в області розмиву $\varepsilon = 10^7$.

Початковий розподіл концентрації солей та температури $c_0(X) = C_{\min}$, $T_0(X) = T_{\min}$, $X \in \overline{\Omega}$, де $C_{\min} = 5 \text{ г/літр}$, $T_{\min} = 15^\circ \text{C}$. В областях верхнього та нижнього б'єфів концентрація солей покладалась рівною $C_{\max} = 100 \text{ г/літр}$, а температура $T|_{\Gamma \cup \Gamma_{12} \cup \Gamma_2} = T|_{E_2 \Omega} = T_{\max}$, де $T_{\max} = 30^\circ \text{C}$;

$$T|_{\Gamma_1} = y T_{\max} + \frac{H_1 - y}{H_1} T_{\min}, \quad y \in \Gamma_1; \quad T|_{AE_1} = T_{\min}.$$

Якщо в якості співвідношення (22) прийняти залежність $\mathbf{v} = \alpha^* / 2n \cdot \mathbf{u} (th(|\mathbf{u}|/u_{cr} - 5) + th 4)$, де

$$\alpha^* = \begin{cases} (1 - s/(1 - n)), u \geq u_{kr}; \\ 0, u < u_{kr}; \end{cases} \quad (33)$$

то при критичній швидкості фільтрації $u_{kr} = 0,01 \text{ м/с}$ через 3,5 хвилин від початку процесу розмиву маємо $G_1(8,00; 0)$, $G_2(10,00; 0)$, $S(10,00; 0,18)$ (рис. 2). Тобто, довжина області розмиву по верхній межі складає $l = 2,00 \text{ м}$, а глибина $d = 0,18 \text{ м}$. Причому, зона розмиву поширюється лише під тіло греблі.

Якщо в якості співвідношення (22) прийняти лінійну залежність $v = \alpha^* u/n$, де α^* визначається згідно (33), то при критичній швидкості фільтрації $u_{kr} = 0,01 \text{ м/с}$ вже через 2 хвилини від початку процесу розмиву маємо $G_1(7,76; 0)$, $G_2(11,46; 0)$, $S(9,85; 1,36)$, $l = 3,7 \text{ м}$, $d = 1,36 \text{ м}$.

У випадку без урахування впливу тепло-масопереносу глибина та довжина зони розмиву зменшується приблизно на 25 %. Це вказує на те, що величина зони розмиву значно залежить від урахування процесів тепло-масопереносу та від інтенсивності розмиву, яка визначається співвідношенням (22).

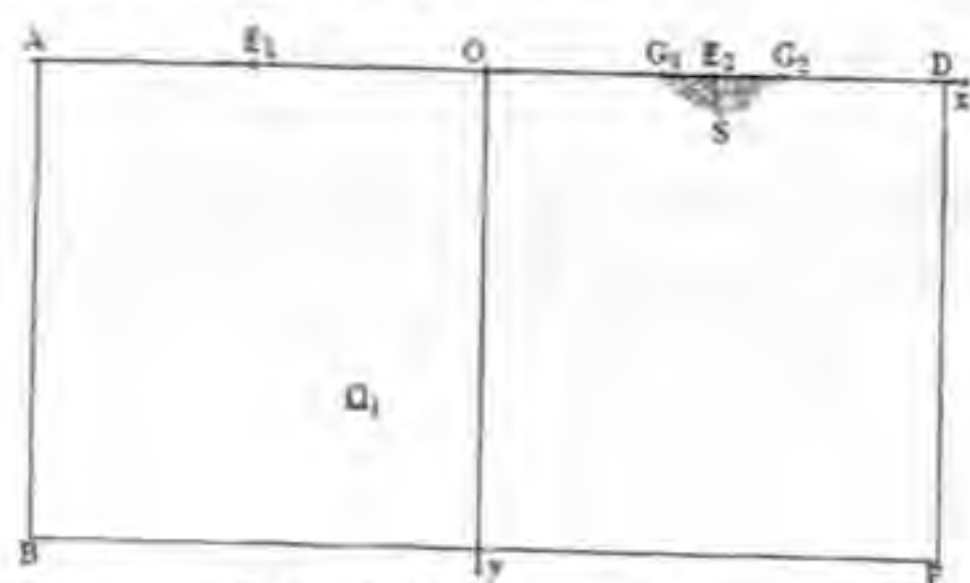


Рис. 2. Зона розмиву

Висновки. Отже, в даній роботі поставлена і чисельно розв'язана задача про контактний розмив основи ґрунтової греблі з урахуванням руху суспензії та процесів її фільтраційної консолідації в умовах тепло-солепереносу. Як свідчать результати чисельних експериментів, величина зони розмиву значно залежить від вказаних чинників.

Список використаних джерел

1. Foster M. Use of event trees to estimate the probability of failure of embankment dams by internal erosion and piping / M.Foster, R.Fell // 20th Congress on Large Dams, Beijing. – 2000. – Pp. 237-259.
2. Анахаев К.Н. Об авариях и повреждениях земляных плотин с водоводами: причины и способы совершенствования
3. Власюк А.П. Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах / А.П. Власюк, П.М. Мартинюк – Рівне: Вид-во НУВГП, 2008. – 416 с.
4. Sellmeijer J.B. On the mechanism of piping under impervious structures (Thesis) / J.B. Sellmeijer // LGM-Mededelingen. – 1988. – №96. – 112 p.
5. Sellmeijer J.B. Numerical computation of seepage erosion below dams (piping) / J.B. Sellmeijer // Proc. 3rd Int. Conf. Scour and Erosion, Amsterdam. – 2006. – 6 p.
6. Власюк А.П. Математичне моделювання фільтраційної консолідації ґрунту під плоским флютбетом з урахуванням контактного розмиву / А.П. Власюк, П.М. Мартинюк // Вісник Київського ун-ту. Серія фіз.-матем. науки. – 2008. – Вип.2. – С. 77-82.
7. Власюк А.П. Математичне моделювання фільтраційної консолідації масиву ґрунту в умовах тепло-масопереносу з урахуванням контактного розмиву / А.П. Власюк, П.М. Мартинюк // Вісник Київського ун-ту. Серія фіз.-матем. науки. – 2009. – Вип.1. – С. 92-97.
8. Власюк А.П. Математичне моделювання процесів фільтраційної консолідації ґрунтів в умовах тепло-солепереносу та руху суспензії в області контактного розмиву / А.П. Власюк, П.М. Мартинюк // Вісник Київського ун-ту. Серія фіз.-матем. науки. – 2010. – Вип.2.
9. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / П. Роуч – М.: Мир, 1980. – 616 с.
10. Van Rijn L.C. Three-dimensional modeling of sand and mud transport in current and waves / L.C. Van Rijn, K. Meijer // Int. Symp. "The transport of suspended sediments and its mathematical modeling", Florence, Italy. – 1991. – Pp. 683-708.
11. Сергиенко И.В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах / И.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий, В.С. Дейнека – Киев: Наук. думка, 1991. – 432с.

Надійшла до редколегії 15.02.2010

УДК 517.9

Глибовець М. М., д.ф.-м.н., проф.,
Остапенко О. Ю., магістр НАУКМА

Аналіз тестових завдань на основі статистичної обробки результатів тестування

Розглядаються типи тестів, які можуть бути використано в дистанційній освіті. Наведено підхід до статистичної обробки результатів тестів, а також описано основні характеристики тестів, такі як надійність та валідність.

Ключові слова: характеристики тестів, валідність, надійність.

¹E-mail: oleksandra@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

Вступ Контроль якості навчальної роботи є важливим засобом управління процесом навчання, особливо це стосується систем дистанційного електронного навчання, які базуються на самостійній роботі слухача курсу. Необхідність контролю навчальної роботи й оцінки знань має об'єктивний характер. Тут діє закономірний зв'язок у ланцюгу: мета навчання – процес – результат – нова мета. Для визначення нової мети, необхідно точно знати, що вже досягнуто внаслідок навчання.

Тестування – один з найпоширеніших методів контролю в сучасній системі освіти.

Комплексне і об'єктивне оцінювання знань через надання ефективного зворотного зв'язку є запорукою успішного навчання. Різноманітність систем тестування вражає. Вони різняться за багатьма критеріями: формами тестових запитань, видами тестів, взаємодією з користувачем, методами оцінювання ефективності результатів і параметрами інтерфейсу. Створена для конкретного навчального курсу або конкретної предметної області окрема підсистема тестування має тільки специфічний набір функцій та параметрів, що допомагає вирішити конкретну проблему. Це призвело до розробки у світі величезного різноманіття вузькоспеціалізованих систем тестування, несумісних між собою, з мінімальною специфічною функціональністю. Практично кожна система автоматизованого навчання включає в себе свій варіант підсистеми тестування. Такі розробки дуже схожі між собою, причому більшість з них реалізують тільки найлегші сценарії тестування, залишаючи

Glybovets M. M., DPhil

Ostapenko O. Y., Master of computer science.

Tests analysis based on the static processing of their results.

Given article describes different test types such as adaptive testing that could be utilized in distance learning. You can find an approach to perform static analysis of the test results along with the description of the main test characteristics – validity and reliability.

Key words: test characteristics, validity, reliability.

комплексний математичний підхід до оцінки знань на майбутнє.

Важливою задачею є вибір технології та архітектурного підходу, який би дозволив створити гнучку платформу побудови систем тестування і легкого їх налаштування на будь-який навчальний курс будь-якої навчальної платформи без обмеження на види тестування чи на типи тестових питань, формат тестів. Така платформа повинна мати чітко визначений опис інтерфейсів та основних компонентів системи, для подальшої тісної інтеграції з будь-якими системами навчання без необхідності вносити зміни в вихідні коди системи тестування.

Окрім цього, важливою також є можливість автоматизації побудови тестових завдань з орієнтацією на побудову валідних, надійних і функціонально повних тестів [1]. Для визначення цих характеристик застосовується певна статистична обробка матеріалів навчання. В даній статті буде розглянуто основні відомі підходи для такого аналізу. Основний акцент зробимо на ймовірносних характеристиках. Аналіз завдань тестування математичними методами дозволяє одержати інформацію про їх приховані дефекти, що не можуть бути виявлені за допомогою експертних методів.

Статистична обробка результатів тестування

Розглянемо найпростіші і необхідні процедури статистичної обробки результатів тестування знань і методи оцінки якості тесту відповідно до класичної теорії тестування [2].

Позначимо через x_j числову оцінку успішності виконання j -го завдання, виконаного

i -м студентом. Результати тестування звичайно представляються у вигляді матриці $\{x_{ij}\}$ з n рядками і m стовпцями ($i=1, \dots, n$; $j=1, \dots, m$). У практиці тестування прийнято, як правило, користуватися дихотомічною шкалою оцінок результатів, коли множина можливих оцінок складається усього з двох елементів $\{0;1\}$: 0 - завдання не виконане, 1 - виконане правильно. Це, звичайно, не єдина можлива шкала. Розрахунок, однак, виконується по формулах, що наведено нижче, незалежно від обраної для оцінок шкали.

Процес статистичної обробки матриці результатів тестування будемо розглядати послідовно, по кроках.

• **1 крок.** Обчислюються індивідуальні бали студентів y_i ($i=1, \dots, n$), що показують результат проходження тесту кожним з них:

$$y_i = \sum_{j=1}^m x_{ij}$$

Оскільки для перевірки статистичних гіпотез, що застосовуються в класичній теорії тестів, використовують припущення про нормальний розподіл сумарних балів студентів, то рекомендується досліджувати розподіл частот. Для порівняння розподілу балів з нормальним можна використовувати будь-який з критеріїв, що звичайно застосовуються для цієї мети.

• **2 крок.** Обчислюються середні результати $\bar{y}$ сумарних балів студентів та середні результати $\bar{x}_j$ студентів по кожному завданню.

Для дихотомічних даних дані, що обчислюються по аналогічній формулі, позначаються через p_j і традиційно називаються в тестології мірою складності завдання j ($j=1, 2, \dots, m$):

$$p_j = \frac{\sum_{i=1}^n x_{ij}}{n}$$

Відмітимо, однак, що чим більша величина коефіцієнта p_j , тим більша частина студентів успішно впорюється з завданням j . Так що насправді коефіцієнти p_j ($j=1, 2, \dots, m$) повинні інтерпретуватися як показники легкості завдань.

• **3 крок.** Обчислюється дисперсія s_y^2 і стандартне відхилення s_y сумарних балів студентів:

$$s_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}, \quad s_y = \sqrt{s_y^2}$$

• **4 крок.** Обчислюється дисперсія s_j^2 результатів студентів по j -ому завданню ($j=1, \dots, m$). Якщо успішність виконання завдання оцінюється балами 0 або 1, міра варіації визначається по формулі: $s_j^2 = p_j \times (1 - p_j)$

Коли множина оцінок складається з більш ніж двох значень, то використовується формула:

$$s_j^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)^2}{n-1}$$

Обчисливши дисперсію, можна знайти стандартне відхилення $s_j = \sqrt{s_j^2}$

• **5 крок.** Визначається зв'язок кожного j -го завдання ($j=1, \dots, m$) з сумою балів по всьому тесту за допомогою коефіцієнту кореляції Пірсона:

$$R_j = \frac{\frac{\sum_{i=1}^n (x_{ij} \times y_i)}{n} - \bar{x}_j \times \bar{y}}{s_j \times s_y} \times \frac{n}{n-1}$$

• **6 крок.** Визначається попарний кореляційний зв'язок завдань між собою. Тут теж можна використовувати коефіцієнт кореляції Пірсона.

• **7 крок.** Обчислюється індекс I_j ($j=1, 2, \dots, m$) дискримінативності завдання, тобто його розрізняюча властивість, що вказує на можливість розділяти окремих студентів за рівнем виконання тесту в цілому. Для цього з загальної сукупності студентів виділяють дві підгрупи - тих, хто одержав найвищі сумарні бали, і тих, хто одержав найнижчі. Тоді індекс дискримінативності може бути визначений як різниця між відносними кількостями студентів, що правильно виконали завдання j в цих двох підгрупах. Наприклад, впорядковану сукупність сумарних балів поділяють на три частини і порівнюють результати виконання кожного завдання j першою й останньою третинами студентів. У цьому випадку для дихотомічних даних індекс здобуває вигляд:

$$I_j = \frac{\sum_{i=1}^{n/3} x_{ij} - \sum_{i=2n/3+1}^n x_{ij}}{n/3}$$

Чим більше коефіцієнт I_j , тим більше дискримінативність завдання.

• 8 крок. Черговий крок робиться на основі вектора кореляцій $\{R_j\}$ (або $\{B_j\}$), кореляційної матриці $\{\varphi_{jk}\}$ (або $\{r_{jk}\}$) і вектора коефіцієнтів складності $\{p_j\}$. Із сукупності тестових завдань видаляються завдання, що не мають дискримінативності, тобто занадто легкі завдання ($p_j > 0,9$) і занадто складні ($p_j < 0,2$). Після цього виключаються завдання, що погано корелюють з сумою балів ($R_j < 0,15$), і які мають від'ємні коефіцієнти кореляції φ_{jk} (або r_{jk}).

• 9 крок. Для скороченого переліку завдань знову обчислюються сумарні бали студентів u_i . Потім складається нова, впорядкована, матриця даних тестування, у якій стовпці розташовуються в порядку зростання складності завдань, а рядка - у порядку зменшення, зверху вниз, сумарних балів студентів. Для зредукованої матриці перераховуються середній сумарний бал, дисперсія сумарних балів і коефіцієнти кореляції завдань із сумою балів [3].

Застосувавши даний алгоритм до існуючих тестів, викладач може з'ясувати наскільки реальні результати студентів відповідають бажаним результатам, і, у разі потреби, підкоригувати тест під рівень студентів або під рівень усієї групи.

Було проведено декілька експериментів, в результаті яких ми дійшли висновку, що статистичні методи дослідження не завжди застосовні через їх громіздкість і достатню складність. Крім того, необхідність в обчисленнях такого роду виникає не досить часто. Але незважаючи на це все одно бажано робити перевірку тестів для того, щоб вони якомога більше відповідали лекційним матеріалам та дозволяли вірно оцінити знання студентів. Як уже було сказано вище, головними характеристиками тесту є надійність і валідність. Їх теж можна обрахувати за допомогою математичних моделей.

Надійність

Надійність тесту ρ тим вище, чим більш узгоджені результати того самого студента при повторній перевірці знань за допомогою того ж тесту або еквівалентної його форми (паралельного тесту) [4]. Узгодженість результатів можна вимірювати коефіцієнтом кореляції Пірсона. Якщо значення коефіцієнта попадають в інтервал 0,80-0,89, то говорять, що тест має гарну надійність, а якщо цей коефіцієнт не менше 0,90, то надійність можна назвати дуже високою.

Інші, більш практичні, методи оцінки надійності тесту, засновані на однократному застосуванні єдиної форми тесту [5].

Оцінку надійності повного тесту можна робити з використанням коефіцієнта кореляції $r_{1/2}$, по формулі Спірмана-Брауна:

$$\rho = \frac{2r_{1/2}}{1 + r_{1/2}}$$

Інший спосіб оцінки надійності розщепленого тесту заснований на формулі Рюлона:

$$\rho = 1 - \frac{s_d^2}{s_y^2}$$

s_y^2 - дисперсія сумарних балів результату, а s_d^2 - дисперсія різниць між результатами кожного студента по обох половинах тесту. Вона обчислюється по формулі:

У тестуванні цей метод визначення надійності підходить для порівняно гомогенних за формою тестів, що містять завдання приблизно одного рівня складності. Припустимо розглядати внесок окремого тестового завдання в надійність усього тесту і узгодженість результатів відповідей на дане завдання з результатами усього тесту. Відповідно до цього було виведено індекс надійності окремого тестового завдання.

Валідність

Валідність тесту показує, наскільки добре тест робить те, для чого він був створений, тобто це комплексна характеристика тесту, що відображає обґрунтованість, значимість результатів, адекватність тесту цілям виміру.

Визначити коефіцієнт валідності тесту - означає визначити, як виконання тесту співвідноситься з іншими незалежно зробленими оцінками знань студентів. Для визначення валідності потрібен незалежний зовнішній критерій, тобто оцінка експерта (викладача). За

коефіцієнт валідності приймають коефіцієнт кореляції результатів тестових вимірів і критерію. Якщо експертна оцінка знань студентів, що отримана незалежно від процедури тестування, представлена числовою послідовністю $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$, то коефіцієнт валідності тесту може бути обчислений за формулою:

$$V = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i \times y_i)}{s_Y \times s_y} - \bar{Y} \times \bar{y} \times \frac{n}{n-1}$$

де $\bar{Y}$ - середнє арифметичне експертних оцінок, s_Y - стандартне відхилення цих оцінок.

Виходячи з того, що валідність визначається на підставі порівняння результатів тестування і показників, отриманих незалежним шляхом (традиційних оцінок, експертних суджень, результатів інших тестів, валідність яких було встановлено попередньо) і звичайно обчислюється за допомогою коефіцієнтів кореляції, то з двох тестів, призначених для однієї і тієї ж мети, більш ефективним буде той, який швидше, дешевше і якісніше вимірює знання даної групи студентів. Під швидкодією в даному випадку розуміємо таку кількість питань яка дозволяє отримати вірне представлення про рівень знань студента.

Зрозуміло, що чим вища валідність, тим більш обґрунтоване використання результатів тестування для висновків, аналізу і передбачень.

Відмітимо, що валідність тестів може поділятися на декілька видів. Наприклад, розрізняють критеріальну валідність (Criterion validity), змістовну (Content Validity) і конструктивну (Construct Validity) [6].

Критеріальна валідність тесту – це характеристика, що відображає ступінь впевненості, що отримані оцінки реально відображують досягнення визначеного рівня знань або навичок.

Змістовна валідність – це характеристика тесту, що відображує ступінь впевненості, що тестові завдання досить повно відображують зміст визначеної області знань (предметної області), а володіння навичками, що перевіряються в тесті, важливе для даної діяльності, і при цьому тест не перевіряє другорядних або непотрібних знань та навичок.

Конструктивна валідність тесту – це характеристика, що відображує впевненість в тому, що властивість, що вимірює тест, являє

собою конструкт, що займає певне місце в теорії даної області знань.

Типи тестів

Тести можуть розрізнятися за орієнтованістю та за типом генерації питань. За орієнтованістю розрізняють критеріально-орієнтований тест та нормативно-орієнтовний [7]. Критеріально-орієнтованим вважають тест що призначений для виміру тієї частини учбового матеріалу, яка засвоєна студентом, або для визначення відповідності студента визначеному критерію. Критеріально-орієнтовані тести протиставляються нормативно-орієнтованим тестам, які оцінюють досягнення даного студента у порівнянні з досягненнями інших. Обидва типи можуть включати ті самі (однакові) завдання, різниця полягає у інтерпретації результатів.

За типом генерації питань розрізняють 2 типи тестів – тести, що є завжди сталими, та тести, що генеруються випадковим чином з бази питань. Сталий тест (для нього також використовується назва «авторський») представляє собою набір чітко визначених питань, які постійні для кожного тесту. Кожен студент отримує даний тест без змін. Цей тест корисний для використання на екзаменах, а також в процесі засвоєння знань для самоконтролю. Такі тести дають можливість побачити рівень успішності групи в цілому.

Тести, що генеруються випадковим чином (також мають назву «тематичні») представляють собою динамічно змінні тести, при створенні яких задається тематика цього тесту, а також кількість питань з кожної теми. Тест генерується автоматично на основі цих даних, вибираючи з банку даних питань питання випадковим чином.

Цей тип тесту при умові великого банку даних питань гарантує генерацію практично повністю різних тестів. Цей тип зручно застосовувати для контрольних тестів. Такий тест дає можливість автоматично побудувати індивідуальні тести для кожного студента та перевірити його власний рівень знань.

Різновидом такого типу тестів є адаптивний тест, тобто тест, завдання якого пред'являються студенту в залежності від того, як він виконав попереднє завдання або сукупність попередніх завдань [7]. Загальне правило адаптивного тесту: ефективне виконання завдання є підставою для пред'явлення наступного завдання більших труднощів, а неефективне виконання завдання – підставою для пред'явлення менш важкого завдання, тобто

порядок питань може бути не тільки лінійним, але й залежати від попередніх відповідей студента.

Таким чином, адаптивний тест являє собою варіант автоматизованої системи тестування з заздалегідь відомими параметрами складності.

Розрізняють 3 типи адаптивного тесту:

- Перший називається *пірамідальним тестуванням*. При відсутності попередніх оцінок усім студентам дається завдання середньої складності і вже потім, в залежності від відповіді, кожному випробуваному дається завдання легше або складніше; на кожному кроці корисно використовувати правило розподілу шкали складності навпіл.
- Другий варіант - *flexilevel*- контроль починається з будь-якого рівня складності, з поступовим наближенням до реального рівня знань.
- Третій варіант - *stradaptive* (від англ. stratified adaptive), коли тестування проводиться за допомогою банку завдань, розділених по рівнях складності. При правильній відповіді наступне завдання береться з верхнього рівня, при неправильному - з нижнього.

Крім вищезазначених типів тестів розрізняють ще *гомогенні, гетерогенні та інтегративні*.

Гомогенний тест являє собою систему завдань зростаючої складності, специфічної форми і визначеного змісту - систему, створену з метою об'єктивного, якісного, і ефективного методу оцінки структури і виміру рівня підготовленості студентів по одній навчальній дисципліні.

Гетерогенний тест являє собою систему завдань зростаючої складності, специфічної форми і визначеного змісту - систему, створену з метою об'єктивного, якісного, і ефективного методу оцінки структури і виміру рівня підготовленості студентів по декількох навчальних дисциплінах.

Інтегративним можна назвати тест, що складається із системи завдань, що відповідають вимогам інтегративного змісту, тестової форми, зростаючої складності завдань, націлених на узагальнену підсумкову діагностику підготовленості студента освітнього закладу.

Перевага інтегративних тестів перед гетерогенними полягає в більшій змістовній інформативності кожного завдання й у меншому числі самих завдань.

Список використаних джерел

1. *Аванесов В.С.* Научные основы тестового контроля знаний. -М.: Исследовательский центр, 1994. - 135 с.
2. *Аванесов В.С.* Математические модели педагогического измерения. -М.: Исследовательский центр проблем измерения качества подготовки специалистов, 1994. - 26с.
3. *Lord F.M.* Application of Item Response Theory to Practical Testing. - N - Y., Academic Press, 2001 - 250с.
4. *Keeves J.P.* Educational Research, Methodology and Measurement: An International Handbook. -Oxford, Pergamon Press, 1988
5. *Челишкова М. Б.* Теория и практика конструирования педагогических тестов. Учебное пособие. - М.: Логос, 2002, - 432 с
6. *Weiss D.J.(Ed.)* New Horizons in Testing: Latent Trait Test Theory and Computerised Adaptive Testing. - N-Y., Academic Press, 1983.-345с
7. *Гласс Д., Стенли Д.* Статистические методы в психологии и педагогике - М.: 1981.-140с

Надійшла до редколегії 11.12.2009

УДК 519.8

Горбачук В.М., к.ф.-м.н., с.н.с., Гаркуша Н.І., к.е.н.

Необхідні умови першого порядку для задач дворівневої оптимізації

Для досить гладких задач дворівневої оптимізації з обмеженнями виведені необхідні умови першого порядку, виходячи з результатів параметричного програмування та Кларка. Наведено приклад такої задачі при проектуванні мережі.

Ключові слова: дворівнева оптимізація, параметричне програмування, Кларк, мережа.

M. Gorbachuk, Ph.D. (Physics and Mathematics),
N.I. Garkusha, Ph.D. (Economics)

First order necessary conditions for two-level optimization problems

Based upon the results of parametric programming and those of Clarke, the first order conditions have been derived for sufficiently smooth two-level constrained optimization problems. The example of such problem is given for network design.

Key words: two-level optimization, parametric programming, Clarke, network

*E-mail: GorbachukWasyi@netscape.net, NGarkusha@gmail.com

Статтю представив проф., д.ф.-м.н. Хусаїнов Д.Я.

Розглянемо нелінійну задачу проектування мережі [1]. Нехай середні витрати (cost) на ланці (link) a із загальним потоком (flow) $f(a, x)$ рівні за обмеження

$$C_a[x_a, g(a, x)] = t_a \left\{ 1 + \rho \left[\frac{g(a, x)}{s_a + y_a} \right]^\sigma \right\},$$

де: s_a – наявна місткість ланки a ; x_a – приріст місткості ланки a ; x – загальний вектор $\{x_a\}$; t_a , ρ , σ – деякі параметри. Тому загальна сума суспільних витрат на транспортування становить

$$S = \sum_a \int_0^{g(a, x)} M_a(x, y) dy,$$

де граничні витрати на ланці a з потоком $g(a, x)$ визначаються

$$M_a[x_a, g(a, x)] = \frac{d\{C_a[x_a, g(a, x)] \times g(a, x)\}}{d[g(a, x)]}.$$

Припустимо, сумарні інвестиційні витрати для поліпшення транспортних ланок становлять

$$I = \sum_a G_a(x_a),$$

де $G_a(x_a)$ – інвестиційна функція від збільшення місткості на x_a ланки a . Тоді на верхньому рівні державний плановик обирає таке значення вектора x , що мінімізує суму витрат

$$F = S + \theta I \rightarrow \min_x \quad (1)$$

за обмеження

$$x_a \geq 0, \quad (2)$$

де θ – відносна вага інвестиційних витрат. На нижньому рівні споживачі вибирають рівноважні за Уордропом [2] маршрути: y є розв'язком підзадачі

$$f = \int_0^{g(a, x)} C_a(x, y) dy \rightarrow \min_y \quad (3)$$

при обмеженнях

$$\sum_p Y_{ijp} = T_{ij} \quad \forall i, j, \quad (4)$$

$$Y_{ijp} \geq 0 \quad \forall p, i, j, \quad (5)$$

$$g(a, x) = \sum_i \sum_j \sum_p Y_{ijp} \delta_{ijp}^a \quad \forall a, \quad (6)$$

де: Y_{ijp} – потік від i до j на шляху (path) p ; δ_{ijp}^a – булева змінна, що рівна 1 тоді й тільки тоді, коли ланка a належить такому шляху.

Задача (1)–(6) є прикладом задачі дворівневої оптимізації.

Теорема 1. Нехай x^* – це точка локального інфімуму по $x \in A$ неперервно диференційованої функції $F(x, y): R^n \times R^m \rightarrow R$, де:

y – це точка мінімуму по $z \in \Omega(x)$ двічі неперервно диференційованої функції $f(x, z): R^n \times R^m \rightarrow R$;

A – компактна підмножина в R^n , яка містить відкриту обмежену підмножину B ;

$\Omega(x)$ – це підмножина точок $z \in R^m$, які задовольняють рівностям $\Phi_i(x, z) = 0$, $i = 1, \dots, p$, та нерівностям $\Psi_j(x, z) \leq 0$, $j = 1, \dots, s$;

$\Phi_i(x, z)$ – двічі неперервно диференційована функція, афінна по z ;

$\Psi_j(x, z)$ – двічі неперервно диференційована функція, опукла по z .

Позначимо $S(x)$ множину всіх таких точок y .

1) Припустимо, $\forall y \in S(x)$, $\forall x \in B$ лінійно незалежними є градієнти $\nabla_y \Phi_i(x, y)$, $i = 1, \dots, p$, та градієнти $\nabla_y \Psi_k(x, y)$ на активних обмеженнях $k \in I(x, y) = \{j \in \{1, \dots, s\} : \Psi_j(x, y) = 0\}$.

2) Стандартна функція Лагранжа (Lagrange)

$$L(x, y, \mu, \lambda) = f + \sum_{i=1}^p \mu_i \Phi_i + \sum_{j=1}^s \lambda_j \Psi_j$$

задовольняє сильним достатнім умовам другого порядку: якщо $x_0 \in B$, $y_0 \in S(x_0)$, $\bar{0} \neq h \in R^m$,

$$\langle \nabla_y \Phi_i(x_0, y_0), h \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, p,$$

$$\langle \nabla_y \Psi_l(x_0, y_0), h \rangle = 0 \quad \text{на підмножині обмежень}$$

$$l \in J(x_0, y_0) = \{l \in I(x_0, y_0) : \lambda_{l0} > 0\}, \text{ то}$$

$$\langle h, Q(x_0) \rangle > 0,$$

де:

$$Q(x_0) = \nabla_{yy}^2 L(x_0, y_0, \mu_0, \lambda_0);$$

за припущенням 1), вектори множників $\mu_0 \in R^p$, $\lambda_0 \in R_+^s$ (R_+^s – це невід'ємний ортант R^s) є єдиними, що задовольняють умовам Куна–Такера (Kuhn–Tucker):

$$\nabla_y L(x_0, y_0, \mu_0, \lambda_0) = 0, \quad (7)$$

$$\lambda_{j0} \Psi_j(x_0, y_0) = 0, \quad j = 1, \dots, s, \quad (8)$$

3) Нехай t – це єдиний розв'язок приєднаної (adjoint) задачі квадратичного програмування пошуку інфімуму по t функції

$$\frac{1}{2} \langle t, Q(x^*) t \rangle - \langle \nabla_y F(x^*, y^*), t \rangle \quad (9)$$

за обмеження

$$C(x^*) t = 0, \quad (10)$$

$$\text{де: } y^* = S(x^*);$$

$$I(x^*, y^*) = J(x^*, y^*);$$

$C(x^*)$ – матриця, рядками якої є частинні градієнти $\nabla_y \Phi_i(x^*, y^*)$, $i = 1, \dots, p$, та $\nabla_y \Psi_k(x^*, y^*)$, $k \in I(x^*, S(x^*))$, $y^* = S(x^*)$.

Позначимо η єдиний множник Лагранжа задачі (9)–(10). Тоді

$$\bar{0} \in \nabla_x F(x^*, y^*) - [\nabla_{xx}^2 L(x^*, y^*, \mu^*, \lambda^*)]^T t - [D(x^*)]^T \eta + N_A(x^*),$$

де: μ^* , λ^* – вектори множників, які задовольняють умовам (7)–(8) при $x_0 = x^*$, $y_0 = y^*$, $\mu_0 = \mu^*$, $\lambda_0 = \lambda^*$;

$D(x^*)$ – матриця, рядками якої є частинні градієнти $\nabla_x \Phi_i(x^*, y^*)$, $i = 1, \dots, p$, та $\nabla_x \Psi_k(x^*, y^*)$, $k \in I(x^*, S(x^*))$, $y^* = S(x^*)$;

$N_A(x^*) = \{v^* \in R^n : \langle v, v^* \rangle \leq 0 \quad \forall v \in C_A(x^*)\}$ – це нормальний конус Кларка (Clarke), або від'ємний полярний конус до $C_A(x^*)$;

$C_A(x) = \left\{ v \in R^n : \lim_{\lambda \downarrow 0, u \rightarrow x, v \in A} \text{dist} \left(\frac{u + \lambda v}{\lambda} \right) = 0 \right\}$ – це дотичний (tangent) конус Кларка [3, 4].

Доведення. За припущень 1) та 2) відображення $S(x) : B \rightarrow R^m$ є однозначним і локально ліпшицевим [5], а також диференційованим за напрямком [6, 7]. Оператор $M : B \rightarrow R^p \times R_+^s$, який відображає кожну точку $x_0 \in B$ у вектор множників (multipliers) μ_0 та λ_0 , також є однозначним і локально ліпшицевим.

За умови строгої доповнюваності $I(x_0, y_0) = J(x_0, y_0)$ для деяких $x_0 \in B$, $y_0 \in S(x_0)$, коли для кожного активного обмеження $\Psi_k(x_0, y_0) = 0$ виконується $\lambda_{0k} > 0$, відображення $S(x)$ є диференційованим у точці $x = x_0$ [8]. При цьому градієнт $\nabla S(x_0)$ є оператором, що відображає довільний вектор $u \in R^n$ в єдиний розв'язок задачі квадратичного програмування пошуку інфімуму по v функції

$$\frac{1}{2} \langle v, Q(x_0) v \rangle + \langle q(x_0, u), v \rangle \quad (11)$$

при обмеженнях

$$\nabla_x \Phi_i(x_0, y_0)u + \nabla_y \Phi_i(x_0, y_0)v = 0, i = 1, \dots, p, \quad (12)$$

$$\nabla_x \Psi_k(x_0, y_0)u + \nabla_y \Psi_k(x_0, y_0)v = 0,$$

$$k \in I(x_0, y_0), \quad (13)$$

де $q(x_0, u) = \nabla_{xx}^2 L(x_0, y_0, \mu_0, \lambda_0)u$.

Коли ж відображення S диференційоване по Гато (Gateaux) в точці $x_0 \in B$, то градієнт $\nabla S(x_0)$ є розв'язком задачі (11)–(13), де замість $I(x_0, y_0)$ розглядається $J(x_0, y_0)$ [9].

За припущень 1), 2) задача дворівневої оптимізації теореми 1 зводиться до пошуку інфімуму по $x \in A$ функції $F(x, S(x))$. Оскільки $F(x, y)$ неперервно диференційована, то функція $\Theta(x) = F(x, S(x))$ локально ліпшицева на $B \subseteq A$. Оскільки A – компакт, то існує розв'язок (x^*, y^*) задачі дворівневої оптимізації.

Нехай $\Gamma(x): R^n \rightarrow R^r$ – ліпшицевий оператор в околі $x_0 \in R^n$, а σ_Γ – множина точок, де оператор Γ не є диференційованим. Тоді узагальнений якобіан (Jacobian) $\partial \Gamma(x_0)$ оператора Γ у точці x_0 [4] визначається опуклою оболонкою множини матриць $m \times r$

$$\text{conv} \left\{ \lim_{t \rightarrow 0} \nabla \Gamma(x_0): x_t \rightarrow x_0; x_t \in \sigma_\Gamma \right\}.$$

При $r=1$ такий якобіан називають узагальненим градієнтом (субдиференціалом) Γ у точці x_0 .

У роботі [4] доведено, що точці $x_0 \in A$

$$\partial \Theta(x_0) = \nabla_x F(x_0, S(x_0)) + \quad (14)$$

$$+ \{ [P(x_0)]^T \nabla_y F(x_0, S(x_0)) P(x_0): P(x_0) \in \partial S(x_0) \}.$$

Лема 1. Нехай C – симетрична позитивно визначена матриця $m \times m$, H – матриця $l \times m$ рангу l , а E – відображення $w^* \in R^m$ в єдиний множник Лагранжа задачі квадратичного програмування

$$\frac{1}{2} \langle z, Cz \rangle - \langle w^*, z \rangle \rightarrow \inf_z, \quad (15)$$

$$Hz = \bar{0}. \quad (16)$$

Тоді приєднане відображення E^T кожному $v^* \in R^l$ ставить у відповідність єдиний розв'язок задачі квадратичного програмування

$$\frac{1}{2} \langle w, Cw \rangle \rightarrow \inf_w, \quad (17)$$

$$Hw = v^*. \quad (18)$$

Доведення леми. Необхідними й достатніми умовами розв'язку для задачі (15), (16) є

$$\begin{bmatrix} C & H^T \\ H & \bar{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w^* \\ \bar{0} \end{bmatrix},$$

а для задачі (17), (18) –

$$\begin{bmatrix} C & H^T \\ H & \bar{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{0} \\ v^* \end{bmatrix},$$

де v – множник Лагранжа задачі (15), (16).

Звідси розв'язок задачі (17), (18) однозначно визначається через $w^* \in R^m$:

$$v = G^{-1} H C^{-1} w^*,$$

де $G = H C^{-1} H^T$ – матриця Грама (Gramm) у C -метриці. Розв'язок задачі (15), (16) однозначно визначається через $v^* \in R^l$:

$$w = C^{-1} H^T G^{-1} v^*.$$

Продовження доведення. Враховуючи вираз (14) для субдиференціала та умови оптимальності [10], достатньо показати

$$[\nabla S(x^*)]^T \nabla_y F(x^*, y^*) =$$

$$= -[\nabla_{xx}^2 L(x^*, y^*, \mu^*, \lambda^*)]^T \tau - [D(x^*)]^T \eta.$$

За умови сторогої доповнюваності градієнт $\nabla S(x^*)$ визначається як розв'язок задачі квадратичного програмування (11)–(13). Умова Куна–Такера для цієї задачі при $x_0 = x^*$, $y_0 = y^*$

$$Q(x^*)v + q(x^*, z) + [C(x^*)]^T \xi = 0, \quad (19)$$

де: $\xi \in R^{p+o}$ – єдиний множник, що відповідає обмеженню-рівності

$$C(x^*)v = -D(x^*)z; \quad (20)$$

o – кількість активних обмежень $\Psi_j(x^*, y^*) = 0$.

Оскільки за умовами теореми $Q(x^*)$ – позитивно визначена матриця, то з (19) випливає

$$v = -[Q(x^*)]^{-1} \{q(x^*, z) + [C(x^*)]^T \xi\}, \quad (21)$$

звідки в силу (20) маємо

$$C(x^*)[Q(x^*)]^{-1}\{q(x^*, z) + [C(x^*)]^T \xi\} = D(x^*)z,$$

$$G(x^*)\xi = C(x^*)z - C(x^*)[Q(x^*)]^{-1}q(x^*, z), \quad (22)$$

де $G(x^*) = C(x^*)[Q(x^*)]^{-1}[C(x^*)]^T$ – матриця Грама у $Q(x^*)$ -метриці. Оскільки ця матриця позитивно визначена, то з (21), (22) випливає

$$v = v_1 + v_2,$$

$$v_2 = -[Q(x^*)]^{-1}[C(x^*)]^T[G(x^*)]^{-1}D(x^*)z,$$

$$v_1 = [Q(x^*)]^{-1}\{-q(x^*, z) + [C(x^*)]^T[G(x^*)]^{-1}C(x^*)[Q(x^*)]^{-1}q(x^*, z)\}.$$

Отже, розв'язок задачі (11)–(13) має вид

$$v = \Xi_1[-\nabla_{y^*}^2 L(x^*, y^*, \mu^*, \lambda^*)] + \Xi_2[-D(x^*)], \quad (23)$$

де: Ξ_1 – симетричний проектор $[Q(x^*)]^{-1}b$, $b \in R^m$, на систему лінійних рівнянь $\{v \in R^m : C(x^*)v = \bar{0}\}$ у

$Q(x^*)$ -метриці; Ξ_2 – відображення $a \in R^{n \times o}$ на вектор найменшої норми у $Q(x^*)$ -метриці, що задовольняє системі лінійних рівнянь $\{v \in R^m : C(x^*)v = a\}$. Тоді в силу співвідношення (23)

$$\begin{aligned} \langle \nabla_{y^*} F(x^*, y^*), v z \rangle = \\ \langle \nabla_{y^*} F(x^*, y^*), \Xi_1[-\nabla_{y^*}^2 L(x^*, y^*, \mu^*, \lambda^*)]z + \\ + \Xi_2[-C(x^*)]z \rangle = \\ = \langle [-L(x^*, y^*, \mu^*, \lambda^*)]^T \Xi_1 \nabla_{y^*} F(x^*, y^*), z \rangle + \\ + \langle [-D(x^*)]^T (\Xi_2)^T \nabla_{y^*} F(x^*, y^*), z \rangle, \end{aligned}$$

де за лемою 1

$$\Xi_1 \nabla_{y^*} F(x^*, y^*) = \iota, \quad [\Xi_2]^T \nabla_{y^*} F(x^*, y^*) = \eta.$$

Задача (1)–(6) має структуру задач [11] з умовами оптимальності [12].

Список використаних джерел

1. Suh S., Kim T.J. Solving nonlinear bilevel programming models of the equilibrium network design problem: a comparative review // Annals of operations research. – 1992. – 34. – P. 203–218.
2. Wardrop J.G. Some theoretical aspects of road traffic research // Proceedings of Institute of Civil Engineers. – 1952. – 1. – P. 325–328.
3. Outrata J.V. Necessary optimality conditions for Stackelberg problems // Journal of optimization theory and applications. – 1993. V. 76. – P. 305–320.
4. Кларк Ф. Оптимизация и негладкий анализ. – М.: Наука, 1988. – 280 с.
5. Cornet B., Laroque G. Lipschitz properties of solutions in mathematical programming // Journal of optimization theory and applications. – 1987. – V. 53. – P. 407–427.
6. Jittornnum K. Solution point differentiability without strict complementarity in nonlinear programming // Mathematical programming study. – 1984. – V. 21. – P. 127–138.
7. Kypraris J. Sensitivity analysis for nonlinear programs and variational inequalities with nonunique multipliers // Mathematics of operations research. – 1990. – V. 15. – P. 286–289.

8. Fiacco A.V. Sensitivity analysis for nonlinear programming using penalty methods // Mathematical programming. – 1976. – V. 10. – P. 287–311.
9. Malanowski K. Differentiability with respect to parameters of solutions to convex programming problems // Ibid. – 1985. – V. 33. – P. 352–361.
10. Hiriart-Urruty J.B. Tangent cones, generalized gradients and mathematical programming in Banach spaces // Mathematics of operations research. – 1979. – V. 4. – P. 79–97.
11. Горбачук В.М., Гаркуша Н.І. Максимізація функції доходу та мінімізація функції витрат у дворівневому програмуванні // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2005. – № 4. – С. 147–152.
12. Горбачук В.М., Гаркуша Н.І. Задачі дворівневого прийняття рішень // PDMU-2006 (21–25 травня 2006 р., Східниця, Україна). – К.: КНУ ім. Т. Шевченка, 2006. – С. 178–180.

Надійшла до редколегії 15.04.2010

УДК 517.934

Матвієнко В.Т., к.ф.-м.н., доц.,
Шапран І.В., студ.

Алгоритм оптимізації модальних регуляторів

Розглядається задача оптимального вибору структури розподілу керуючого сигналу в лінійній системі з метою мінімізації норми матриці коефіцієнтів підсилення в зворотному зв'язку закону модального регулювання.

Ключові слова: модальне керування, оптимальне, власні значення.

E-mail: matv@unicyb.kiev.ua

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Вступ.

Визначення матриці підсилення модального регулятора наводяться в роботах [1, 2, 3, 4]. Один з можливих методів знаходження матриці модального регулятора зводиться до представлення шуканої матриці у вигляді

$C = vq^T$ [2, 4]. Це представлення матриці підсилення звужує множину можливих модальних регуляторів, але дає можливість порівняно просто визначити коефіцієнти модального регулятора. У роботі розглядається алгоритм по визначенню матриці C [5].

Постановка задачі.

Розглянемо задачу модального керування для лінійної системи

$$\frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + Bu(t), \quad (1)$$

де x – n – мірний, u – m – мірний вектори. Необхідно визначити для системи (1) зворотний зв'язок у вигляді

$$u(t) = Cx(t), \quad (2)$$

щоб для замкнутої системи виконувалось співвідношення

$$\det(\lambda E_n - A - BC) = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + a_2 \lambda^{n-2} + \dots + a_n, \quad (3)$$

де $a_1, a_2, \dots, a_n$ – коефіцієнти характеристичного рівняння замкнутої системи (1), які наперед задані і забезпечують відповідні власні значення системи керування (1). Крім цього

Volodymyr T. Matvienko, Dr.Sci.Tech., prof.,
Iryna V. Shapran, stud.

Algorithm of optimization of modal control

In article the task of optimization of a multi-dimension modal control for linear systems is considered. The algorithm of solution of the set task is reduced. The task of modal control is reduced to a boundary problem.

Key Words: modal control, optimal, eigenvalues.

матрицю модального керування C будемо знаходити з мінімальною нормою $\|C\|$ (з мінімальною затратою енергії по керуванню).

Представимо систему (1) наступним чином

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= Ax(t) + b_1 u_1(t) + b_2 u_2(t) + \dots + b_m u_m(t) = \\ &= (A + b_1 c_1^T + b_2 c_2^T + \dots + b_m c_m^T)x(t), \end{aligned}$$

де

$$C = \begin{pmatrix} c_1^T \\ c_2^T \\ \vdots \\ c_m^T \end{pmatrix}, B = (b_1, b_2, \dots, b_m), u(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_m(t) \end{pmatrix}.$$

Спочатку розглянемо систему

$$\frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + b_1 u_1(t)$$

і визначимо коефіцієнти характеристичного рівняння

$$\det(\lambda E_n - A - b_1 c_1^T) = 0$$

по формулі

$$p(1) = p(0) - P(0)S^T(b_1, A(0))c_1,$$

де

$$\begin{aligned} p(0) &= p, A(0) = A. \\ P(0) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ p_1(0) & 1 & 0 & \dots & 0 \\ p_2(0) & p_1(0) & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n-1}(0) & p_{n-2}(0) & p_{n-3}(0) & \dots & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

$$p = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix},$$

$$S(b_1, A(0)) = (b_1, A(0)b_1, \dots, A^{n-1}(0)b_1),$$

елементами вектора p є коефіцієнти характеристичного рівняння розімкнутої системи

$$\det(\lambda E_n - A) = \lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_n = 0.$$

На наступному кроці розглядається система

$$\frac{dx(t)}{dt} = (A + b_1 c_1^T) x(t) + b_2 u_2(t)$$

з коефіцієнтами характеристичного рівняння замкнутої системи

$$p(2) = p(1) - P(1) S^T(b_2, A(1)) c_2,$$

де

$$A(1) = A(0) + b_1 c_1^T.$$

На кроці m розглядається наступна система рівнянь

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(m-1)x(t) + b_m u_m(t),$$

де

$$A(m-1) = A(m-2) + b_{m-1} c_{m-1}^T,$$

для замкнутої системи, якій необхідно забезпечити наступні коефіцієнти характеристичного рівняння

$$p(m) = a =$$

$$= p(m-1) - P(m-1) S^T(b_m, A(m-1)) c_m.$$

Компоненти вектора $a^T = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ є коефіцієнтами характеристичного рівняння (3.3).

Таким чином, у випадку обмежень виду $c_j \in \Omega_c(j)$ розглянута задача по оптимізації модального багатомірного регулятора зводиться до наступної задачі керування системою з дискретним аргументом

$$p(k+1) = p(k) - P(k) S^T(b_{k+1}, A(k)) c_{k+1}, \quad (4)$$

$$A(k+1) = A(k) + b_{k+1} c_{k+1}^T, \quad k = 0, 1, 2, \dots, m-1$$

з початкового стану

$$p(0) = p, \quad A(0) = A \quad (5)$$

у кінцевий стан

$$p(m) = a = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T \quad (6)$$

за умови

$$I(C) = \min_{c_j \in \Omega_c(j), \forall j=1, m} \sum_{j=1}^m \|c_j\|^2 + \|p(m) - a\|^2. \quad (7)$$

Тут компоненти вектора $p^T = (p_1, p_2, \dots, p_n)$ є коефіцієнтами характеристичного рівняння розімкнутої системи (1)

$$\det(\lambda E_n - A) = \lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_n.$$

Матриці $P(k), S(b_{k+1}, A(k))$ мають наступний вигляд

$$P(k) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ p_1(k) & 1 & 0 & \dots & 0 \\ p_2(k) & p_1(k) & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{n-1}(k) & p_{n-2}(k) & p_{n-3}(k) & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

$$S(b_{k+1}, A(k)) = (b_{k+1}, \dots, A^{n-1}(k)b_{k+1}).$$

Алгоритм побудови оптимального модального регулятора.

Для розв'язання сформульованої задачі запишемо чисельну процедуру знаходження матриці C модального регулятора. З цією метою запишемо функцію Гамільтона [6] для сформульованої оптимізаційної задачі (4-7)

$$H(p(k), A(k), \Psi(k+1), \Phi(k+1), k) = -\|c_{k+1}\|^2 + \\ + \Psi^T(k+1) [p(k) - P(k) S^T(b_{k+1}, A(k)) c_{k+1}] + \\ + \text{tr}[\Phi^T(k+1) (A(k) + b_{k+1} c_{k+1}^T)].$$

Спряжені змінні $\Psi(k), \Phi(k)$ задовольняють наступним системам рівнянь

$$\Psi(k) = \text{grad}_{p(k)} H(\cdot) = \\ = \Psi(k+1) -$$

$$- \begin{pmatrix} 0 & c_{k+1}^T b_{k+1} & \dots & c_{k+1}^T A^{n-2}(k) b_{k+1} \\ 0 & 0 & \dots & c_{k+1}^T A^{n-3}(k) b_{k+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & c_{k+1}^T b_{k+1} \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \Psi(k+1),$$

$$\begin{aligned}\Psi(m) &= \frac{\partial}{\partial p(m)} (p(m) - a)^T (p(m) - a) = \\ &= 2(p(m) - a), \quad k = m - 1, \dots, 0, \\ \Phi(k) &= \text{grad}_{A(k)} H(\cdot) = \\ &= \Phi(k+1) - (c_{k+1}, A^T(k)c_{k+1}, \dots, A^{n-2^T}(k)c_{k+1}) \times \\ &\times (\bar{E}_2 P^T(k) \Psi k + 1, \bar{E}_3 P^T(k) \Psi k + 1, \dots, \\ &\dots, \bar{E}_n P^T(k) \Psi k + 1) \times \\ &\times \begin{pmatrix} b_{k+1}^T \\ b_{k+1}^T A^T(k) \\ \vdots \\ b_{k+1}^T A^{n-2^T}(k) \end{pmatrix}, \\ \Phi(m) &= 0, \quad k = m - 1, \dots, 0.\end{aligned}$$

Матриці $\bar{E}_i, i = \overline{2, n}$ розмірності $(n-1) \times n$ мають наступну структуру

$$\bar{E}_2 = \begin{pmatrix} e_2^T \\ e_3^T \\ \vdots \\ e_n^T \end{pmatrix}, \bar{E}_3 = \begin{pmatrix} e_3^T \\ e_4^T \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \bar{E}_n = \begin{pmatrix} e_n^T \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

де $e_i - i = \overline{2, n}$ одиничні орти розмірності n .
Тоді

$$\begin{aligned}\text{grad}_{c_{i+1}} I(C) &= -\text{grad}_{c_{i+1}} H(\cdot) = \\ &= 2c_{i+1} + S(b_{i+1}, A(i)) P^T(i) \Psi i + 1) - \Phi^T(i+1) b_{i+1},\end{aligned}$$

для градієнтних обчислювальних процедур

$$\bar{c}_j = c_j - \rho_j \text{grad}_{c_j} I(C), \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

Приклад застосування алгоритму.

Розглянемо для приклада коливну систему з трьох мас, які з'єднані між собою пружинами (рис. 1).



Рис. 1

Коливання центрів мас такої системи описується наступними рівняннями

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_1+k_2}{m_1} & 0 & \frac{k_2}{m_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{k_2}{m_2} & 0 & -\frac{k_1+k_2}{m_2} & 0 & \frac{k_3}{m_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{k_3}{m_3} & 0 & -\frac{k_3+k_4}{m_3} & 0 \end{pmatrix} x + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ \frac{1}{m_1} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_1} \end{pmatrix} u,\end{aligned}\quad (8)$$

де вектор стану системи коливання має вигляд $x^T = (x_1, x_2, \dots, x_6)$, x_1, x_3, x_5 – координати положень центрів мас, x_2, x_4, x_6 – швидкості руху мас m_1, m_2, m_3 відповідно, k_1, k_2, k_3 – коефіцієнти пружності відповідних пружин. Керуючі сили для системи (8) прикладені до мас m_1 та m_3 .

Замкнутій системі (8) необхідно забезпечити наступні власні значення

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= -0.25 + 0.1i, \quad \lambda_2 = -0.25 - 0.1i, \\ \lambda_3 &= -0.2 + 0.1i, \quad \lambda_4 = -0.2 - 0.1i, \\ \lambda_5 &= -0.1 + 0.1i, \quad \lambda_6 = -0.1 - 0.1i,\end{aligned}$$

які забезпечують системі асимптотичну стійкість з мінімальною по нормі матрицею підсилення. Маса та коефіцієнти пружності були вибрані наступні $m_1 = 12, m_2 = 25, m_3 = 8$,

$$k_1 = 0.14, k_2 = 0.9, k_3 = 0.7, k_4 = 0.12.$$

В результаті проведення чисельного експерименту для коливальної системи (8) отримана наступна оптимальна матриця модального керування

$$C_{\text{opt}} = \begin{pmatrix} -0.55 & -1.1 & -5.71 & -1.72 & 0.14 & -0.38 \\ 0.5 & 0.01 & 1.27 & -0.48 & 0.28 & -0.0001 \end{pmatrix}$$

На рис. 2 зображено коливання центрів мас системи відносно їх положень рівноваги без керуючих впливів.

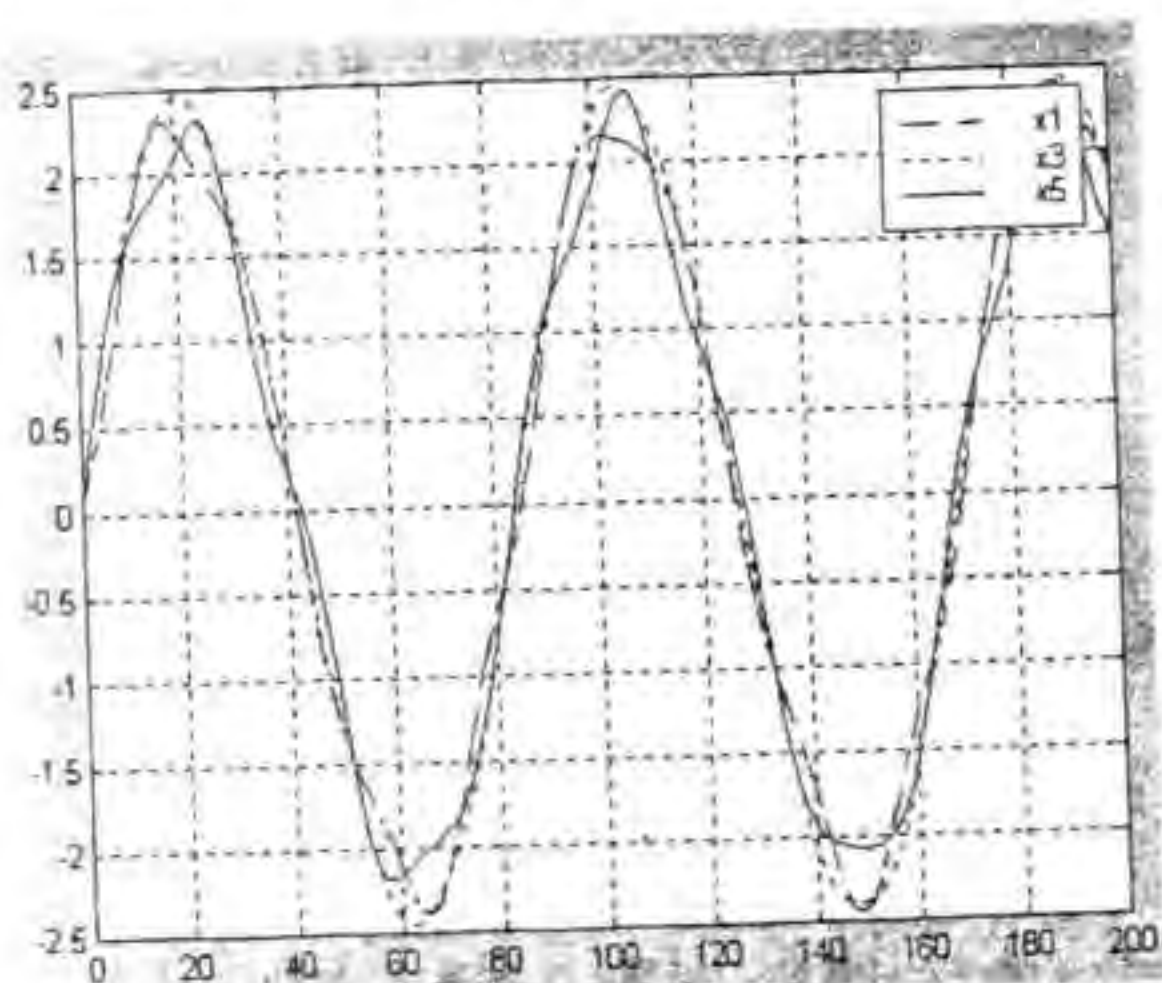


Рис. 2

На рис. 3 зображене коливання центрів мас замкнутої системи з оптимальним модальним керуванням.

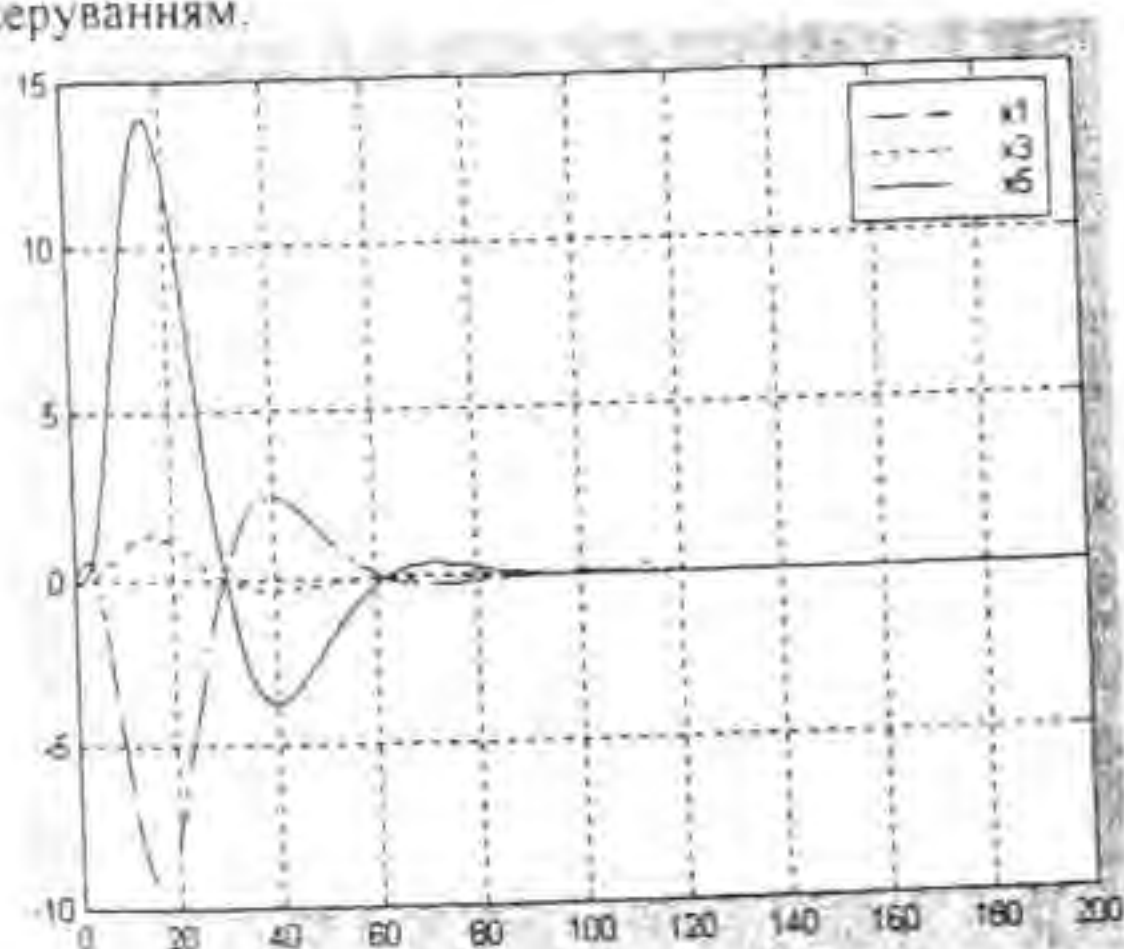


Рис. 3

На рис. 4 відображений процес збігання норми матриці модального регулятора до його оптимального значення.

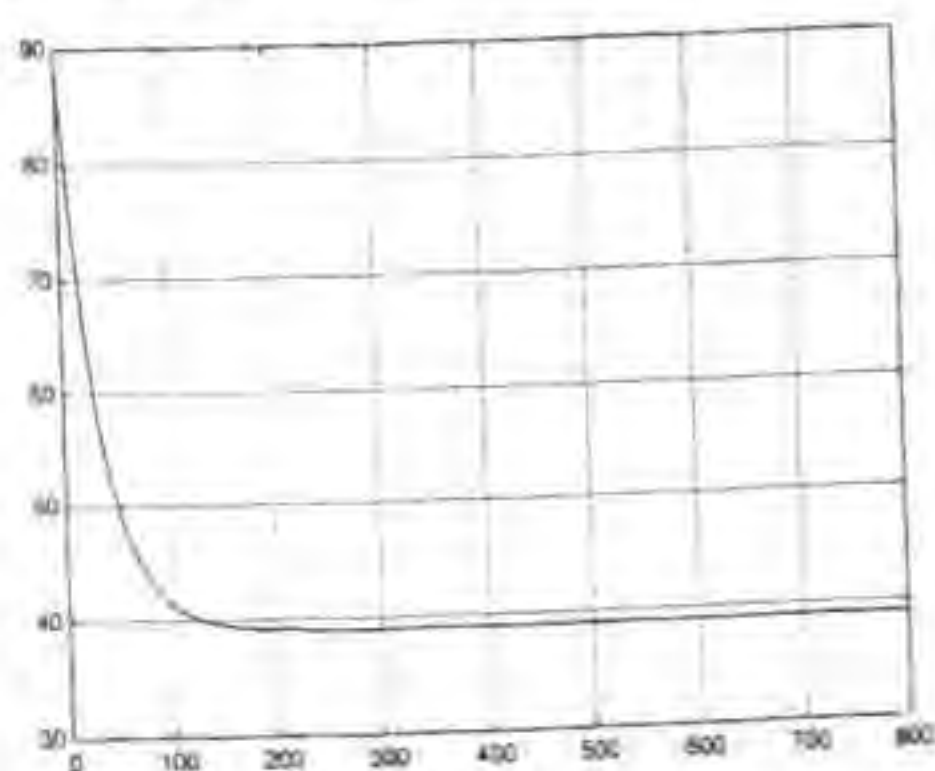


Рис. 4

При не оптимальному виборі регулятора коливної системи (8) норма матриці модального регулятора становила $\|C\|=82$.

Висновки.

В роботі наведений алгоритм побудови багатовимірної модального регулятора з мінімальною нормою матриці керування (з мінімальною затратою енергії по керуванню). Запропонований алгоритм дає змогу проектувати оптимальні багатовимірні модальні регулятори для динамічних систем.

На основі вказаної методики в даній роботі розроблений та протестований алгоритм оптимального вибору матриці в модальному регуляторі для коливної системи.

Список використаних джерел.

1. Андреев Ю.Н. Управление конечномерными линейными объектами. – М.: Наука, 1976. – 184с.
2. Кузовков Н.Т. Модальное управление и наблюдающие устройства. – М.: Машиностроение, 1976. – 184с.
3. Кириченко Н.Ф. Введение в теорию стабилизации движения. – К.: Вища школа, 1978. – 184с.
4. Кириченко Н.Ф., Матвиенко В.Т. Оптимизация в задаче модального управления // В кн. "Вопросы оптимизации в динамических системах с непрерывно-дискретными параметрами". – К.: Наукова думка, 1980. – С.27–34.
5. Кириченко Н.Ф., Матвиенко В.Т. Оптимальный синтез структур для линейных систем управления // Проблемы управления и информатики. – 1996. – №1-2. – С.162–171.
6. Пропой Ф.И. Элементы теории оптимальных дискретных процессов. – М.: Наука, 1973. – 256с.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 519.8

Машченко С.О., к. ф.-м. н., доц.

Індивідуальна раціональність індивідуально-оптимальних рівноваг

Розглядаються умови індивідуальної раціональності індивідуально-оптимальних рівноваг у некооперативних іграх, які задані як відношеннями переваги гравців, так і функціями їх виграшу.

Ключові слова: загальна гра, рівновага за Нешем, індивідуально-оптимальна рівновага.

*E-mail: msomail@yandex.ru

Статтю представив д. т. н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Розглянемо загальну гру G у нормальній формі $(X_i, R_i; i \in N)$, де $N = \{1, 2, \dots, n\}$ - множина з n гравців; X_i - множина стратегій гравця $i \in N$, яка є довільною множиною топологічного простору E_i ; R_i - бінарне відношення переваги гравця $i \in N$, яке визначене на множині ситуацій гри $X = \prod_{i \in N} X_i$ та є підмножиною топологічного простору $E = \prod_{i \in N} E_i$.

Відношення переваги $R_i, i \in N$, будемо розглядати у досить широкому сенсі як нестрогі впорядкування, тобто бінарні повні відношення, які використовуються для цільової орієнтації гравця. Як відомо [1], відношення переваги $R_i, i \in N$, породжують відношення домінування $S_i = \overline{(R_i)^{-1}}$ та байдужості $I_i = R_i \cap R_i^{-1}, i \in N$.

Загальна гра G узагальнює гру GU у нормальній формі $(X_i, u_i; i \in N)$ з функціями виграшу гравців, оскільки кожна функція виграшу $u_i: X \rightarrow E^1$ породжує відношення домінування $S_i (u_i(x) > u_i(y) \Rightarrow x S_i y, \forall x, y \in X)$, яке є слабким порядком [1]. Відношення домінування S_i гравця $i \in N$, у свою чергу, породжує відношення байдужості $I_i = \overline{S_i} \cap S_i^{-1}$ і переваги $R_i = \overline{S_i^{-1}}$, яке є повним, а тому є нестрогим порядком.

Будемо вважати, що гра відбувається в умовах повної інформованості. Тобто кожен гравець знає не тільки своє відношення переваги, але й відношення переваги інших гравців. Будемо також вважати, що гравці діють некооперативно,

Mashchenko S.O., C.Sci(Phys-Math.), Ass.Prof.

Individual rationality of individual-optimum equilibriums

Conditions of individual rationality of individual-optimum equilibriums in non-cooperative games, which are set by both relations of players preferences and functions of their winning, are considered.

Key words: the general game, the Nesh's equilibrium, the individually-optimum equilibrium.

тобто кожен вибирає свої стратегії самостійно і незалежно від інших.

Одним із принципів оптимальності в некооперативних іграх є концепція індивідуальної оптимальності [2,3], відповідно до якої кожен гравець вибирає свої стратегії індивідуально (некооперативно), але враховує інтереси всіх інших гравців (компроміс заради вирішення конфлікту).

У цій роботі буде розглядатися поняття індивідуально-оптимальної рівноваги та його зв'язок з принципом індивідуальної раціональності як у загальних іграх, так і в іграх з функціями виграшу гравців.

Представимо відношення переваги $R_i, i \in N$, гравців агрегованим відношенням $Q = \bigcap_{i \in N} R_i$. Незважаючи на те, що усі відношення $R_i, i \in N$, є повними, агреговане відношення Q вже може не бути нестрогим впорядкуванням. Нехай T - відношення домінування, індуковане агрегованим відношенням переваги Q , тоді

$$T = Q \setminus Q^{-1} = Q \cap \overline{\left(\bigcap_{i \in N} R_i^{-1}\right)} = \bigcup_{i \in N} (Q \cap S_i), \quad (1)$$

де $S_i = \overline{R_i^{-1}}$ - відношення домінування гравця $i \in N$, індуковане відношенням переваги R_i .

Будемо говорити, що ситуації $x, y \in X$ знаходиться у відношенні NE -домінування гравця $i \in N$, що породжене агрегованим відношенням домінування T , і позначати це через $x T^{NE(i)} y$, якщо $x T y \wedge (x_{N \setminus i} = y_{N \setminus i})$. Ситуацію x^* будемо називати сильною

індивідуально-оптимальною рівновагою загальної гри G (їх множину будемо позначати через $SIOE$), якщо $y \overline{T^{NE(i)}} x^*, \forall y \in X, \forall i \in N$.

Існування функцій виграшу гравців дає більш широкі можливості для дослідження сильних індивідуально-оптимальних рівноваг.

Будемо говорити, що ситуація y гри GU з функціями виграшу знаходиться у відношенні NE -домінування гравця $i \in N$ до ситуації x і позначати це через $y \succ^{NE(i)} x$, якщо $u_j(y, x_{-j}) \geq u_j(x), \forall j \in N$ та $\exists k \in N$, для якого $u_k(y, x_{-k}) > u_k(x)$.

Ситуацію x^* будемо називати сильною індивідуально-оптимальною рівновагою гри GU з функціями виграшу гравців, якщо $\exists i \in N, \forall y \in X: y \not\succ^{NE(i)} x^*$.

Стабільність індивідуально-оптимальних рівноваг є обґрунтованою в одноцільовій грі, коли у всіх гравців ціль – одна, але вона характеризується для кожного гравця своїм відношенням переваги. В ідеалі, ця ціль, полягає у виборі гравцями своїх стратегій так, щоб склалася найбільш переважна ситуація для усіх гравців. Оскільки досить часто таких ситуацій не існує, то гравці згодні піти на компроміс, заради спільної цілі. Але у силу того, що гравці діють не кооперативно, кожен бачить цей компроміс по своєму, що приводить до конфлікту.

В тому і лише в тому випадку, коли основою угоди між гравцями буде сильна індивідуально-оптимальна рівновага, зміна будь-яким гравцем $i \in N$, погодженої з іншими гравцями, стратегії x_i^* на іншу, яка є небайдужою до x_i^* , приведе до домінованої ситуації хоча б для одного гравця. Тобто ціль гравця $i \in N$, яка складається з його особистих інтересів та інтересів інших гравців, які він враховує, може бути не задоволеною та досягнутий у ході попередніх переговорів компроміс може бути зруйнованим.

Представимо бінарні відношення переваги гравців $R_i, i \in N$, які за постановкою гри G є повними, агрегованим відношенням $R = \bigcup_{i \in N} R_i$. Очевидно, що відношення R буде також повним, а тому буде нестрогим впорядкуванням.

Нехай S – відношення домінування, індуковане агрегованим відношенням переваги R , тоді $S = R^{-1} = (\bigcup_{i \in N} R_i)^{-1} = \bigcap_{i \in N} (R_i)^{-1} = \bigcap_{i \in N} S_i$, де $S_i = (R_i)^{-1}$ – відношення домінування гравця

$i \in N$, індуковане відношенням переваги R_i .

Будемо говорити, що ситуації $x, y \in X$ знаходиться у відношенні сильного NE -домінування гравця $i \in N$, що породжене агрегованим відношенням домінування S , і позначати це $x S^{NE(i)} y$, якщо $x S y \wedge (x_{-i} = y_{-i})$.

Ситуацію x^* будемо називати слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою гри G (їх множину будемо позначати через $WIOE$), якщо $y S^{NE(i)} x^*, \forall y \in X, \forall i \in N$.

У випадку існування функцій виграшу ці означення набувають наступного вигляду.

Будемо говорити, що ситуація y гри GU з функціями виграшу гравців знаходиться у відношенні сильного NE -домінування гравця $i \in N$ до ситуації x і позначати це через $y \succ^{NE(i)} x$, якщо $u_j(y, x_{-j}) > u_j(x), \forall j \in N$.

Ситуацію x^* будемо називати слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою гри GU з функціями виграшу гравців, якщо $\exists i \in N, \forall y \in X: y \not\succ^{NE(i)} x^*$.

Застосування слабких індивідуально-оптимальних рівноваг у одноцільовій грі мотивується таким же сценарієм гри, що і сильних. Але у тому випадку, якщо 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 домінувати x^* хоча б для одного гравця (зокрема і його самого). Тому досягнутий у ході попередніх переговорів компроміс, кожного гравця з іншими, може бути зруйнованим.

Узагальнення таких понять класичних ігор, як обережні стратегії гравців та множина індивідуально-раціональних ситуацій гри, для ігор у відношеннях переваги гравців дозволяє сформулювати відповідні властивості індивідуально-оптимальних рівноваг. Для доведення цих властивостей будемо користуватися відомими теоремами [1; 4] про існування максимального елементу (мажоранти) множини за бінарним відношенням, які сформулюємо як лема.

Лема 1. Довільне відношення переваги R має максимальний елемент на скінченній множині X тоді й лише тоді, коли транзитивне замикання $\widehat{R^A}$ асиметричної частини $R^A = R \setminus R^{-1}$

відношення R є строгим частковим впорядкуванням.

Лема 2. Відношення домінування S (асиметричне) має максимальний елемент на скінченній множині X тоді й лише тоді, коли транзитивне замикання $\hat{S}$ відношення S є строгим частковим впорядкуванням.

На нескінченних множинах відомі [1] умови існування максимальних елементів носять достатній характер. Для їх формалізації нагадаємо основні поняття.

Відношення переваги R на топологічному просторі E називається напівзамкненим зверху (знизу), якщо для $\forall x \in E$ його верхній переріз – множина $\{y \in E | yRx\}$ (його нижній переріз – множина $\{y \in E | xRy\}$) є замкнутою у E .

Відношення домінування S на топологічному просторі E називається напіввідкритим знизу (зверху), якщо для $\forall x \in E$ нижній переріз – множина $\{y \in E | xSy\}$ (верхній переріз – множина $\{y \in E | ySx\}$) є відкритою.

Відношення домінування S (переваги R) на топологічному просторі E називається відкритим (замкненим), якщо його графік – множина $\{(x, y) \in E | xSy\}$ ($\{(x, y) \in E | xRy\}$) є відкритою (замкнутою) у топології добутку $E \times E$.

Лема 3. Якщо відношення домінування S у компактному топологічному просторі E ситуацій є напіввідкритим знизу, а для будь-якої скінченної множини ситуацій $X \subset E$ існує максимальний елемент за відношенням S , то на E існує максимальний елемент за S .

Позначимо множину гарантованих відповідей доповнювальної коаліції гравця $i \in N$ на його фіксовану стратегію $x_i \in X_i$ через

$$V_i(x_i) = \bigcup_{x_{-i} \in X_{-i}} \{x \in X | x \bar{S}_i(x_i, x_{-i}), \forall x_{-i} \in X_{-i}\}.$$

Теорема 1. Нехай відношення домінування S_i гравця $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є напіввідкритим зверху. Для того, щоб множина $V_i(x_i)$ гарантованих відповідей доповнювальної коаліції на фіксовану стратегію $x_i \in X_i$ гравця $i \in N$ у грі G була непорожньою, достатньо, щоб для будь-якої скінченної множини ситуацій $X \subset E$ транзитивне замикання $\hat{S}_i$ відношення домінування S_i було строгим частковим впорядкуванням (транзитивним та асиметричним

відношенням).

Доведення. Розглянемо множину мінорат $M_-(S_i) = \{x \in X | x \bar{S}_i y, \forall y \in E\}$ множини ситуацій гри за відношенням домінування S_i гравця $i \in N$ у компактному топологічному просторі E . Очевидно, що для будь-якої фіксованої стратегії $x_i \in X_i$ гравця $i \in N$ множина $V_i(x_i) \supseteq M_-(S_i)$. Тому для доведення теореми достатньо показати $M_-(S_i) \neq \emptyset$.

Нехай $X \subset E$ – довільна скінченна множина, а $\hat{S}_i = \bigcap_{k \in K} S_i^k$ – транзитивне замикання відношення S_i , де $S_i^k, k \in K$ – усі, які визначені на X , транзитивні відношення, що $S_i^k \supseteq S_i, k \in K$. Оскільки $S_i^k \supseteq S_i \Leftrightarrow (S_i^k)^{-1} \supseteq S_i^{-1}$ і відношення $(S_i^k)^{-1}$ є транзитивним та асиметричним для усіх $k \in K$, то транзитивне замикання відношення S_i^{-1} буде визначеним як $\widehat{S_i^{-1}} = \bigcap_{k \in K} (S_i^k)^{-1} = \hat{S}_i$ і буде строгим частковим впорядкуванням. Тому з леми 1 випливає, що множина мажорант $M_+(S_i^{-1}) = \{x \in X | y \bar{S}_i^{-1} x, \forall y \in X\} \neq \emptyset$. Звідси оскільки відношення S_i є напіввідкритим зверху, а S_i^{-1} є напіввідкритим знизу у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G , то за лемою 3 на E існує максимальний елемент (мажоранта) за відношенням S_i^{-1} . Таким чином, $M_+(S_i^{-1}) = \{x \in X | y \bar{S}_i^{-1} x, \forall y \in E\} \neq \emptyset$. Звідси випливає, що множина мінорант на E

$$M_-(S_i) = \{x \in X | x \bar{S}_i y, \forall y \in E\} = M_+(S_i^{-1}) \neq \emptyset.$$

Таким чином, $M_-(S_i) \neq \emptyset$. Тому $V_i(x_i) \supseteq M_-(S_i) \neq \emptyset$. Теорему доведено.

Будемо говорити, що стратегія y_i гравця $i \in N$ гри G домінує за гарантованими відповідями його доповнювальної коаліції стратегію x_i і позначати це через $y_i \triangleright x_i$, якщо для $\forall x \in V_i(x_i), \forall y \in V_i(y_i) \neq \emptyset$ мають місце відношення $y \bar{S}_i x$.

Стратегію $\hat{x}_i \in X_i$ гравця $i \in N$ гри G будемо називати обережною у відношеннях переваги, якщо вона не домінується за гарантованими відповідями його доповнювальної коаліції жодною іншою, тобто $\nexists y_i \in X_i$, що $y_i \triangleright \hat{x}_i$. Позначимо через O_i – множину обережних у

відношення переваги стратегій гравця $i \in N$.

Це узагальнення обережних стратегій дозволяє узагальнити поняття множини індивідуально-раціональних ситуацій гри G у відношеннях переваги.

Нехай множини обережних стратегій гравців у гри G є непорожніми. Ситуацію $x^* \in X$ будемо називати індивідуально-раціональною у відношеннях переваги у гри G , якщо для кожного гравця $i \in N$ ситуація x^* не домінується будь-якою гарантованою відповіддю його доповнювальної коаліції на будь-яку обережну стратегію.

Позначимо множину індивідуально-раціональних ситуацій одноцільової гри G у відношеннях переваги через IR . Тоді для $\forall i \in N$

$$x^* \in IR \Leftrightarrow x\bar{S}_i x^*, \forall x \in V_i(\hat{x}_i), \forall \hat{x}_i \in O_i \neq \emptyset. \quad (3)$$

Слід відмітити, що умова не порожності множини обережних стратегій гравців є принциповою, оскільки у протилежному випадку не існує індивідуально-раціональної (обережної) поведінки гравців і це поняття втрачає сенс.

Справедлива така теорема.

Теорема 2. Нехай відношення домінування S_i гравців $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є відкритими (неперервними). Для того, щоб множина індивідуально-раціональних ситуацій гри G була непорожньою, тобто $IR \neq \emptyset$, достатньо, щоб для будь-якої скінченної множини ситуацій $X \subset E$ і для кожного гравця $i \in N$ транзитивне замикання $\hat{S}_i$ відношення домінування S_i було строгим частковим впорядкуванням.

Доведення. Оскільки відношення домінування S_i гравців $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є відкритими, то вони є напіввідкритим зверху. Звідси, за теоремою 1, для $\forall i \in N \forall x_i \in X_i$ множина $V_i(x_i) \neq \emptyset$. Тому множини $V_i = \bigcup_{x_i \in X_i} V_i(x_i) \neq \emptyset, i \in N$. Для гравця

$i \in N$ розглянемо наступну множину

$$A_i = \{x^* \in X \mid y\bar{S}_i x^*, \forall y \in V_i\}. \text{ Оскільки } V_i \subseteq E, \text{ то}$$

зрозуміло, що множина мажорант на усьому просторі E за відношенням S_i буде включатися у A_i . Тобто $M_i(S_i) \subseteq A_i$. Оскільки на будь-якій скінченній множині ситуацій $X \subset E$, за умовами теореми, транзитивне замикання $\hat{S}_i$ відношення домінування S_i є строгим частковим впорядкуванням, то за лемою 2 одержимо

$\{x \in X \mid y\bar{S}_i x, \forall y \in X\} \neq \emptyset$. Звідси, оскільки відношення домінування S_i гравців $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є відкритими, то вони є напіввідкритим знизу, а тому за лемою 3 на E існує максимальний елемент. Тому $M_i(S_i) \neq \emptyset$ і $A_i \neq \emptyset$.

Нехай ситуація $x^* \in A$. Покажемо, що $x^* \in IR$. Припустимо супротивне, що $x^* \notin IR$. Тоді за означенням $\exists i \in N, \exists \hat{x}_i \in O_i, \exists y \in V_i(\hat{x}_i)$, що $y\bar{S}_i x^*$. Оскільки $O_i \subseteq X_i$, то очевидно $y \in V_i = \bigcup_{x_i \in X_i} V_i(x_i)$. Одержали суперечність

$$\text{припущенню } x^* \in A = \{x^* \in X \mid y\bar{T}x^*, \forall y \in V\}.$$

Таким чином, $x^* \in IR$, а тому $IR \neq \emptyset$. Теорему доведено.

Розглянемо зв'язок множин індивідуально-оптимальних та індивідуально-раціональних ситуацій гри G .

Теорема 3. Якщо відношення переваги R_i гравців $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є замкненими (неперервними) та транзитивними, то існує непорожній перетин множин слабких індивідуально-оптимальних та індивідуально-раціональних ситуацій гри G , тобто $WIOE \cap IR \neq \emptyset$.

Доведення. Спочатку покажемо, що за умовами теореми $IR \neq \emptyset$. Оскільки за умовами теореми відношення переваги R_i гравця $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є замкненим та транзитивним, а за означенням гри G є також і повним, то відношення домінування $S_i = \bar{R}_i^{-1}$ є двоїстим до нього, відкритим, асиметричним та негатранзитивним, а тому і транзитивним [1]. Звідси транзитивне замикання $\hat{S}_i = S_i$ буде строгим частковим впорядкуванням. Тоді за теоремою 2 одержимо $IR \neq \emptyset$.

Тепер покажемо, що $WIOE \cap IR \neq \emptyset$. Оскільки для кожного гравця $i \in N$ відношення домінування $S_i = \bar{R}_i^{-1}$ є транзитивним та відкритим, то агреговане відношення домінування $S = \bigcap_{i \in N} S_i$ буде також транзитивним та відкритим, тобто буде строгим частковим впорядкуванням напіввідкритим знизу у компактному топологічному просторі E . Тому за лемою 2 для кожної скінченної множини $X \subset E$

завжди існують мажоранти за відношенням S . Таким чином, за лемою 3 вони існують на усьому просторі E , зокрема на множині індивідуально-раціональних ситуацій IR .

Позначимо через x^* деяку мажоранту множини індивідуально-раціональних ситуацій гри G за агрегованим відношенням домінування $S = \bigcap_{i \in N} S_i$, тобто $y \bar{S} x^*, \forall y \in IR$. Припустимо

супротивне, що $x^* \notin WIOE$. Тоді, за означенням, $\exists \hat{y} \in X, \exists i \in N$, що $\hat{y} S^{NE(i)} x^*$. З рівності $S^{NE(i)} = \bigcap_{j \in N} S_j^{NE(i)}$ очевидно випливає, що

$\hat{y} S_j^{NE(i)} x^*, \forall j \in N$. Оскільки за означенням відношення NE -домінування має місце відношення $x S_j^{NE(i)} y \Leftrightarrow x S_j y \wedge (x_{N \setminus i} = y_{N \setminus i})$, а за означенням відношення NE -переваги $x Q^{NE(i)} y \Leftrightarrow x Q y \vee (x_{N \setminus i} \neq y_{N \setminus i})$, то одержимо $\exists i \in N \exists y_i \in X_i$, що $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) S_j x^*, j \in N$, а звідси очевидно має місце відношення

$$(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) R_j x^*. \quad (4)$$

Якщо тепер покажемо, що ситуація $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) \in IR$, то одержимо суперечність і теорему буде доведено. Дійсно, оскільки $x^* \in IR$, то за (1) $y \bar{S}_j x^*$ для $\forall x \in V_i(\hat{x}_i), \forall \hat{x}_i \in O_i, j \in N$. Звідси (на підставі повноти відношення переваги $R_j = \bar{S}_j^{-1}$ будь-якого гравця $j \in N$) одержимо $x^* R_j y$ для $\forall x \in V_i(\hat{x}_i), \forall \hat{x}_i \in O_i, j \in N$. Разом з відношенням (3) одержимо $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) R_j x^* \& x^* R_j y$ для $\forall x \in V_i(\hat{x}_i), \forall \hat{x}_i \in O_i, j \in N$. Оскільки за умовою теореми відношення переваги $R_j, j \in N$, є транзитивними, то $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) R_j y$ для $\forall x \in V_i(\hat{x}_i), \forall \hat{x}_i \in O_i, j \in N$ і за (1) ситуація $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) \in IR$. Одержали суперечність. Теорему доведено.

Теорема 4. Якщо відношення переваги R_i гравців $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є замкненими (неперервними) та транзитивними, а агреговане відношення домінування $T = \bigcup_{i \in N} (Q \cap S_i)$ є напіввідкритим знизу, то існує непорожній перетин множин сильних індивідуально-оптимальних та індивідуально-раціональних ситуацій гри G , тобто $SIOE \cap IR \neq \emptyset$.

Доведення. Спочатку покажемо, що за умовами теореми $IR \neq \emptyset$. Оскільки за умовами теореми відношення переваги R_i гравця $i \in N$ у компактному топологічному просторі E ситуацій гри G є замкненими та транзитивним, а за постановкою гри G є також і повним, то відношення домінування $S_i = \bar{R}_i^{-1}$ є двоїстим до нього, відкритим, асиметричним та негатранзитивним, а тому і транзитивним [1]. Звідси транзитивне замикання $\bar{S}_i = S_i$ буде строгим частковим впорядкуванням. Тоді за теоремою 2 одержимо $IR \neq \emptyset$.

Тепер покажемо, що $SIOE \cap IR \neq \emptyset$. Оскільки для кожного гравця $i \in N$ відношення переваги R_i є транзитивним та замкненим, то агреговане відношення переваги $Q = \bigcap_{i \in N} R_i$ буде також транзитивним. Звідси, побудована за формулою (1), його асиметрична частина $Q^A = Q \cap \bar{Q}^{-1} = T = \bigcup_{i \in N} (Q \cap S_i)$ буде строгим частковим впорядкуванням напіввідкритим знизу у компактному топологічному просторі E . Тому за лемою 2 для кожної скінченної множини $X \subset E$ завжди існують мажоранти за відношенням T , а тому за лемою 3 вони існують на усьому просторі E , зокрема на множині індивідуально-раціональних ситуацій IR . Позначимо через x^* деяку мажоранту множини індивідуально-раціональних ситуацій гри G за агрегованим відношенням домінування $T = \bigcup_{i \in N} (Q \cap S_i)$, тобто $y \bar{T} x^*, \forall y \in IR$.

Припустимо супротивне, що $x^* \notin SIOE$. Тоді за означенням $\exists \hat{y} \in X, \exists i \in N$, що $\hat{y} T^{NE(i)} x^*$. Звідси випливає, що $\hat{y} (\bigcup_{j \in N} (Q^{NE(i)} \cap S_j^{NE(i)})) x^*$. Оскільки за означенням відношення NE -домінування $x S_j^{NE(i)} y \Leftrightarrow x S_j y \wedge (x_{N \setminus i} = y_{N \setminus i})$, а за означенням відношення NE -переваги $x Q^{NE(i)} y \Leftrightarrow x Q y \vee (x_{N \setminus i} \neq y_{N \setminus i})$, то одержимо $\exists i \in N \exists y_i \in X_i$, що

$$(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) (\bigcup_{j \in N} (Q \cap S_j)) x^*. \quad (5)$$

Звідси за формулою (1) випливає $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) T x^*$. Якщо тепер покажемо, що ситуація $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) \in IR$, то одержимо суперечність і теорему буде доведено. Дійсно, оскільки $x^* \in IR$, то за (1) $y \bar{S}_j x^*$ для $\forall x \in V_i(\hat{x}_i), \forall \hat{x}_i \in O_i, j \in N$.

Звідси (на підставі повноти відношення переваги $R_j = S_j^{-1}$ будь-якого гравця $j \in N$) одержимо $x^* R_j y$ для $\forall x \in V_j(\hat{x}_j), \forall \hat{x}_j \in O_j, j \in N$. Разом з (5), одержимо $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) (\bigcup_{j \in N} (Q \cap S_j)) x^* R_j y$ для $\forall x \in V_j(\hat{x}_j), \forall \hat{x}_j \in O_j, j \in N$. Звідки випливає $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) Q x^* R_j y$ для $\forall x \in V_j(\hat{x}_j), \forall \hat{x}_j \in O_j, j \in N$. Оскільки агреговане відношення переваги $Q = \bigcap_{j \in N} R_j$, то одержимо $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) R_j x^* R_j y$ для $\forall x \in V_j(\hat{x}_j), \forall \hat{x}_j \in O_j, j \in N$. Оскільки за умовою теореми відношення переваги $R_j, j \in N$ є транзитивними, то $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) R_j y$ для $\forall x \in V_j(\hat{x}_j), \forall \hat{x}_j \in O_j, j \in N$, і за (3) ситуація $(\hat{y}_i, x_{N \setminus i}^*) \in IR$. Одержали суперечність. Теорему доведено.

Дослідимо питання індивідуальної раціональності індивідуально-оптимальних ситуацій гри GU із заданими функціями виграшу гравців.

Нагадаємо [5], що у цьому випадку множина індивідуально-раціональних ситуацій гри визначається наступним чином: $\hat{x} \in IR \Leftrightarrow u_i(\hat{x}) \geq a_i = \sup_{x_i \in X_i} \inf_{x_{N \setminus i} \in X_{N \setminus i}} u_i(x_i, x_{N \setminus i}), i \in N$.

Справедлива наступна теорема.

Теорема 5. Якщо множина X ситуацій гри є непорожнім компактом, а функції виграшу гравців $u_i, i \in N$, є неперервними, то $SIOE \cap IR \neq \emptyset$.

Доведення. За відомою теоремою [5] про непорожність множини індивідуально-раціональних ситуацій множина $IR \neq \emptyset$ і є компактом. Розглянемо функцію $f(x) = \sum_{j \in N} u_j(x)$, для якої за умов теореми завжди існує $x^* \in \text{Arg max}_{x \in IR(GU)} f(x) \neq \emptyset$ (за відомою з аналізу [6] теоремою Вейрштраса).

Припустимо супротивне, $x^* \notin SIOE$. Тоді $\exists x \in X: x \succ x^*$. Звідси $\exists i \in N: u_i(x_i, x_{N \setminus i}^*) \geq u_i(x^*)$ $\forall j \in N$ та $\exists k \in N: u_k(x_i, x_{N \setminus i}^*) > u_k(x^*)$. Узявши суму цих нерівностей, одержимо $f(x) = \sum_{j \in N} u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) > \sum_{j \in N} u_j(x^*) = f(x^*)$.

Оскільки $x^* \in IR$ і тому $u_j(x^*) \geq a_j, j \in N$, то $u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) \geq a_j, \forall j \in N$. Таким чином, ситуація

$x = (x_i, x_{N \setminus i}^*) \in IR$. Одержали суперечність. Теорему доведено.

Оскільки за теоремою 1 $SIOE \subseteq WIOE$, то є справедливим наступний наслідок з теореми 3.

Наслідок. Якщо множина X ситуацій гри є непорожнім компактом, а функції виграшу гравців $u_i, i \in N$, є неперервними, то $WIOE \cap IR \neq \emptyset$.

Зауваження. Теорема 5 та її наслідок залишаються вірними також у разі скінченних множин стратегій гравців у гри GU .

Таким чином, теореми 3-5 встановлюють умови існування індивідуально-раціональних індивідуально-оптимальних рівноваг, як для загальної гри G , так і для гри UG із заданими функціями виграшу гравців.

Індивідуальна раціональність індивідуально-оптимальних рівноваг означає, що у таких ситуаціях у гравців повинні бути відсутні підстави:

- відійти від компромісу з іншими гравцями і переслідувати лише свої власні цілі;
- ігнорувати свою інформованість щодо функцій виграшу інших гравців і діяти обережно.

Список використаних джерел

1. Юдин Д.Б. Вычислительные методы теории принятия решений. – М. : Наука, 1989.
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. Кирута А.Я., Рубинов А.М., Яновская Е.Б. Оптимальный выбор распределений в сложных социально-экономических задачах. – Л. : Наука, 1980.
5. Мулен Э. Теория игр с примерами из математической экономики. – М. : Мир, 1985.
6. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. – М. : Наука, 1986.

Надійшла до редколегії 10.03.10

УДК 519.21

Мензатов *Л.Ш., аспірант,
Лебедєв *Є.О., д.ф.-м.н., проф.

Максимізація прибутку та мінімізація ризику для мереж Ерланга

Для зіркоподібних мереж Ерланга розглянуті задачі максимізації прибутку та мінімізації ризику. Запропоновано алгоритм підрахунку цільових функцій оптимізаційних задач, що розглядаються. Наведено числовий приклад пошуку оптимальних керуючих параметрів.

Ключові слова: мережа Ерланга, стаціонарний режим, максимізація прибутку, мінімізація ризику.

*E-mail: leb@unicyb.kiev.ua

Статтю представив д.т.н., проф. Акіменко В.В.

При роботі стільникових мереж зв'язку часто виникає задача оптимального керування спільним потоком вимог на зв'язок. Цей потік генерується абонентами, які доступні, скажімо, для "r" базових станцій сусідніх зон обслуговування абонентів.

Menzatov* L.Sh., graduate student,

Lebedev* E.A., doctor of physics and mathematics sciences, prof.

Income maximization and risk minimization in Erlang's networks

For star-shaped Erlang's networks the problems of income maximization and risk minimization are considered. To compute the goal functions of the optimization problems under consideration a scheme is proposed. A numerical example in which the optimal control parameters are found is presented.

Key words: Erlang's network, stationary regime, income maximization, risk minimization.

Щоб перекласти цю ситуацію на математичну основу, використаємо модель зіркоподібної мережі, яка складається з "r" систем Ерланга з втратами ([1], стор. 49).

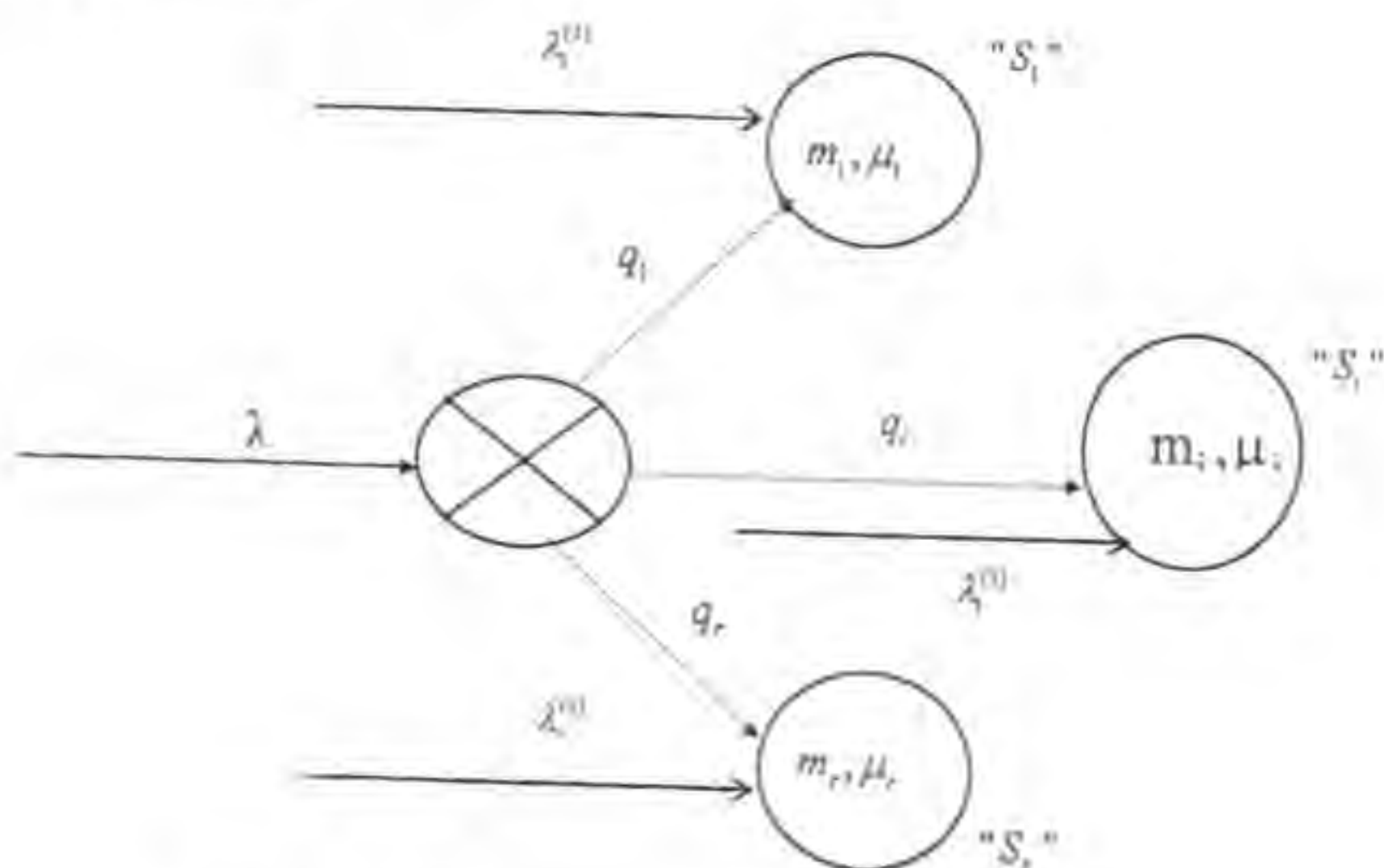


Рис. 1. Зіркоподібна модель мережі зв'язку

Обслуговування вимог в i -й системі S_i , $i=1,2,\dots,r$, відбувається на m_i обслуговуючих приладах, час обслуговування розподілений за показниковим законом з параметром μ_i . Якщо усі прилади зайняті, вимога втрачається і не отримує обслуговування. Вхідний потік $\nu_i(t)$ на i -ий вузол є сумою двох потоків. Перший потік $\nu_i^{(1)}(t)$ утворюють абоненти, які можуть бути обслужені тільки в i -ому вузлі. Будемо вважати цей потік пуассонівським з параметром $\lambda_i^{(1)}$. Другий потік $\nu_i^{(2)}(t)$ представляє собою частку загального пуассонівського потоку $\nu(t)$ інтенсивності λ , яка може змінюватись у відповідності до керуючих параметрів $q_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^r q_i = 1$.

Вважається, що у момент приходу вимоги загального потоку вона з імовірністю q_i спрямовується на обслуговування в i -ий вузол мережі. Таким чином $\nu_i^{(2)}(t)$ теж потік пуассонівського типу з інтенсивністю $\lambda_i^{(2)} = \lambda q_i$.

Нехай $Q_i(t) \in \{0, 1, \dots, m_i\}$ - число зайнятих приладів у i -ому вузлі мережі в момент часу t . В силу зроблених припущень при фіксованих параметрах $q_1, q_2, \dots, q_r$ процеси $Q_i(t)$ є незалежними процесами народження і загибелі, для яких завжди існує стаціонарний режим. Стаціонарні ймовірності $\pi_k^{(i)}$, $k=0, 1, \dots, m_i$, можуть бути підраховані за формулами Ерланга

$$\pi_k^{(i)} = \frac{\rho_i^k}{k!} \left\{ \sum_{s=0}^{m_i} \frac{\rho_i^s}{s!} \right\}^{-1},$$

де $\rho_i = (\lambda_i^{(1)} + \lambda_i^{(2)}) / \mu_i = (\lambda_i^{(1)} + \lambda q_i) / \mu_i$ - завантаження i -го вузла мережі. У

подальшому через Q_i будемо позначати число зайнятих приладів у i -ому вузлі у стаціонарному режимі.

Позначимо через C_i - прибуток, пов'язаний з обслуговуванням однієї вимоги в i -ому вузлі. Тоді $\sum_{i=1}^r C_i M Q_i$ - середній прибуток у стаціонарному режимі від роботи всієї мережі. Звідси маємо наступну задачу максимізації прибутку в мережі:

$$M(q_1, \dots, q_r) = \sum_{i=1}^r C_i M Q_i \rightarrow \max, \quad (1)$$

$$q_i \geq 0, i=1, 2, \dots, r, \sum_{i=1}^r q_i = 1. \quad (2)$$

Оскільки

$$\begin{aligned} M Q_i &= \sum_{k=1}^{m_i} k \pi_k^{(i)} = \rho_i \sum_{k=1}^{m_i} \frac{\rho_i^{k-1}}{(k-1)!} \left\{ \sum_{s=0}^{m_i} \frac{\rho_i^s}{s!} \right\}^{-1} = \\ &= \rho_i (1 - \pi_{m_i}^{(i)}), \end{aligned}$$

то цільова функція має вигляд

$$M(q_1, \dots, q_r) = \sum_{i=1}^r C_i \rho_i (1 - \pi_{m_i}^{(i)}) \quad (3)$$

Аналогічно тому, як визначають ризик у фінансовому аналізі ([2], стор. 140-171), будемо вважати, що ризик при отриманні прибутку у стаціонарному режимі оцінюється

дисперсією $D(q_1, \dots, q_r) = D \sum_{i=1}^r C_i Q_i$. Таким

чином, приходимо до наступної оптимізаційної задачі:

$$D(q_1, \dots, q_r) \rightarrow \min, \quad (4)$$

$$M(q_1, \dots, q_r) = M_0, \quad (5)$$

$$q_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad \sum_{i=1}^r q_i = 1. \quad (6)$$

Використовуючи стаціонарні імовірності, маємо подання

$$\begin{aligned} M Q_i(Q_i - 1) &= \sum_{k=2}^{m_i} k(k-1) \pi_k^{(i)} = \\ &= \rho_i^2 \sum_{k=2}^{m_i} \frac{\rho_i^{k-2}}{(k-2)!} \left\{ \sum_{s=0}^{m_i} \frac{\rho_i^s}{s!} \right\}^{-1} = \\ &= \rho_i^2 (1 - \pi_{m_i}^{(i)} - \pi_{m_i-1}^{(i)}). \end{aligned}$$

В рамках зроблених припущень

$$\begin{aligned} D(q_1, \dots, q_r) &= \sum_{i=1}^r C_i^2 D Q_i = \sum_{i=1}^r C_i^2 [M Q_i(Q_i - 1) + \\ &+ M Q_i - (M Q_i)^2] = \\ &= \sum_{i=1}^r C_i^2 [\rho_i^2 (1 - \pi_{m_i}^{(i)} - \pi_{m_i-1}^{(i)}) + \\ &+ \rho_i (1 - \pi_{m_i}^{(i)}) - \rho_i^2 (1 - \pi_{m_i}^{(i)})^2] \end{aligned}$$

Після нескладних перетворень приходимо до подання цільової функції в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} D(q_1, \dots, q_r) &= \\ &= \sum_{i=1}^r C_i^2 \rho_i [(1 - \pi_{m_i}^{(i)}) (1 + \rho_i \pi_{m_i}^{(i)}) - m_i \pi_{m_i}^{(i)}]. \quad (7) \end{aligned}$$

Оптимізаційні задачі (1) - (2), (4) - (6) є аналогом відповідних задач лінійного і квадратичного програмування для багатоканальних мереж, що розглядалися в роботі [3]. Однак тепер функціонали $M(q_1, \dots, q_r)$ і $D(q_1, \dots, q_r)$ є значно складнішими. З (3) і (7) випливає, що для їх обчислення слід мати алгоритм підрахунку стаціонарних імовірностей $\pi_{m_i}^{(i)} = \pi_{m_i}^{(i)}(q_1, \dots, q_r)$ (імовірність відмови в обслуговуванні у i -ому вузлі) для кожного вузла мережі.

В зв'язку з цим побудуємо алгоритм підрахунку ерлангівських імовірностей $\pi_k = \frac{\rho^k}{k!} \left\{ \sum_{i=0}^m \frac{\rho^i}{i!} \right\}^{-1}$, $k = 0, 1, \dots, m$, який буде стійким для будь-яких значень параметрів $\rho > 0$, m .

На перший погляд проблем з обчисленням імовірностей π_k , $k = 0, 1, \dots, m$, немає. Дійсно, нехай $a_k = \rho^k / k!$, $k = 0, 1, \dots$. Тоді

$$a_0 = 1, a_k = \frac{\rho}{k} a_{k-1} \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (8)$$

$$\pi_k = a_k \{ a_0 + a_1 + \dots + a_m \}^{-1}, \quad (9)$$

представляє собою алгоритм рекурентного типу для обчислення ерлангівських імовірностей. Однак виявилось, що часто підстановка реальних параметрів m і ρ при обчисленнях за формулами (8), (9) приводить до переповнення комп'ютера. Розберемось у причинах цього явища.

Лема 1. Послідовність $a = \{a_k\}_{k=0}^{\infty}$ в залежності від параметра ρ має такі властивості:

1) якщо $0 < \rho \leq 1$, то при $k \geq 1$ послідовність "а" монотонно спадає;

2) якщо $\rho > 1$ і $\{\rho\} \neq 0$ ($\{\cdot\}$ - дробова частина числа), то послідовність а при $k = 0, 1, \dots, [\rho]$ ($[\cdot]$ - ціла частина числа) монотонно зростає, при $k = [\rho], [\rho] + 1, \dots$ монотонно спадає і максимальне значення досягається в точці $k = [\rho]$;

3) якщо $\rho > 1$ і ρ є цілим числом, то послідовність а при $k = 0, 1, \dots, \rho - 1$ монотонно зростає, при $k = \rho, \rho + 1, \dots$ монотонно спадає і максимальне значення досягається у двох точках $k_1 = \rho - 1, k_2 = \rho$.

Щоб перевірити твердження леми 1, достатньо проаналізувати a_k / a_{k-1} . Для ерланговських імовірностей як наслідок маємо наступний результат.

Наслідок 1. В залежності від параметрів ρ і m $\pi_k, k = 0, 1, \dots, m$ мають такі властивості:

1) якщо $0 < \rho \leq 1$, то $\pi_0 \geq \pi_1 > \dots > \pi_m$;

2) якщо $\rho > 1$ і $\{\rho\} \neq 0$, то при $m \leq [\rho]$

$\pi_0 < \pi_1 < \dots < \pi_m$, а при $m > [\rho]$

$$\pi_0 < \pi_1 < \dots < \pi_{[\rho]}.$$

$$\pi_{[\rho]} > \pi_{[\rho]+1} > \dots > \pi_m;$$

3) якщо $\rho > 1$ і ρ є цілим числом, то при $m \leq \rho$

$\pi_0 < \pi_1 < \dots < \pi_{m-1} \leq \pi_m$, а при $m > \rho$

$$\pi_0 < \pi_1 < \dots < \pi_{\rho-1} = \pi_{\rho},$$

$$\pi_{\rho} > \pi_{\rho+1} > \dots > \pi_m.$$

Використовуючи формулу Стірлінга при $\rho > 1$, можна оцінити максимум $a^* = a_{[\rho]}$ послідовності а.

Лема 2. Коли $\rho > 1$, то послідовність а має максимум a^* , який досягається для $k = [\rho]$ і справедлива оцінка

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{[\rho]}}{\sqrt{[\rho]}} \exp\left(-\frac{1+6\{\rho\}^2}{12[\rho]}\right) < a^* < \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{[\rho]}}{\sqrt{\rho}}. \quad (10)$$

Наприклад, для $\rho = 15$

$$334\,864.34 < a^* < 336\,729.87.$$

Як наслідок, маємо

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{\rho}}{\sqrt{\rho}} (1 + o(1)). \quad (11)$$

$$\text{Функція } \varphi(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{\rho}}{\sqrt{\rho}}, \quad \rho \geq 1, \text{ п}$$

збільшенням ρ швидко зростає, чим і пояснюється переповнення комп'ютера при розрахунках за формулами (8), (9). Зазначимо також, що коли ρ велике, то імовірності $\pi_k, k = 0, 1, \dots, m$ є результатом ділення великих чисел. Це може вплинути на точність обчислення стаціонарних

імовірностей. Базуючись на властивостях послідовності a , можна запропонувати алгоритм рекурентного типу, який буде працювати стійко при будь-яких значеннях вхідних параметрів. Ідея цього алгоритму полягає у тому, щоб чисельник і знаменник формул Ерланга розділити на максимальний член послідовності " a ".

Перед тим, як навести цей алгоритм, виділимо можливі співвідношення між параметрами m , ρ , і за " a " визначимо необхідні допоміжні послідовності.

Нехай $\rho > 1$ і $m \leq [\rho]$. В цьому випадку введемо скінченну послідовність

$$b_k = \frac{a_k}{a_m} = \frac{1}{\rho^{m-k}} \frac{m!}{k!}, \quad k = 0, 1, \dots, m.$$

Величини b_k , $k = 0, 1, \dots, m$, можна знаходити за формулами

$$b_m = 1, b_{k-1} = \frac{k}{\rho} b_k, \\ k = m, m-1, \dots, 1. \quad (12)$$

Нехай тепер $\rho > 1$ і $m > [\rho]$. Введемо дві скінченні послідовності

$$c_k = \frac{a_k}{a_{[\rho]}}, \quad k = 0, 1, \dots, [\rho],$$

$$d_k = \frac{a_k}{a_{[\rho]}}, \quad k = [\rho], [\rho]+1, \dots, m.$$

Величини c_k , d_k обраховуються за рекурентними співвідношеннями

$$c_{[\rho]} = 1, c_{k-1} = \frac{k}{\rho} c_k, \\ k = [\rho], [\rho]-1, \dots, 1. \quad (13)$$

$$d_{[\rho]} = 1, d_{k+1} = \frac{\rho}{k+1} d_k, \\ k = [\rho], \dots, m-1. \quad (14)$$

Для розрахунку стаціонарних імовірностей $\pi_0, \pi_1, \dots, \pi_m$ можна запропонувати наступну розрахункову схему.

АЛГОРИТМ

КРОК 1. Вводимо параметри:

$\rho > 0$ - навантаження системи (дійсне число);
 m - число обслуговуючих приладів (натуральне число);

КРОК 2. Якщо $0 < \rho \leq 1$, то рекурентно за формулами (8) обчислюємо $a_0, a_1, \dots, a_m$ і

$$\pi_k = a_k \{ a_0 + a_1 + \dots + a_m \}^{-1}, \\ k = 0, 1, \dots, m.$$

КРОК 3. Якщо $\rho > 1$ і $m \leq [\rho]$, то обчислюємо b_k , $k = 0, 1, \dots, m$, за формулами (12) і

$$\pi_k = b_k \{ b_0 + b_1 + \dots + b_m \}^{-1}, \\ k = 0, 1, \dots, m.$$

КРОК 4. Якщо $\rho > 1$, $m > [\rho]$, то за формулами (13), (14) обчислюємо $c_0, c_1, \dots, c_{[\rho]}$ і $d_{[\rho]}, d_{[\rho]+1}, \dots, d_m$. Стаціонарні імовірності в цьому випадку дорівнюють

$$\pi_k = h_k \{ c_0 + c_1 + \dots + c_{[\rho]} + d_{[\rho]+1} + \dots + d_m \}^{-1} \\ k = 0, 1, \dots, m,$$

де

$$h_k = \begin{cases} c_k, & k \leq [\rho], \\ d_k, & k > [\rho]. \end{cases}$$

вузлами. Параметри, що задають процес обслуговування у кожному вузлі, дорівнюють:

$C_2 = 1$, $C_3 = 2$ - вартісні коефіцієнти. Нижче показана залежність прибутку $\Phi(q_1, q_2) = M(q_1, q_2, 1 - q_1 - q_2)$ від керуючих параметрів q_1, q_2 в області $\{(q_1, q_2) : q_1 \geq 0, q_2 \geq 0, q_1 + q_2 \leq 1\}$

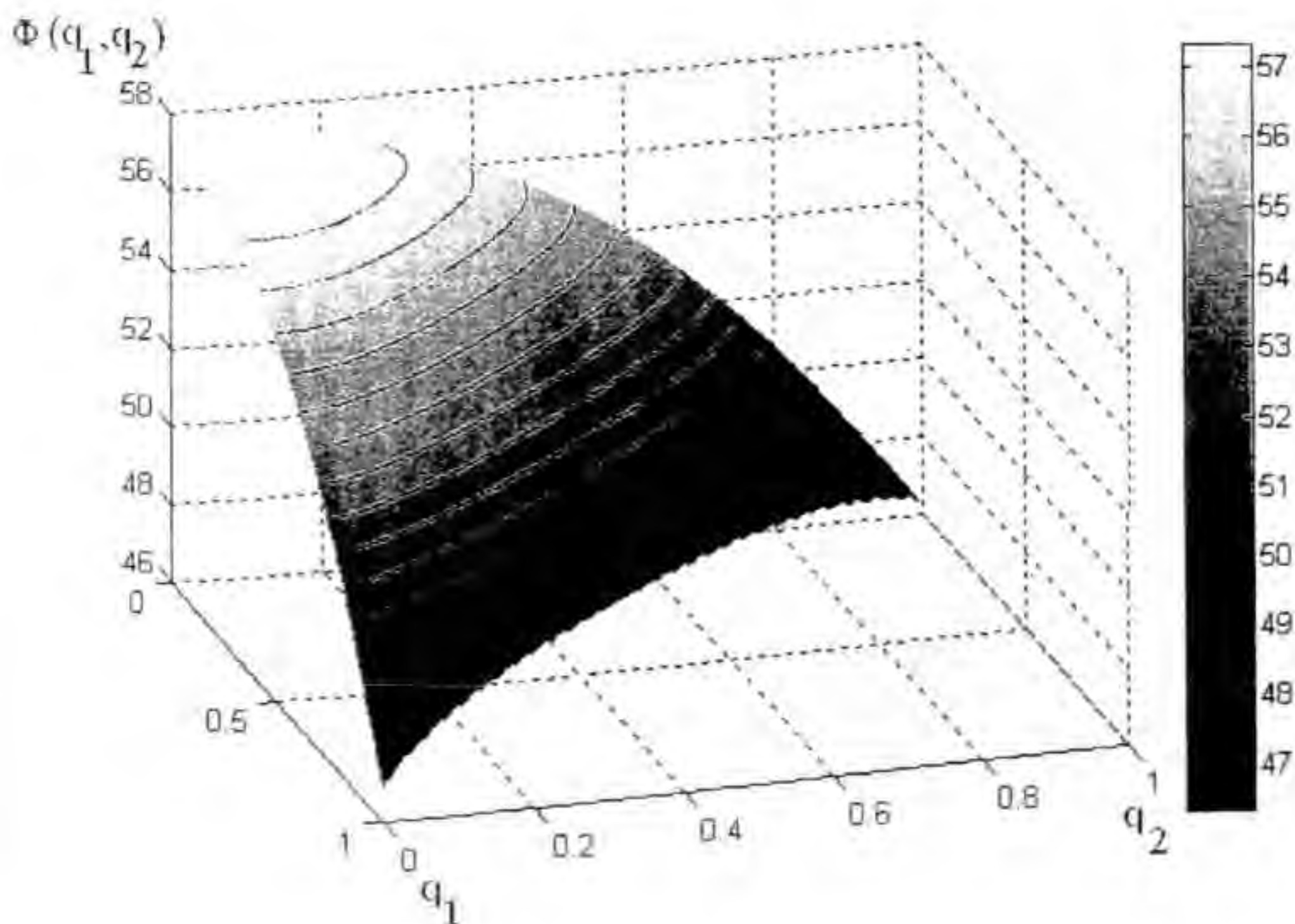


Рис. 2. Максимізація прибутку для мережі з трьома вузлами

Максимальне значення прибутку $M^* = 57.5$
досягається для $q_1 = 0.15$, $q_2 = 0.10$, $q_3 = 0.75$.

Література

1. Гнеденко Б.В., Коваленко И.Н. Введение в теорию массового обслуживания. Изд. 3-е, испр. и доп. М.: КомКнига, 2005. - 400 с.
2. Вітлінський В.В., Верченко П.І. Аналіз, моделювання та управління

економічним ризиком. - К.: КНЕУ, 2000. - 292 с.

3. Лебедев Є.О., Макушенко І.А. Оптимізація ризику для багатоканальних стохастичних мереж. - К.: НБУВ, 2007. - 65 с.

Надійшла до редакції 25.03.2010

УДК 519.633

Москальков М.М., к.ф.-м.н., доц.,
Жураєв І.Н., к.ф.-м.н.

Дослідження різницевих схем для рівняння гіперболічного типу другого порядку з узагальненими розв'язками

В роботі отримані дві нові апіорні оцінки в енергетичних нормах, що установлюють стійкість трьохшарової операторно-різничевої схеми за початковими даними та за правою частиною. Використовуючи ці оцінки, отримані узгоджені оцінки швидкості збіжності різницевих схем для рівняння гіперболічного типу другого порядку із узагальненими розв'язками $u \in W_2^m(Q_T)$.

Ключові слова: різницеві схеми, стійкість, апіорні оцінки, узгоджені оцінки.

*E-mail: moskalkov@hotmail.com, ijurayev@yahoo.com

Статтю представив д. т. н., проф. Гарашенко Ф.Г.

As a rule real physical processes proceed in environments with various physical characteristics and at presence of the concentrated external factors (forces, sources). Therefore the great value gets a question on research of accuracy of discrete schemes depending on smoothness of the solution [1]. As in classical treatment difference schemes there is no approximation at infringement of smoothness of the solution in separate points it is necessary to refuse classical definition of an error of approximation and to use its suitable generalizations [2]. So, by A.A.Samarskii and V.L.Makarov [3] has been offered a method of construction difference schemes by means of averaging operators exact difference schemes which has allowed to present an error of approximation in a corresponding kind and to estimate an error difference schemes depending on smoothness of the generalized solution. The further development of this approach in works, for example, [2, 4-9] has allowed to construct difference schemes and to receive various estimations of their speed of convergence which order is coordinated with smoothness of the solution of the equations of elliptic, parabolic and hyperbolic types.

This article is further development of the works [2, 7-9] to reception of the coordinated estimates of convergence rate of the difference schemes for the second order hyperbolic type equations having generalized solutions $u \in W_2^m(Q_T)$ in the energy norms $E_{h\tau}^{(k)}$, ($k = -1$ and $m = 1, 2$; $k = 0, 1$ and $m = k + 1, k + 2, k + 3$). At some values k and m these estimates are known from [7-9]. In all these works approximation of the second initial condition of a differential problem was in the form:

M.N. Moskalkov k.pf.-m.n.,
I.N. Jurayev k.pf.-m.n.

Research of difference schemes for second order hyperbolic type equation having generalized solutions

Two the new a priori estimates are produced in the energy norms, which establish the stability of a three-layer operator - difference scheme on initial data and by the right - hand side. Using these estimations are received the coordinated estimates of convergence rate of the difference schemes for the second order hyperbolic type equation having generalized solutions $u \in W_2^m(Q_T)$.

Keywords: difference schemes, stability, a priori estimate, coordinated estimates.

$D_0 y_t(0) = \bar{u}_1$, $D_0 \neq E$. Here, D_0 is taken as $D_0 = E$ that is better from the point of view of the scheme realization. Moreover the new a priori estimates are generated for $k = -1, 0$.

1. A priori estimation.

Let $\omega_\tau = \{t_j = j\tau, j = \overline{1, j_0}, \tau = T/j_0\}$ is uniform grid on $(0, T]$. We will use designations from [10].

Let H is a Hilbert space of functions of $y(t)$ the parameter $t \in \omega_\tau$ supplied a scalar product $(y, w) = (y, w)(t)$ and norm $\|y(t)\| = \sqrt{(y, y)(t)}$. Besides we will enter an energy scalar product $(Ay, y)(t)$ and confirming to it norm $\|y(t)\|_A = \sqrt{(Ay, y)(t)}$, where A is the positive self-conjugate operator. Also we will use following norms

$$\|y\|_0 = \left(\sum_{t=\tau}^T \tau \|y(t)\|^2 \right)^{1/2},$$

$$\|y\|_{A,0} = \left(\sum_{t=\tau}^T \tau \|y(t)\|_A^2 \right)^{1/2}.$$

Let consider a three-layer operator-difference scheme

$$Dy_{\bar{t}} + By_* + Ay = \varphi, \quad y(0) = y_0, \quad y_1(0) = y_1, \quad (1)$$

where $y = y(t) \in H$ and $A, B, D: H \rightarrow H$ are linear operators not dependent from t . Moreover

$$\begin{aligned} A = A^* > 0, B \geq 0, D = D^* > 0, \\ D \geq 0.25(1 + \delta)\tau^2 A, \delta > 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Let us enter following designations for an energy norms:

$$E_\tau^{(k)}(t, y) = \begin{cases} (\|y(t)\|_{A^{-1}D}^2 + \|\sum_{\theta=0}^t \tau y(\theta)\|^2)^{1/2}, k = -1, \\ (\|y(t)\|_D^2 + \|\sum_{\theta=0}^t \tau y(\theta)\|_A^2)^{1/2}, k = 0, \\ (\|y_1(t)\|_D^2 + \|y(t)\|_A^2)^{1/2}, k = 1. \end{cases}$$

Let the right part φ of the equation (1) is represented in a kind $\varphi = A\eta + \zeta_i, \zeta(0) = 0$. Then following two theorems will be true

Theorem 1. Assume that the conditions (2) and $AD = DA$

are fulfilled. Then the scheme (1) is stable with respect to the initial data and the right-hand side in $E_\tau^{(-1)}(t; y)$ and the following estimate are valid

$$\begin{aligned} E_\tau^{(-1)}(t; y) \leq M(\|y_0\|_{A^{-1}\bar{D}} + \\ + \|A^{-1}\bar{D}y_1\| + \|\eta\|_0 + \|\zeta\|_{(AD)^{-1},0}), \end{aligned} \quad (3)$$

where $\bar{D} = D + A^{-1}B^2 + \tau^2 A$, $\bar{D} = D + 0.5\tau B$.

Proof. Let $y = \bar{y} + \tilde{y}$, where $\bar{y}$ - the solution of a problem

$$Dy_{ii} + By_{\sigma_i} + Ay = A\eta, \quad y(0) = y_0, \quad y_1(0) = y_1,$$

$\tilde{y}$ - the solution of a problem

$$Dy_{ii} + By_{\sigma_i} + Ay = \zeta_i, \quad y(0) = 0, \quad y_1(0) = 0. \quad (4)$$

On the basis of the theorem 1 from [7] for $\bar{y}$ following estimation is true

$$E_\tau^{(-1)}(t; \bar{y}) \leq M(\|y_0\|_{A^{-1}\bar{D}} + \|A^{-1}\bar{D}y_1\| + \|\eta\|_0).$$

Let $\bar{D} = D - 0.25\tau^2 A$ and

$$w(s) = \begin{cases} -\sum_{t'=s+\tau}^t \tau[y(t') + \check{y}(t')], & 0 \leq s < t, \\ 0, & s \geq t. \end{cases}$$

From the energy identity [7]

$$\begin{aligned} \|g(0)\|^2 + (A^{-1}\bar{D}y, y)(t) + 0.5 \sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}B(y + \check{y}, y + \check{y}))(t') = \\ = -\sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}\zeta_i, w)(t') \end{aligned}$$

for the problem (4) the following estimate is true

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{4(1+\delta)} \left[\|y(t)\|_{A^{-1}D}^2 + \left\| \sum_{t'=0}^t \tau y(t') \right\|^2 \right] + \\ + 0.5 \sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}B(y + \check{y}, y + \check{y}))(t') \leq \\ \leq \sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}\zeta_i, w)(t'), \quad \delta > 0. \end{aligned} \quad (5)$$

We transform the right part (5) then using the ε inequality and inequality Cauchy-Bunjakovsky [10] we estimate that

$$\begin{aligned} \left| \sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}\zeta_i, w)(t') \right| = \left| \sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}\zeta, w_i)(t') \right| = \\ = \left| \sum_{t'=\tau}^t \tau(A^{-1}\zeta, \hat{y} + y)(t') \right| \leq \frac{1}{4\varepsilon_1} \|\zeta\|_{(AD)^{-1}}^2 + \\ + 2\varepsilon_1 \tau \|y(t)\|_{A^{-1}D}^2 + 4\varepsilon_1 \sum_{t'=\tau}^t \tau \|y(t')\|_{A^{-1}D}^2. \end{aligned}$$

At $\varepsilon_1 = \delta / [8(1+\delta)(2+T)]$ applying the lemma 5 [12, p. 311] we receive an estimate of kind

$$E_\tau^{(-1)}(t; \tilde{y}) \leq M \|\zeta\|_{(AD)^{-1},0}.$$

Finally, using a triangle inequality $E_\tau^{(-1)}(t; y) \leq E_\tau^{(-1)}(t; \bar{y}) + E_\tau^{(-1)}(t; \tilde{y})$, we get the estimate (4).

Theorem 2. Under assumptions of (2) for the scheme (1) following estimation is true

$$\begin{aligned} E_\tau^{(0)}(t; y) \leq M(\|y_0\|_{\bar{D}} + \\ + \|\bar{D}y_1\|_{A^{-1}} + \|\eta\|_{A,0} + \|\zeta\|_{D^{-1},0}). \end{aligned}$$

Proof. By analogy with previous theorem on the basis of the energy identity [11]

$$\begin{aligned} \|g(0)\|_A^2 + \|y(t)\|_D^2 + 0.5 \sum_{t'=\tau}^t \tau(B(y + \check{y}, y + \check{y}))(t') = \\ = -\sum_{t'=\tau}^t \tau(\zeta_i, w)(t') \end{aligned}$$

taking into account an estimate

$$E_{\tau}^{(0)}(t; \tilde{y}) \leq M \|\zeta\|_{D^{-1,0}}$$

we are convinced on justice of the theorem.

The following theorem is known from [10].

Theorem 3. If conditions (2) are fulfilled then the scheme (1) is stable with respect to the initial data and the right-hand side in $E_{\tau}^{(1)}(t; y)$ and the estimation is fair

$$E_{\tau}^{(1)}(t; y) \leq M(\|y_0\|_A + \|y_1\|_D + \|A\eta\|_{D^{-1,0}} + \|\zeta_{\tau}\|_{D^{-1,0}}).$$

2. Difference scheme. Stability. Accuracy.

Let us consider a problem

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= Lu + f, \quad (x, t) \in Q_T, \\ u(0, t) &= u(1, t) = 0, \quad t \in (0, T], \\ u &= u_0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = u_1, \quad (x, t) \in Q_0, \end{aligned} \quad (6)$$

where $Q_T = \{x \in \Omega, t \in (0, T]\}$, $Q_0 = \{x \in \Omega, t = 0\}$,

$$\Omega = \{0 < x < 1\}, \quad Lu = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - q(x)u,$$

$$0 < C_1 \leq k(x) \leq C_2 < \infty, \quad q(x) \geq 0.$$

Let $\bar{\omega}_h = \{x_i = ih, i = \overline{0, N}, h = 1/N\}$, $\omega_h = \bar{\omega}_h \setminus \gamma_h$, $\omega = \omega_h \times \omega_{\tau}$, $\omega_{0,h} = \{x \in \omega_h, t = 0\}$ are grids in $\bar{\Omega}$, Ω , Q_T , Q_0 , accordingly; $\gamma_h = \{x = 0, x = 1\}$ is border of $\bar{\omega}_h$. For convenience of a statement further $k(x) \equiv 1$, $q(x) \equiv 0$.

Let T^t , T^x are averaging operators of the exact difference schemes (see, for example, [2,7]).

$$T^x u(x, t) = \frac{1}{h^2} \int_{x-h}^{x+h} (h - |x - \xi|) u(\xi, t) d\xi,$$

$$T^t u(x, t) = \frac{2}{\tau^2} \int_0^{\tau} (\tau - \theta) u(x, \theta) d\theta, \quad t = 0,$$

$$T^t u(x, t) = \frac{1}{\tau^2} \int_{t-\tau}^{t+\tau} (\tau - |t - \theta|) u(x, \theta) d\theta, \quad t > 0.$$

Action of operators T^t , T^x on (6) gives

$$\bar{u}_{it} = \Lambda T^t u + \varphi, \quad t > 0,$$

$$\bar{u}_t = \bar{u}_1 + 0.5\tau(\Lambda T^t u + \varphi), \quad t = 0,$$

where $\Lambda u = u_{xx}$, $\varphi(x, t) = T^t T^x f(x, t)$, averaging of the exact solution of the problem (6) is

$$\bar{u} = \bar{u}(x, t) = \begin{cases} T^x u(x, t), & x \in \omega_h, \\ 0, & x \in \gamma_h. \end{cases}$$

On the basis of these identities the problem (6) is approximated by the difference scheme having weights

$$\begin{aligned} y_{it} &= \Lambda y^{(\sigma_1, \sigma_2)} + \varphi, \quad (x, t) \in \omega, \\ y(0, t) &= y(1, t) = 0, \quad t \in \bar{\omega}_{\tau}, \\ y(0) &= \bar{u}_0, \quad y_t(0) = \bar{y}_1, \quad x \in \omega_h, \end{aligned} \quad (7)$$

where $y^{(\sigma_1, \sigma_2)} = \sigma_1 \hat{y} + (\sigma_1 - \sigma_2)y + \sigma_2 \check{y}$, $\bar{y}_1 = \bar{y}_1(x) = \bar{u}_1(x) + 0.5[\Lambda \bar{u}_0(x) + \varphi(x, 0)]$, and σ_1, σ_2 - scheme weights.

Having put $A = -\Lambda$ the scheme (7) we can write down in the canonical form [10]

$$Dy_{it} + By_i + Ay = \varphi, \quad y(0) = y_0, \quad y_t(0) = y_1,$$

where $D = E + 0.5(\sigma_1 + \sigma_2)\tau^2 A$, $B = (\sigma_1 - \sigma_2)\tau A$.

Let us put

$$H = \{w(x) : x \in \omega_h, w(x) = 0 : x \in \gamma_h\}.$$

As $A = A^* > 0$ on the results basis of the previous point it is concluded that the scheme (7) is steady at

$$\sigma_1 - \sigma_2 \geq 0, \quad \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \geq \frac{1 + \delta}{4} - \frac{1}{\tau^2 \|A\|}, \quad \delta > 0. \quad (8)$$

Let y is the solution of the difference scheme (7). Then for an error $z = y - \bar{u}$ we have a problem

$$\begin{aligned} Dz_{it} + Bz_i + Az &= \psi, \quad t \in \omega_{\tau}, \\ z(0) &= 0, \quad z_t(0) = 0.5\tau\psi(0), \end{aligned} \quad (9)$$

where $\psi = -A\eta$, $\eta = \eta_1 + \eta_2$,

$$\eta_1(x, t) = T^t [u(x, t) - \bar{u}(x, t)], \quad t \geq 0,$$

$$\eta_2(x, 0) = T^t \bar{u}(x, t) - \bar{u}_0(x), \quad t = 0,$$

$$\eta_2(x, t) = T^t \bar{u}(x, t) - \bar{u}^{(\sigma_1, \sigma_2)}(x, t), \quad t > 0.$$

On the basis of theorems 1-3 from (9) for z the estimates follow

$$\begin{aligned} E_{h\tau}^{(-1)}(t, z) &\leq M \sum_{\alpha=1}^2 (\tau \|\bar{D} \eta_{\alpha}(0)\| + \|\eta_{\alpha}\|_0), \\ E_{h\tau}^{(0)}(t, z) &\leq M \sum_{\alpha=1}^2 (\tau \|\bar{D} \eta_{\alpha, \bar{x}}(0)\| + \|\eta_{\alpha, \bar{x}}\|_0), \\ E_{h\tau}^{(1)}(t, z) &\leq M \sum_{\alpha=1}^2 (\tau \|\eta_{\alpha, \bar{x}\bar{x}}(0)\|_D + \|\eta_{\alpha, \bar{x}\bar{x}}\|_0), \end{aligned} \quad (10)$$

where $\bar{D} = E + \sigma_1 \tau^2 A$.

Following lemmas are necessary

Lemma 1. If $u \in W_2^m(Q)$ then

$$\|T^t(T^x u - u)\|_{L_2(\omega)} \leq M h^m \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)},$$

$m = 0, 1, 2;$

$$\|T^t(T^x u - u)_{\bar{x}}\|_{L_2(\omega)} \leq M h^{m-1} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)},$$

$m = 1, 2, 3;$

$$\|T^t(T^x u - u)_{\bar{x}\bar{x}}\|_{L_2(\omega)} \leq M h^{m-2} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)},$$

$m = 2, 3, 4.$

These estimations follow directly from [3].

Lemma 2. Let $u \in W_2^m(Q)$, $0 < M_1 \leq \tau^2/h^2 \leq M_2$. Then

$$\sum_{\alpha=1}^2 \tau \|\bar{D} \eta_{\alpha}(0)\| \leq M \tau^{1/2} \left((m-1) \tau^{3/2} \|u_1\|_{L_2(\omega)} + \tau^m \left\| \frac{\partial^m u}{\partial t^m} \right\|_{L_2(Q_T)} + h^m \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)} \right), \quad m = 1, 2;$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^2 \tau \|\bar{D} \eta_{\alpha, \bar{x}}(0)\| &\leq M \tau^{1/2} \left\{ m-2 \left[\tau^{1/2} \left[m-3 \right] \|u_0\|_{L_2(\Omega)} + (m-1) \tau \|u_1\|_{L_2(\Omega)} \right] + \right. \\ &\left. + \tau^{m-1} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial t^{m-1} \partial x} \right\|_{L_2(Q_T)} + h^{m-1} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)} \right\}, \quad m = 1, 2, 3; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^2 \tau \|\bar{D} \eta_{\alpha, \bar{x}\bar{x}}(0)\| &\leq M \tau^{1/2} \left[m-3 \left[\tau^{1/2} \left[m-4 \right] \|u_0\|_{L_2(\Omega)} + (m-2) \tau^{3/2} \|u_1\|_{L_2(\Omega)} \right] + \right. \\ &\left. + \tau^{m-2} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial t^{m-2} \partial x^2} \right\|_{L_2(Q_T)} + h^{m-2} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)} \right], \quad m = 2, 3, 4. \end{aligned}$$

Proof. First of all we shall notice that

$$\|\bar{D}\| \leq 1 + 4\sigma_1 M_2, \quad \|D\| \leq \sqrt{1 + 0.5(\sigma_1 + \sigma_2) M_2}.$$

Then

$$\sum_{\alpha=1}^2 \tau \|\bar{D} \eta_{\alpha}(0)\| \leq M \tau (\|\eta_1(0)\| + \|\eta_2(0)\|),$$

$$\sum_{\alpha=1}^2 \tau \|\bar{D} \eta_{\alpha, \bar{x}}(0)\| \leq M \tau (\|\eta_{1, \bar{x}}(0)\| + \|\eta_{2, \bar{x}}(0)\|)$$

$$\sum_{\alpha=1}^2 \tau \|\eta_{\alpha, \bar{x}\bar{x}}(0)\| \leq M \tau (\|\eta_{1, \bar{x}\bar{x}}(0)\| + \|\eta_{2, \bar{x}\bar{x}}(0)\|).$$

Applying the lemma 1 we get

$$\|\eta_2(0)\| \leq M \tau^{1/2} \left((m-1) \tau^{1/2} \|u_1\|_{L_2(\Omega)} + \tau^{m-1} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial t^m} \right\|_{L_2(Q_T)} \right), \quad m = 1, 2,$$

$$\|\eta_1(0)\| \leq M \tau^{-1/2} h^m \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)}, \quad m = 1, 2,$$

$$\|\eta_{1, \bar{x}}(0)\| \leq M \tau^{-1/2} h^{m-1} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)}, \quad m = 1, 2, 3,$$

$$\|\eta_{1, \bar{x}\bar{x}}(0)\| \leq M \tau^{-1/2} h^{m-2} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right\|_{L_2(Q_T)}, \quad m = 2, 3, 4,$$

$$\|\eta_{2,\bar{x}}(0)\| \leq M\tau^{1/2} \left(|m-2| \left(|m-3| \tau^{-1/2} \|u'_0\|_{L_2(\Omega)} + (m-1)\tau^{1/2} \|u'_1\|_{L_2(\Omega)} \right) + \tau^{m-2} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial t^{m-1} \partial x} \right\|_{L_2(Q_T)} \right),$$

$$m=1,2,3,$$

$$\|\eta_{2,\bar{x}}(0)\| \leq M\tau^{1/2} \left(|m-3| \left(|m-4| \tau^{-1/2} \|u''_0\|_{L_2(\Omega)} + (m-2)\tau^{1/2} \|u''_1\|_{L_2(\Omega)} \right) + \tau^{m-2} \left\| \frac{\partial^m u}{\partial t^{m-2} \partial x^2} \right\|_{L_2(Q_T)} \right),$$

$$m=2,3,4,$$

It is already easy to see that the proof is completed.

where $l=0$ at $m=2$ and $l=1$ at $m=3,4$.

Lemma 3. At $u \in W_2^m(Q_T)$ the following estimates are true

Proof. The estimate for functional η_1 from a lemma 1 it is already had. For an estimate functional η_2 we have

$$\sum_{\alpha=1}^2 \|\eta_{\alpha}\|_0 \leq M[(\sigma_1 - \sigma_2)\tau + (\tau + h)^m] \|u\|_{W_2^m(Q_T)},$$

$$m=1,2;$$

$$\sum_{\alpha=1}^2 \|\eta_{\alpha,\bar{x}}\|_0 \leq M[(\sigma_1 - \sigma_2)\tau^l + (\tau + h)^{m-1}] \|u\|_{W_2^m(Q_T)},$$

$$m=1,2,3,$$

where $l=0$ at $m=1$ and $l=1$ at $m=2,3$,

$$\sum_{\alpha=1}^2 \|\eta_{\alpha,\bar{x}\bar{x}}\|_0 \leq M[(\sigma_1 - \sigma_2)\tau^l + (\tau + h)^{m-2}] \|u\|_{W_2^m(Q_T)},$$

$$m=2,3,4,$$

$$\begin{aligned} \|\eta_2\|_0 &\leq \|T'\bar{u} - \bar{u}\|_0 + (\sigma_1 - \sigma_2)\tau \|\bar{u}_0\|_0 + \\ &+ 0.5(\sigma_1 + \sigma_2)\tau^2 \|\bar{u}_{\bar{t}\bar{t}}\|_0 \leq \\ &\leq M[(\sigma_1 - \sigma_2)\tau + (\tau + h)^m] \|u\|_{W_2^m(Q_T)} \quad m=1,2. \end{aligned}$$

The estimates of $\eta_{2\bar{x}}, \eta_{2\bar{x}\bar{x}}$ are similar to η_2 .

On the basis of lemmas 2, 3 the estimates (10) are represented in a kind:

$$E_{h\tau}^{(k)}(t, y - \bar{u}) \leq M \begin{cases} [(\sigma_1 - \sigma_2)\tau + (\tau + h)^m] \|u\|_{W_2^m(Q_T)}, m=1,2, k=-1, \\ [(\sigma_1 - \sigma_2)\tau^l + (\tau + h)^{m-1}] \|u\|_{W_2^m(Q_T)}, m=1,2,3, k=0, \\ l=0, m=1 \text{ and } l=1, m=2,3, \\ [(\sigma_1 - \sigma_2)\tau^l + (\tau + h)^{m-2}] \|u\|_{W_2^m(Q_T)}, m=2,3,4, k=1, \\ l=0, m=2 \text{ and } l=1, m=3,4. \end{cases} \quad (11)$$

Thus, it is proved

Theorem 4. At performance of conditions (8) the difference scheme (7) is stable and the estimates (11) for its accuracy on solutions $u \in W_2^m(Q_T)$, $m=1,2,3,4$ of the problem (6) are true. The estimates (11) are coordinated at $k=-1$, $m=1$; $k=0$, $m=1,2$; $k=1$, $m=2,3$.

It is fair also

Theorem 5. Let assumptions of the theorem 1 are executed. Then the coordinated estimations for accuracy of the symmetric scheme (7) $\sigma_1 = \sigma_2$ are true and

$$E_{h\tau}^{(k)}(t, y - \bar{u}) \leq M(\tau + h)^{m-k-1} \|u\|_{W_2^m(Q_T)}, \quad (12)$$

$m=1,2$ at $k=-1$ and $m=k+1, k+2, k+3$ at $k=0,1$.

The proof follow directly from (11) at $\sigma_1 = \sigma_2$.

Remark. If the solution of the problem (6) $u \in W_2^m(Q)$, $m \geq 2$, then by Sobolev inclusion theorems $u \in C(\bar{Q})$ [2]. Then for an error $z = y - u$ of the scheme (7) in norm $E_{h\tau}^{(k)}(t, y - u)$ follow estimations similar (11), (12).

For variable coefficients $k(x)$, $q(x)$ the problem (6) it is approximated by the difference scheme of a kind

$$\begin{aligned} by_{it} &= \Lambda y^{(\sigma_1, \sigma_2)} + \varphi, \quad (x, t) \in \omega, \\ y &= \bar{u}_0, \quad y_t = \bar{y}_1, \quad (x, t) \in \omega_{0,h}, \\ y(0, t) &= y(1, t) = 0, \quad t \in \bar{\omega}_\tau, \end{aligned} \quad (13)$$

where $b = b(x) = T^x(1)$, $\Lambda u = (au_x)_x - du$,
 $a = a(x) = hv_1^{-1}(x)$, $d = d(x) = T^x q(x)$,
 $\varphi = \varphi(x, t) = T^t T^x f(x, t)$, $\bar{u}$ - pointwise averaging of the exact solution of the problem (6)

$$\bar{u} = \bar{u}(x, t) = \begin{cases} b^{-1}(x) T^x u(x, t), & x \in \omega_h, \\ 0, & x \in \gamma_h, \end{cases}$$

$$T^x u = \frac{1}{h} \int_{x-h}^x \frac{v_1(\xi)}{v_1(x)} u(\xi, t) d\xi + \frac{1}{h} \int_x^{x+h} \frac{v_2(\xi)}{v_2(x)} u(\xi, t) d\xi.$$

Here $v_1(x) = v_1^i(x)$ and $v_2(x) = v_2^i(x)$ are solutions of the following problems Cauchy [10]:

$$Lv_1^i = 0, \quad x \in e_i, \quad v_1^i(x_{i-1}) = 0, \quad \frac{dv_1^i}{dx}(x_{i-1}) = 1,$$

$$Lv_2^i = 0, \quad x \in e_i, \quad v_2^i(x_{i+1}) = 0, \quad \frac{dv_2^i}{dx}(x_{i+1}) = -1,$$

$$e_i = (x_{i-1}, x_{i+1}), \quad i = 1, 2, \dots, N-1.$$

Following two theorems are fair

Theorem 6. At performance of conditions (8) the difference scheme (13) in $E_{h\tau}^{(k)}$ is steady and for its accuracy on solution $u \in W_2^m(Q)$, $m = 1, 2, 3, 4$, of the problem (6) estimations (11) are true. These estimations are coordinated at: $k = -1$ and $m = 1$, $k = 0, 1$ and $m = k+1, k+2$.

Theorem 7. If assumptions of the theorem 6 fulfilled then for accuracy of the symmetric scheme (7) $\sigma_1 = \sigma_2$ the coordinated estimations (12) are executed at: $m = 1, 2$ and $k = -1$, $m = k+1, k+2, k+3$ and $k = 0, 1$.

References

1. Samarskii A.A. Research of accuracy of the difference schemes for problems having generalized solutions. - In Collection: Actual problems of mathematical physics and computational mathematics. - Moscow: Nauka. - 1984. P. 174 - 183. (in Russian).
2. Samarskii A.A., Lazarov R.D., Makarov V.L. Difference schemes for differential equations

having generalized solutions. - Moscow: Vishaya Shkola. - 1987. - 296 p. (in Russian).

3. Makarov V.L., Samarskii A.A. Application of the exact difference schemes to an convergence rate estimate of the straight method // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics. - 1980. 20, №2. P. 371 - 387. (in Russian).
4. Lazarov R.D., Makarov V.L. Convergence of the grid and straight methods for multidimensional problems of mathematical physics in classes of the generalized solutions. - Dokl. AN SSSR (Reports of Academy of Sciences of USSR). - 1981. 259, № 2. P. 282 - 286. (in Russian).
5. Lazarov R.D., Makarov V.L., Samarskii A.A. Application of the exact difference schemes to construction and research difference schemes on the generalized solutions. - Math. Collection, 1982, 117 (159), № 4. P. 469 - 480. (in Russian).
6. Jurayev I.N., Kolesnik T.V., Makarov V.L. About accuracy of straight method for the second order quasi-linear hyperbolic equations with small parameter at senior derivative on time // Differential Equations. - 1985. - 21, №7. - P. 1164 - 1170. (in Russian).
7. Jurayev I.N., Moskalkov M.N. Research of convergence of difference scheme having weights to generalized solution of string oscillation equation in a class $W_2^2(Q_T)$ // Differential Equations. - 1985. - 21, № 12. - P. 2145 - 2152. (in Russian).
8. Jurayev I.N. Investigation of difference schemes for second order hyperbolic type equation having generalized solutions. - Ph.D. Dissertation on Phys.-Math. Sciences. - Kiev. - 1986. - 117 p. (in Russian).
9. Burkovskaya V.L., Jurayev I.N., Moskalkov M.N. Convergence rate of discretization methods for hyperbolic type equation in a class of the generalized solutions. Dokl. Acad. Nauk. Ukraini. Ser. Phys. - Math. Nauk. - 1986. № 4. - P. 6 - 9. (in Russian).
10. Samarskii A.A. The theory of difference schemes. 2001. - 786 p. (in English).
11. Moskalkov M.N. About accuracy difference schemes approximating wave equation with sufficiently - smooth solutions // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1974. 14, №2. P. 390 - 401. (in Russian).
12. Samarskii A.A. Introduction to the theory of difference schemes. - Moscow: Nauka, 1971. - 552 p. (in Russian).

Надійшла до редколегії 29.03.2010

УДК 519.8

Паращук К.Ф.^{*}, ст. викл.

Мінімаксні оцінки векторів із тензорного добутку гільбертових просторів

Сформульовано задачу мінімаксного оцінювання векторів із тензорного добутку [1] гільбертових просторів за умов невизначеності. Доведено твердження та теорему, які є основою методу визначення мінімаксної середньоквадратичної оцінки. Одержано явний вигляд вказаної оцінки. Розроблений метод може бути основою алгоритму обчислення мінімаксної оцінки при моделюванні систем на основі тензорного добутку векторів за умов невизначеності.

Ключові слова: мінімаксне оцінювання, мінімаксна середньоквадратична оцінка, тензорний добуток векторів, гільбертовий простір, умови невизначеності.

^{*}E-mail: kt-paraschuk@mail.ru

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Вступ

Проблема оптимальності обробки результатів експериментів за умов неповної інформації одна із найважливіших задач у теорії інформаційних систем, пов'язаних з керуванням, автоматизованою обробкою вимірювань, розробкою методів гарантованого оцінювання тощо. Зазвичай в експериментах вимірюється не сама величина φ , яка описує досліджуване явище, а деякий її прояв $y = C\varphi$. Тому для визначення шуканої величини потрібно розв'язати рівняння $y = C\varphi$. Як правило, розв'язання цього рівняння ускладнюється тією обставиною, що оператор C не має оберненого або оператор C необмежений. Тоді досить малі неточності вимірювань можуть призвести до великих похибок при визначенні величини φ . Найчастіше, щоб врахувати похибки вимірювань f , використовують співвідношення $y = C\varphi + f$, яке пов'язує шукану величину φ і неточність вимірювань f . Точні значення похибки вимірювання f заздалегідь невідомі, тому природно виникає задача про обчислення такої величини $\hat{\varphi}$ (оптимальної оцінки), яка є найкращим наближенням шуканої величини φ з урахуванням наявної інформації про похибку вимірювань f .

K.F. Parashchuk

Minimax estimators of vectors are from tensor product of Hilbert spaces

The task of minimax estimators of vectors is formulated from tensor product [1] Hilbert spaces at the terms of vagueness. A statement and theorem is well-proven, which are basis of method of determination of minimax quadratic estimators. The obvious type of the indicated estimation is got. The worked out method can be basis of algorithm of calculation of minimax estimators at the design of the systems on the basis of tensor work of vectors at the terms of vagueness.

Key Words: a minimax estimators, minimax quadratic estimator, tensor product of vectors, Hilbert space, terms of vagueness.

1. Постановка задачі

Нехай проводяться спостереження

$$y_{ks} = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} c_{ksij} \varphi_{ij} + \xi_{ks}, \quad (k, s) \in K \times S, \quad (1)$$

де K, S – відповідні множини індексів, c_{ksij} – відомі числа, ξ_{ks} – реалізації випадкових величин, які мають нульові математичні сподівання, а другі моменти, взагалі кажучи, невідомі, але для них справджується умова

$$\sum_{k,s \in K \times S} M \xi_{ks}^2 \leq q^2, \quad (2)$$

де q – деяка стала.

Припустимо, що матриці $\varphi = (\varphi_{ij})$ належать деякій множині G простору матриць.

Задача 1. Знайти оптимальну в певному сенсі оцінку φ .

Цю задачу ми сформулюємо пізніше як проблему знаходження оцінки φ в тензорному добуткові просторів R^{N_1} та R^{N_2} .

Отже, доцільно спочатку розглянути більш загальну задачу оцінки векторів у тензорному добуткові гільбертових просторів.

2. Тензорний добуток операторів

Нехай H_1, H_2 – сепарабельні гільбертові простори, $\{e_i\}$ та $\{e_j\}$ – ортонормовані базиси цих просторів відповідно. Позначимо $e_i \otimes e_j$ тензорний добуток базисних векторів [1]. Тоді тензорний добуток просторів H_1 та H_2 позначимо $H_1 \otimes H_2$ і вважатимемо, що це множина всіх векторів виду

$$F = \sum_{i,j=1}^{\infty} F_{ij} e_i \otimes e_j, \quad (3)$$

де F_{ij} задовольняють умову

$$\sum_{i,j=1}^{\infty} F_{ij}^2 < \infty. \quad (4)$$

Введемо скалярний добуток векторів $F^{(1)} = \{F_{ij}^{(1)}, i, j = 1, 2, \dots\}$, $F^{(2)} = \{F_{ij}^{(2)}, i, j = 1, 2, \dots\}$, які належать простору $H_1 \otimes H_2$

$$(F^{(1)}, F^{(2)}) = \sum_{i,j=1}^{\infty} F_{ij}^{(1)} F_{ij}^{(2)}. \quad (5)$$

Якщо $f_1 \in H_1$, $f_2 \in H_2$ – довільні елементи просторів H_1 і H_2 відповідно, тобто

$$f_1 = \sum_{i=1}^{\infty} f_{1i} e_i, \quad f_2 = \sum_{j=1}^{\infty} f_{2j} e_j, \quad \text{то їхній тензорний}$$

добуток визначається так:

$$f_1 \otimes f_2 = \sum_{i,j=1}^{\infty} f_{1i} f_{2j} e_i \otimes e_j. \quad (6)$$

Традиційно позначимо $\mathcal{L}(H, \Phi)$ – сукупність усіх неперервних лінійних операторів, визначених на всьому H і які відображають H у Φ (H, Φ – сепарабельні гільбертові простори).

Нехай $A_1 \in \mathcal{L}(H_1, \Phi_1)$, $A_2 \in \mathcal{L}(H_2, \Phi_2)$. Введемо оператор

$$A = A_1 \otimes A_2 \in \mathcal{L}(H_1 \otimes H_2, \Phi_1 \otimes \Phi_2), \quad (7)$$

який визначається так:

$$AF = \sum_{i,j=1}^{\infty} F_{ij} A_1 e_i \otimes A_2 e_j. \quad (8)$$

Далі, припустимо, що у нас є два

сепарабельні гільбертові простори H_1 і H_2 над полем дійсних чисел, а $H_1 \otimes H_2$ – їхній тензорний добуток. Нехай також $A_i \in \mathcal{L}(H_i, \Phi_i)$, $i=1,2,3,4$, причому оператори A_1, A_2, A_3, A_4 мають обмежені обернені.

Нехай спостерігається вектор $y \in Y$, Y – гільбертовий простір, причому

$$y = C\varphi + \eta, \quad (9)$$

де $C \in \mathcal{L}(H_1 \otimes H_2, Y)$, вектор $\varphi \in G_1$, $\eta \in Y$ – реалізація випадкового вектора.

Розглянемо область G_1 і припустимо, що це область виду

$$G_1 = \{\varphi : |(A_1 \otimes A_2)\varphi|^2 + |(A_3 \otimes A_4)\varphi|^2 \leq q_1^2\}, \quad (10)$$

де $A_1 \otimes A_2, A_3 \otimes A_4$ – тензорні добутки вказаних вище операторів, q_1 – деяка стала. Крім цього, вважатимемо, що $M\eta = 0$ і справджується нерівність

$$\{\eta : M(\eta, \eta) \leq q_2^2\}, \quad (11)$$

де q_2 – також деяка стала.

Задача 2. Знайти оцінку виразу (a, φ) , де $a \in H_1 \otimes H_2$, $\varphi \in G_1$ за умов, що спостерігається вектор (9) і η задовольняє умови, зазначені вище.

Оцінку виразу (a, φ) позначимо (a, φ) і шукатимемо у вигляді

$$(a, \varphi) = (u, y) + d, \quad (12)$$

де $u \in Y^*$, d – деяка стала.

Означення. Оцінка $(a, \varphi) = (\hat{u}, y) + \hat{d}$, для якої

$$(\hat{u}, \hat{d}) \in \arg \min I(u, d), \quad (13)$$

де $I(u, d) = \sup_{G_1, \eta} M((a, \varphi) - (a, \varphi))^2$, M – означає

операцію математичного сподівання, називається мінімаксною середньоквадратичною оцінкою (МСКО – [2, 3, 4]).

Отже, остаточно можемо сформулювати задачу так:

Задача 3. Знайти мінімаксну середньоквадратичну оцінку (МСКО [5, 6, 7, 8, 9]) виразу (a, φ) за результатами спостережень виду (9).

3. Розв'язання задачі 3

Введемо вектор $z \in H^*$, де $H = H_1 \otimes H_2$, як розв'язок рівняння

$$(B_1^* B_1 + B_2^* B_2)z = a - C^* u, \quad (14)$$

де $B_1 = A_1 \otimes A_2$, $B_2 = A_3 \otimes A_4$, B_i^* – спряжені оператори до B_i , $i=1,2$, які можемо записати так: $B_1^* = A_1^* \otimes A_2^*$, $B_2^* = A_3^* \otimes A_4^*$.

Твердження 1. Якщо $\varphi \in G_1$, $M\eta = 0$ і для η задовольняється умова (11), а $(a, \hat{\varphi})$ – деяка оцінка, то справджуються нерівності

$$I(\hat{u}, \hat{d}) \leq I(u, d),$$

$$\sup_{\varphi \in G_1} |M(a, \varphi) - M(a, \hat{\varphi})| \leq I_1(\hat{u}, \hat{d}),$$

де $I_1(\hat{u}, \hat{d}) = (|B_1 \hat{z}|^2 + |B_2 \hat{z}|^2)^{\frac{1}{2}} |q_1| + |\hat{d}|$, а $\hat{z}$ – розв'язок рівняння (14) при $u = \hat{u}$.

Доведення. Знайдемо $(a, \varphi) - (a, \hat{\varphi})$. Враховуючи (9) і (12), маємо

$$\begin{aligned} (a - \varphi) - (a, \hat{\varphi}) &= (a, \varphi) - (u, y) - d = \\ &= (a, \varphi) - (u, C\varphi) - (u, \eta) - d. \end{aligned}$$

Тобто $(a, \varphi) - (a, \hat{\varphi}) = (a - C^* u, \varphi) - (u, \eta) - d$.

Якщо ліву і праву частини останньої рівності піднести до квадрату, застосувати операцію математичного сподівання та врахувати, що $M\eta = 0$, то для $I(u, d)$ одержимо

$$I(u, d) = \sup_{\varphi \in G_1} ((a - C^* u, \varphi) - d)^2 + \sup_{\eta} M(u, \eta)^2.$$

Тепер, використовуючи (14), можемо записати

$$\begin{aligned} (a - C^* u, \varphi) &= ((B_1^* B_1 + B_2^* B_2)z, \varphi) = \\ &= (B_1 z, B_1 \varphi) + (B_2 z, B_2 \varphi). \end{aligned} \quad (15)$$

Оскільки $(B_1 z, B_1 \varphi) + (B_2 z, B_2 \varphi) = \left(\begin{pmatrix} B_1 z \\ B_2 z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} B_1 \varphi \\ B_2 \varphi \end{pmatrix} \right)$, то за нерівністю Коші-Буняковського

$$\begin{aligned} |(B_1 z, B_1 \varphi) + (B_2 z, B_2 \varphi)| &\leq \\ &\leq (|B_1 z|^2 + |B_2 z|^2)^{\frac{1}{2}} (|B_1 \varphi|^2 + |B_2 \varphi|^2)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Враховуючи, що $\varphi \in G_1$, маємо

$$\begin{aligned} |(B_1 z, B_1 \varphi) + (B_2 z, B_2 \varphi)| &\leq \\ &\leq (|B_1 z|^2 + |B_2 z|^2)^{\frac{1}{2}} |q_1|. \end{aligned} \quad (16)$$

Оцінимо $M(u, \eta)^2$, застосувавши нерівність Коші-Буняковського

$$M(u, \eta)^2 \leq (u, u) \cdot M(\eta, \eta) \leq (u, u) \cdot q_2^2. \quad (17)$$

Тут ми використали (11).

Відзначимо також, що в нерівностях (16) і (17) досягається знак рівності. Отже, одержуємо

$$\begin{aligned} I(u, d) &= \\ &= ((|B_1 z|^2 + |B_2 z|^2)^{\frac{1}{2}} |q_1| - d)^2 + (u, u) \cdot q_2^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Оскільки $I(u, d) \geq 0$, то існують $\hat{u}$ і $\hat{d}$, при яких $I(u, d)$ набуває найменшого значення, тобто

$$I(\hat{u}, \hat{d}) \leq I(u, d).$$

Тим самим перша нерівність твердження 1 доведена.

Покажемо, що справджується нерівність

$$\sup_{\varphi \in G_1} |M(a, \varphi) - M(a, \hat{\varphi})| \leq I_1(\hat{u}, \hat{d}).$$

Дійсно,

$$\begin{aligned} M((a, \varphi) - (a, \hat{\varphi})) &= M((a, \varphi) - (\hat{u}, y) - \hat{d}) = \\ &= M((a, \varphi) - (\hat{u}, C\varphi) - (\hat{u}, \eta) - \hat{d}). \end{aligned}$$

Якщо врахувати, що $M\eta = 0$, то

$$M((a, \varphi) - (a, \hat{\varphi})) = (a - C^* \hat{u}, \varphi) - \hat{d}.$$

Далі, нехай $\hat{z}$ – розв'язок рівняння (14) при $u = \hat{u}$. Тоді

$$\begin{aligned} \sup_{\varphi \in G_1} |M((a, \varphi) - (a, \hat{\varphi}))| &= \\ &= \sup_{\varphi \in G_1} |(B_1 \hat{z}, B_1 \varphi) + (B_2 \hat{z}, B_2 \varphi) - \hat{d}| \leq \\ &\leq \sup_{\varphi \in G_1} ((|B_1 \hat{z}|^2 + |B_2 \hat{z}|^2)^{\frac{1}{2}} (|B_1 \varphi|^2 + |B_2 \varphi|^2)^{\frac{1}{2}}) + |\hat{d}| \leq \end{aligned}$$

$$\leq (|B_1 \hat{z}|^2 + |B_2 \hat{z}|^2)^{\frac{1}{2}} |q_1| + |\hat{d}| = I_1(\hat{u}, \hat{d}).$$

Твердження 1 доведено.

Твердження 2. Якщо $\hat{u}$ та $\hat{d}$ вибрати з умови

$$(\hat{u}, \hat{d}) \in \arg \min_{(u, d)} I(u, d), \quad (19)$$

то

$$\hat{d} = 0, \quad \hat{u} = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C \hat{z}, \quad (20)$$

де $\hat{z}$ є розв'язком рівняння

$$B_1^* B_1 \hat{z} + B_2^* B_2 \hat{z} + \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C^* C \hat{z} = a, \quad (21)$$

і, крім цього, $I(\hat{u}, 0) = (a, q_1^2 \hat{z})$.

Доведення. Враховуючи, що G_1 центрально-симетрична відносно нуля множина та результати роботи [3], одержуємо

$$\hat{d} = 0.$$

Тепер знайдемо $\min_u I(u, 0)$. Для цього знайдемо похідну Гато функціонала $I(u, 0)$. Знайдемо $I(u + tv, 0)$ врахувавши, що z є розв'язком рівняння (14). Тому, якщо в (14) підставимо $u + tv$ замість u , то замість z запишемо $z + \tilde{z}$. Отже, рівняння (14) набуде вигляду

$$(B_1^* B_1 + B_2^* B_2)(z + \tilde{z}) = a - C^* u - t C^* v.$$

Нехай $\tilde{z}$ є розв'язком рівняння

$$(B_1^* B_1 + B_2^* B_2) \tilde{z} = -C^* v. \quad (22)$$

Тоді

$$\begin{aligned} I(u + tv, 0) &= \\ &= ((B_1(z + \tilde{z}), B_1(z + \tilde{z})) + (B_2(z + \tilde{z}), B_2(z + \tilde{z}))) q_1^2 + \\ &\quad + q_2^2(u + tv, u + tv). \end{aligned}$$

З останньої рівності одержуємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{dI(u + tv, 0)}{dt} \Big|_{t=0} &= \\ &= ((B_1 z, B_1 \tilde{z}) + (B_2 z, B_2 \tilde{z})) q_1^2 + q_2^2(u, v) = \\ &= (z, (B_1^* B_1 + B_2^* B_2) \tilde{z}) q_1^2 + q_2^2(u, v). \end{aligned}$$

Прирівнявши знайдену похідну до нуля і врахувавши (22), маємо

$$(\hat{u}, v) = - \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 (\hat{z}, -C^* v),$$

тобто

$$(\hat{u}, v) = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 (C \hat{z}, v).$$

Оскільки ця рівність повинна справджуватися для будь-яких значень вектора v , то одержуємо

$$\hat{u} = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C \hat{z}.$$

Отже, рівності (20) твердження 2 доведено.

Якщо підставити $\hat{u}$ у рівняння (14), то одержимо рівняння (21), з якого можна визначити $\hat{z}$.

Тепер покажемо, що $I(\hat{u}, 0) = (a, q_1^2 \hat{z})$.

Підставимо $\hat{d} = 0$ і $u = \hat{u}$ у (18). Маємо

$$\begin{aligned} I(\hat{u}, 0) &= ((B_1 \hat{z}, B_1 \hat{z}) + (B_2 \hat{z}, B_2 \hat{z})) q_1^2 + q_2^2(\hat{u}, \hat{u}) = \\ &= ((B_1^* B_1 \hat{z}, \hat{z}) + (B_2^* B_2 \hat{z}, \hat{z})) q_1^2 + q_2^2 \left(\left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C \hat{z}, \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C \hat{z} \right) = \\ &= ((B_1^* B_1 + B_2^* B_2) \hat{z}, \hat{z}) q_1^2 + \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 (C^* C \hat{z}, \hat{z}) q_1^2 = \\ &= ((B_1^* B_1 + B_2^* B_2 + \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C^* C) \hat{z}, q_1^2 \hat{z}). \end{aligned}$$

Оскільки $\hat{z}$ є розв'язком рівняння (21), то остаточно одержуємо $I(\hat{u}, 0) = (a, q_1^2 \hat{z})$. Твердження 2 доведено.

Теорема. Для оцінки $(a, \hat{\phi}) = (\hat{u}, y)$ справджується рівність

$$(\hat{u}, y) = (a, \hat{\phi}), \quad (23)$$

де $\hat{\phi}$ є розв'язок рівняння

$$B_1^* B_1 \hat{\phi} + B_2^* B_2 \hat{\phi} = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C^* (y - C \hat{\phi}). \quad (24)$$

Доведення. Нехай $\hat{\phi}$ – розв'язок рівняння (24). Тоді враховуючи що

$$\hat{u} = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 C \hat{z},$$

маємо

$$(\hat{u}, y) = \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 (C\hat{z}, y) = \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 (\hat{z}, C^* y).$$

$$\text{де } \hat{u}_{ij} = \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 C z_{ij}.$$

Отже,

$$\text{Знайдемо } \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 C^* y \text{ з (24) і підставимо в}$$

$$\begin{aligned} (\sup_{\varphi, \eta} M \|\varphi - \hat{\varphi}\|^2)^{\frac{1}{2}} &\leq \sum_{i,j} \sup_{\varphi, \eta} M((e_i' \otimes e_j'', \varphi) - (\hat{u}_{ij}, y))^2 \leq \\ &\leq \sum_{i,j} (e_i' \otimes e_j'', z_{ij}) q_1^2. \end{aligned}$$

останню рівність

$$(\hat{u}, y) = (\hat{z}, (B_1^* B_1 + B_2^* B_2) \hat{\varphi}) + \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 (\hat{z}, C^* C \hat{\varphi}). \quad (25)$$

Звідси випливає нерівність (27). Наслідок доведено.

Далі припустимо, що простір Y є тензорним добутком евклідових просторів R^{N_1} та R^{N_2} , тобто $Y = R^{N_1} \otimes R^{N_2}$. Нехай

$$y_{ks} = \sum_{i,j} c_{ksij} (g_i' \otimes g_j'', \varphi) + \xi_{ks}, \quad k \in K, \quad s \in S, \quad \text{де}$$

$g_i' \in H_1^*$, $g_j'' \in H_2^*$, ξ_{ks} – реалізації незалежних випадкових величин з нульовим математичним сподіванням, причому $\sum_{k,s} M \xi_{ks}^2 \leq q_2^2$. Тоді

рівняння для z матимуть вигляд

$$B_1^* B_1 z + B_2^* B_2 z = a - \sum_{k,s} \left(\sum_{i,j} c_{ksij} g_i' \otimes g_j'' \right) u_{ks},$$

Причому

$$\hat{u}_{ks} = \frac{q_1^2}{q_2^2} \sum_{i,j} c_{ksij} (g_i' \otimes g_j'', \hat{z}) = \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 \sum_{i,j} c_{ksij} \mu_{ij},$$

$k \in K, s \in S$.

Зауважимо, що числа μ_{ij} можемо знайти як розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Позначимо $B = B_1^* B_1 + B_2^* B_2$. Шукатимемо $\hat{z}$ у вигляді

$$\hat{z} = z_1 - \sum_{i,j} \mu_{ij} z_{ij},$$

де z_1 – розв'язок рівняння $B z_1 = a$, z_{ij} – розв'язки рівнянь

$$B z_{ij} = \sum_{k,s} c_{ksij} c_{ks1j1} g_i' \otimes g_j'' \frac{q_1^2}{q_2^2}.$$

Тому

$$(g_i' \otimes g_j'', \hat{z}) = (g_i' \otimes g_j'', z_1) - \sum_{i,j} \mu_{ij} (g_i' \otimes g_j'', z_{ij}).$$

Отже, для μ_{ij} одержуємо систему рівнянь

Врахуємо, що $\hat{z}$ є розв'язок рівняння (14) при $u = \hat{u}$, тобто

$$(B_1^* B_1 + B_2^* B_2) \hat{z} = a - \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 C^* C \hat{z}. \quad (26)$$

Підставляючи (26) у (25), одержимо

$$(\hat{u}, y) = (a, \hat{\varphi}) - \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 (\hat{z}, C^* C \hat{\varphi}) + \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 (\hat{z}, C^* C \hat{\varphi}).$$

Отже, $(\hat{u}, y) = (a, \hat{\varphi})$.

Теорема доведена.

Нехай H_1, H_2 – сепарабельні гільбертові простори і $\{e_i'\}, \{e_j''\}$ – ортонормовані базиси цих просторів.

Наслідок. Для мінімаксної середньоквадратичної оцінки $\hat{\varphi}$ вектора φ справедлива нерівність

$$\sigma = \left\{ \sup_{\varphi, \eta} M \|\varphi - \hat{\varphi}\|^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \leq \sum_{i,j} (e_i' \otimes e_j'', z_{ij}) q_1^2, \quad (27)$$

де z_{ij} розв'язок рівняння

$$(B_1^* B_1 + B_2^* B_2) z_{ij} + \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2 C^* C z_{ij} = e_i' \otimes e_j''.$$

Доведення. Вектори $\{e_i' \otimes e_j''\}$ утворюють ортонормований базис в $H_1 \otimes H_2$. Тому справджується рівність

$$\begin{aligned} M \|\varphi - \hat{\varphi}\|^2 &= \sum_{i,j} M((e_i' \otimes e_j'', \varphi) - (e_i' \otimes e_j'', \hat{\varphi}))^2 = \\ &= \sum_{i,j} M((e_i' \otimes e_j'', \varphi) - (\hat{u}_{ij}, y))^2 \end{aligned}$$

$$\mu_{i,j} + \sum_{l,j} (g'_{il} \otimes g''_{jl}, z_{ij}) \mu_{ij} = (g'_{il} \otimes g''_{jl}, z_1).$$

Зауважимо також, що й $\hat{\varphi}$ можна виразити через розв'язки системи алгебраїчних рівнянь. Дійсно, в цьому випадку рівняння (24) запишеться у вигляді

$$B_1^* B_1 \hat{\varphi} + B_2^* B_2 \hat{\varphi} = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 y_1 - \sum_{k,j} \left(\sum_{l,j} c_{kslj} g'_i \otimes g''_j \right) \varphi_{ks},$$

де

$$\begin{aligned} \varphi_{ks} &= \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 \sum_{l,j} c_{kslj} (g'_i \otimes g''_j, \hat{\varphi}) = \\ &= \frac{q_1^2}{q_2^2} \sum_{l,j} c_{kslj} \beta_{lj}, \end{aligned}$$

а $y_1 = C^* y$.

Далі будемо шукати $\hat{\varphi}$ у вигляді

$$\hat{\varphi} = \varphi_1 - \sum_{l,j} \beta_{lj} v_{lj},$$

де φ_1 та v_{lj} – розв'язки рівнянь

$$B \varphi_1 = \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2 y_1,$$

$$B v_{lj} = \sum_{k,x,l_1,j_1} c_{kslj} c_{ksl_1j_1} g'_{l_1} \otimes g''_{j_1} \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^2.$$

Враховуючи ці співвідношення для чисел β_{lj} одержимо систему лінійних алгебраїчних рівнянь.

Список використаних джерел

1. Березанский Ю.М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов / Березанский Ю.М. – К.: Наукова думка, 1965 – 799 с.
2. Наконечный А.Г. Минимаксное оценивание функционалов от решений вариационных уравнений в гильбертовых пространствах / Наконечный А.Г. – К.: КГУ, 1985. – 83 с.
3. Бублик Б.Н. Некоторые задачи наблюдения и управления в линейных системах / Бублик Б.Н., Данилов В.Я., Наконечный А.Г. – К.: УМК ВО, 1988. – 191 с.

4. Наконечный О.Г. Оптимальное керування та оцінювання в рівняннях із частинними похідними / Наконечный О.Г. – К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2004. – 103 с.
5. Наконечный О.Г. Мінімаксні оцінки розв'язків рівнянь із змінною структурою в умовах невизначеності / О.Г. Наконечний, Х.Ф. Паращук // Problems of decision making under uncertainties (PDMU-2007) : International Conference, September 17-22, 2007 : тези доповідей. – Kyiv – Novy Svit: 2007. – с.94.
6. Наконечный О.Г. Оцінки параметрів рівнянь з частинними різницями в умовах невизначеності / О.Г. Наконечний, Х.Ф. Паращук // Problems of decision making under uncertainties (PDMU-2008) International Conference, May 12-17, 2008. – Kyiv – Rivne: 2008. – с. 171-172.
7. Наконечный О.Г. Оцінювання параметрів в умовах невизначеності / О.Г. Наконечний // Наукові записки КНУ ім. Т.Г. Шевченка. – 2004. – Том 7: факультет кібернетики. С. 102-112.
8. Демиденко С.В. До проблеми мінімаксного оцінювання розв'язків одновимірних крайових задач / С.В. Демиденко, С.М. Жук, О.Г. Наконечний // Таврический вестник информатики и математики. – 2007. – № 1: – С. 7-23.
9. S. Zhuk. State estimation for a dynamical system described by a linear equation with unknown parameters / S. Zhuk // Ukrainian Mathematical Journal, 61(2): 178-194, 2009.

УДК 004.415.2

Т.С. Парфірова, аспірант*

Ациклічні композиційні програми та їх властивості

Структура, поведінка та властивості ациклічних програм досліджуються методами композиційного програмування. Встановлюються зв'язки ациклічних програм з послідовно-паралельними та ланцюговими програмами. Зокрема показано, що ациклічну програму можливо перетворити на еквівалентну послідовно-паралельну програму, яка може містити більшу кількість входжень базисних підпрограм, але не містить додаткових імен; ациклічну програму можна перетворити на еквівалентну ланцюгову за рахунок введення додаткових імен, але без додаткових входжень базисних підпрограм. Показано, що послідовна та паралельна композиції ациклічних програм також є ациклічними програмами.

Ключові слова: композиційне програмування, ациклічна програма, послідовно-паралельна програма, ланцюгова програма.

*E-mail: eremita.t@gmail.com

Статтю представив с.н.с., д.ф.-м.н. Буй Д.Б. (член редколегії журналу)

Постановка задачі

У попередніх роботах [1, 2] розглядалися будова, властивості та поведінка доволі простого різновиду програм, в яких підпрограми працюють послідовно, одна за одною, а дані проходять шлях від початку до кінця лише в одному напрямку. Було обґрунтовано, що зазначений принцип притаманний макрорівню побудови систем обробки інформації, зокрема програмним системам, що підтримують управлінську діяльність, електронний документообіг, освітню діяльність тощо. Крім того, показано [3], що послідовний тип будови є найбільш простим і природним з багатьох можливих втілень еталонної моделі взаємодії в термінах сутісної платформи [4, 5].

У роботах [1, 2] описані і досліджені математичні моделі двох часткових випадків зазначеного виду програмних систем: послідовно-паралельних та ланцюгових, а також було доведено можливість зведення перших до других. Важливо, що таке зведення не збіль-

T. S. Parfirova, Ph.D student*

Acyclic compositional programs and their properties

Structure, behaviour and properties of acyclic programs are investigated by means of compositional programming methodology. Relations of acyclic programs to sequential-parallel and chain programs are revealed. In particular, it is shown that any acyclic program can be transformed into an equivalent sequential-parallel program that can have more usages of basic subroutines but does not have extra names; any acyclic program can be transformed into an equivalent chain program introducing additional names but without extra usages of basic subroutines. It is shown that sequential and parallel compositions of acyclic programs yield to programs that are acyclic too.

Key Words: compositional programming, acyclic program, sequential-parallel program, chain program.

шує число входжень базисних функцій в композиційний терм, що представляє систему, проте вимагає введення допоміжних імен (змістовно – для резервних копій даних).

Задачею даної роботи є висунути математичну модель, яка б адекватно описувала більш широкий клас систем, які будемо називати ациклічними, а також виявити її зв'язки з моделями, представленими в [1, 2].

Основні поняття і означення композиційного програмування

Тотожне відображення множини X на себе будемо позначати через $\text{id}_X = \{(x, x) | x \in X\}$, область визначення та область значень функції f – через $\text{dom } f$ та $\text{rang } f$ відповідно. Через X^Y позначаємо множину всіх відображень множини Y в множину X . Через $\alpha|U$ позначено обмеження бінарного відношення α на множину U , $\text{pr}_i \alpha$ означає проекцію відношення α по i -й компоненті. Через $\circ$

позначимо множення унарних функцій:
 $(f \circ g)(x) = g(f(x))$.

Відповідно до композиційного програмування (КП) [6-8] і розробленої на його основі сутнісної платформи [4, 5, 9], дані моделюються іменними множинами (ІМ), а програми – іменними функціями (ІФ). Позначимо через V і D множину всіх імен і денотатів відповідно. V -іменною множиною називають скінченне функціональне¹ бінарне відношення $\alpha \in D^V$, $V \subseteq V$. Клас всіх іменних множин позначимо через N .

За означенням, ІФ – це унарна часткова функція вигляду $f: N \rightarrow N$. ІФ f називається V -арною, якщо $\text{dom } f \subseteq D^V$, і (V, W) -арною, якщо до того ж $\text{rang } f \subseteq D^W$, $V, W \subseteq V$. Не кожна іменна функція має визначену арність. Функція, яка має деяку арність, називається поліарною. Всюди далі розглядаються лише поліарні іменні функції.

Обмеженням назвемо параметричну $(V, U \cap V)$ -арну ІФ $\uparrow_U^V$ (де $U, V \subseteq V$), таку, що

$$\uparrow_U^V(\alpha) = \alpha \upharpoonright U = \{(u, d) \mid (u, d) \in \alpha \wedge u \in U\},$$

при $\alpha \in D^V$.

Переіменуванням назвемо параметричну (V, U) -арну ІФ $\uparrow^\xi$, де $U, V \subseteq V$; $\xi: U \rightarrow V$, таку, що

$$\uparrow^\xi(\alpha) = \{(u, \alpha(\xi(u))) \mid u \in U\}, \text{ при } \alpha \in D^V.$$

Змістовно, ця операція заміняє в ІМ α імена $v \in \text{rang } \xi \subseteq V$ на нові імена $u \in U$, такі, що $\xi(u) = v$. Відмітимо, що взаємна однозначність відображення ξ не вимагається, тобто одне ім'я з α може після переіменування перейти в декілька нових імен. Безпосередньо з означення слідує, що якщо $\text{pr}_1 \alpha = V \subseteq \text{pr}_2 \xi = W$, то $(\uparrow_W^V \circ \uparrow^\xi)(\alpha) = \xi \circ \alpha$ (слід мати на увазі, що ІМ α саме є функцією, що іменам ставить у відповідність денотати).

Накладання ІМ визначається так:

$$\alpha \nabla \beta = \beta \cup \{(u, d) \mid (u, d) \in \alpha, u \notin \text{pr}_1(\beta)\}.$$

Можна довести асоціативність накладання [14].

Операції над ІФ називають композиціями. Змістовно, композиції моделюють збирання складної програми з більш простих програм (підпрограм). Для подальшого розгляду потрібні дві композиції: множення ІФ (відповідає послідовному виконанню) та накладання ІФ (відповідає паралельному виконанню), означених наступним чином:

$$(f \circ g)(\alpha) = (g(f(\alpha))),$$

$$(f \nabla g)(\alpha) = f(\alpha) \nabla g(\alpha).$$

Слід звернути увагу на те, що в останній формулі знаком ∇ позначено операцію над ІФ в лівій частині і операцію над ІМ в правій; це не повинно призводити до непорозумінь, оскільки з контексту завжди ясно, який з двох сенсів мається на увазі.

Нехай ІФ f та g – відповідно (U_1, V_1) - та (U_2, V_2) -арні. Тоді ІФ $f \circ g \in (U_1, V_2)$ -арною, якщо $V_1 = U_2$, та всюди невизначеною в іншому випадку. ІФ $f \nabla g \in (U, V_1 \cup V_2)$ -арною, якщо $U_1 = U_2 = U$, інакше – всюди невизначеною.

Всюди нижче, говорячи про еквівалентність ІФ, маємо на увазі, що на однакових аргументах дві ІФ або мають однаковий результат, або разом невизначені: $\forall \alpha \in N f(\alpha) = g(\alpha)$.

Послідовно-паралельні та ланцюгові функції

Поняття послідовно-паралельних та ланцюгових функцій були запроваджені в роботах [1, 2]. Коротко нагадаємо їх означення та основні властивості, що будуть використовуватися далі.

Нехай Φ – деяка множина ІФ. ІФ h називається послідовно-паралельною в базисі Φ , якщо її можна побудувати з функцій множини Φ та функцій $\uparrow_U^V$, $\uparrow^\xi$, id_V за допомогою композицій $\circ$ та ∇ .

Ланкою з ядром f називається ІФ вигляду

$$h = L_\xi^\zeta(f) = \uparrow^\xi \nabla (\uparrow_{\text{pr}_2(\xi)}^{\text{pr}_2(\zeta)} \circ \uparrow^\zeta \circ f),$$

де ξ та ζ – відображення імен, $\xi: U \rightarrow V$, $\zeta: U' \rightarrow V'$, для деяких $U, V, U', V' \subseteq V$ (див. рис. 1.)

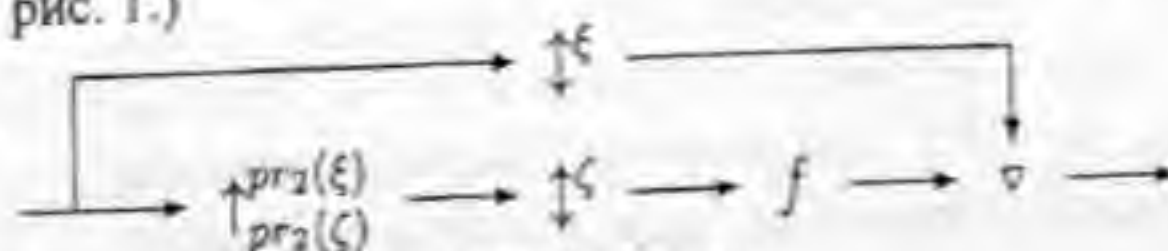


Рис. 1. Ланка

¹ Одним із відгалужень КП є композиційно-номінативний підхід (М.С. Нікітченко), в якому, зокрема, знімається вимога функціональності відношення іменування [10-13].

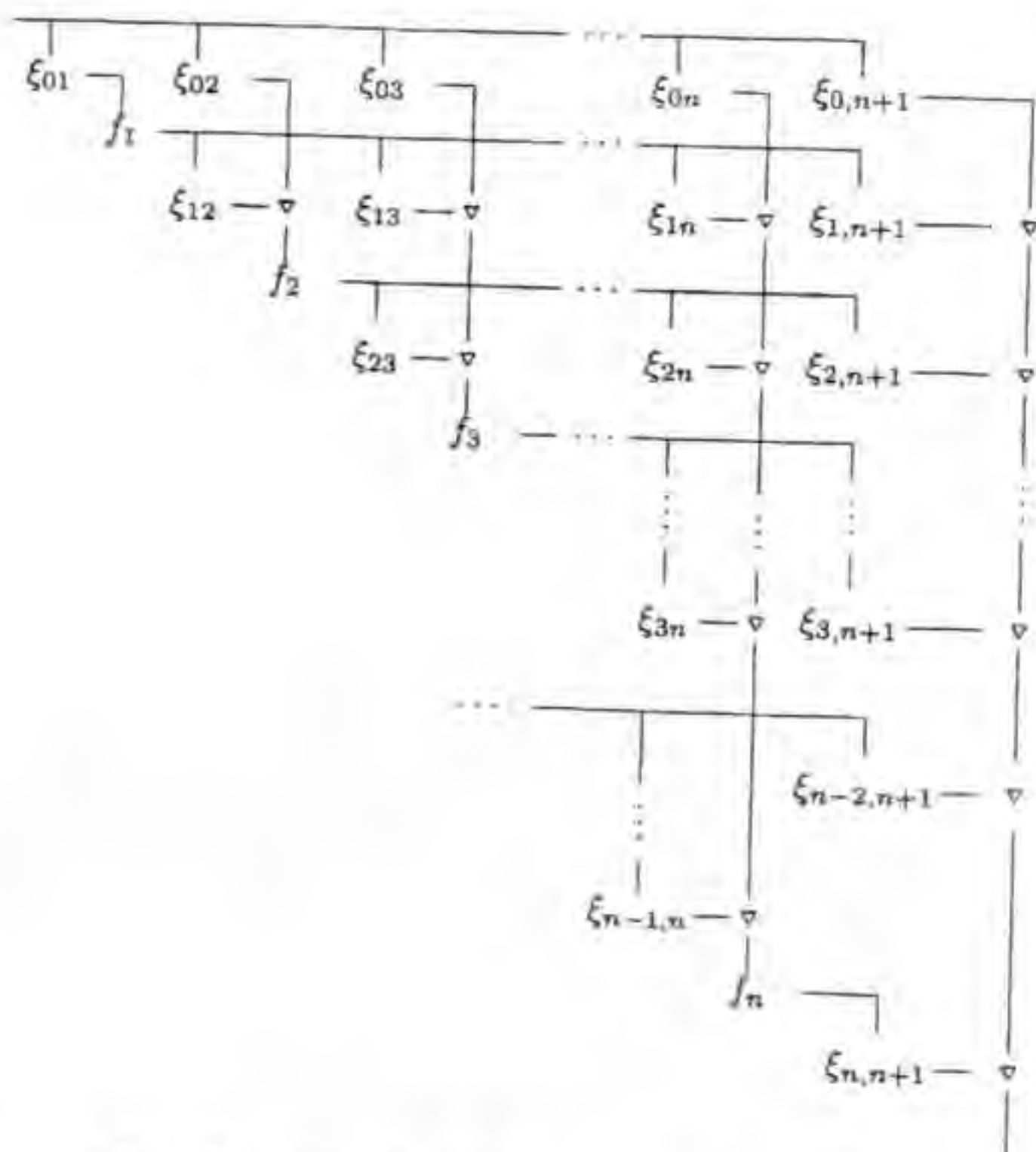


Рис. 2. Ациклічна ІФ в загальному випадку

Змістовно це означає, що з даних, поданих на вхід ланки, виділяється певна частина і, після перейменування, направляється на вхід підпрограми f ; дані з виходу цієї підпрограми, накладені на перейменовану копію всіх вхідних даних, утворюють результат роботи ланки. Зазначимо, що перейменування ξ використовується для створення „резервної копії” вхідних даних.

Ланцюговою в базисі Φ називається ІФ вигляду $h = h_1 \circ h_2 \circ \dots \circ h_n$, де кожна з ІФ h_i ($i = 1, \dots, n$) є ланкою з деяким ядром $f \in \Phi$.

Доведено в [1, 2], що будь-яку послідовно-паралельну ІФ f в базисі Φ з деякою арністю (U, V) можна перетворити на ланцюгову ІФ $\hat{f}$ з арністю $(U, \hat{V})$, $V \subseteq \hat{V}$, еквівалентну з точністю до зайвих імен в результаті: $f = \hat{f} \circ \uparrow_V^V$.

Ациклічні функції

Нагадаємо означення з [15]. Нехай програма складається з n підпрограм f_i ($i = 1, \dots, n$). Вхід програми в цілому розглядається як вихід її уявної 0-ї підпрограми; дуальним чином, вихід ациклічної програми розглядається як вхід її уявної $(n+1)$ -ї підпрограми. Характеристична особливість ациклічних програм полягає в тому,

що відношення „діяти після”, або „використовувати дані від” є частковим порядком на множині підпрограм. Цей порядок можна доповнити до лінійного: для всіх i, j , де $0 \leq i, j \leq n+1$, канал передачі даних з виходу i -ї підпрограми на вхід j -ї існує лише при $i < j$.

Припустимо, функції f_i мають арність (U_i, V_i) при $i = 1, \dots, n$. Нехай дана множина імен V , яку також будемо позначати через V_0 , та множина імен U , яку також позначимо через U_{n+1} . Нехай для всіх i, j , де $0 \leq i < j \leq n+1$, дано відображення $\xi_{ij} : V \rightarrow V$.

Сукупність цих відображень можна розглядати як трикутну матрицю Ξ , яка має $n+1$ рядок і стільки ж стовпчиків, причому нумерація рядків починається з 0, а стовпчиків – з 1. Домовимось надалі позначати матриці відображень та їх елементи відповідними грецькими літерами: матриця Ψ елементів ψ_{ij} , матриця Z елементів ζ_{ij} тощо.

Накладаються наступні обмеження:

$$V_i \supseteq \bigcup_{j=i+1}^{n+1} \text{pr}_2(\xi_{ij}), i = \overline{0, n},$$

$$U_j = \bigcup_{i=0}^{j-1} \text{pr}_i(\xi_{ij}), \quad j = \overline{1, n+1}.$$

Тоді, за означенням, ациклічна ІФ в базисі Φ – це (V, U) -арна ІФ $f = T_{V,U}^{\Xi}(f_1, \dots, f_n)$, така, що $f_1, \dots, f_n \in \Phi$, та для будь-якої V -іменної множини α значення $\beta = f(\alpha)$ визначається за наступними рекурентними співвідношеннями, де $\alpha_0 = \alpha$, $\beta = \beta_{n+1}$ (рис. 2):

$$\beta_k = \bigvee_{i=0}^{k-1} (\xi_{ik} \circ \alpha_i), \quad \text{при } k = \overline{1, n+1},$$

$$\alpha_k = f_k(\beta_k), \quad \text{при } k = \overline{1, n}.$$

Зазначимо, що α_i при $0 \leq i \leq n$ є значенням функції f_i (змістовно, результатом роботи i -ї підпрограми), а β_i при $1 \leq i \leq n+1$ є аргументом функції f_i .

Іншими словами, $f = T_{V,U}^{\Xi}(f_1, \dots, f_n)$ є $(n+1)$ -м членом рекурентної послідовності функцій, означеної наступним чином:

$$f'_0 = \text{id}_{D^V},$$

$$f'_1 = (f'_0 \circ \uparrow_{\text{pr}_2 \xi_{01}}^{V_0} \circ \downarrow^{\xi_{01}}) \circ f_1,$$

$$f'_2 = (f'_0 \circ \uparrow_{\text{pr}_2 \xi_{02}}^{V_0} \circ \downarrow^{\xi_{01}} \vee f'_1 \circ \uparrow_{\text{pr}_2 \xi_{12}}^{V_1} \circ \downarrow^{\xi_{12}}) \circ f_2,$$

...

$$f'_{k+1} = \left(\bigvee_{i=0}^k f'_i \circ \uparrow_{\text{pr}_2 \xi_{i,k+1}}^{V_i} \circ \downarrow^{\xi_{i,k+1}} \right) \circ f_{k+1}.$$

Властивості ациклічних ІФ

Твердження 1 (про тривіальні ациклічні ІФ). Довільну ІФ f можна представити як ациклічну ІФ в базисі $\{f\}$.

Справді, нехай функція f має арність (U, V) . Тоді $f = T_{U,V}^{\Xi}(f)$ при

$$\Xi = \begin{bmatrix} \text{id}_U & \emptyset \\ & \text{id}_V \end{bmatrix}.$$

Тут і надалі в матрицях $\emptyset$ інтерпретується як всюди невизначена функція.

Твердження 2 (про ациклічність елементарного добутку). Скінченний добуток, тобто ІФ вигляду $f = f_1 \circ \dots \circ f_n$ можна представити як ациклічну ІФ в базисі $\{f_1, \dots, f_n\}$.

Нехай ІФ f_i має арність (U_i, V_i) для всіх $i = \overline{1, n}$. Для того, щоб ІФ f не була всюди невизначеною, необхідно $V_i = U_{i+1}$ для всіх $i = \overline{1, n-1}$. Перепозначимо U_1 через V_0 . Тоді

$$f = T_{V_0, V_n}^{\Xi}(f_1, \dots, f_n)$$

при

$$\Xi = \begin{bmatrix} \text{id}_{V_0} & \emptyset & \dots & \emptyset \\ & \text{id}_{V_1} & \dots & \emptyset \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \text{id}_{V_n} \end{bmatrix}.$$

Твердження 3 (про ациклічність елементарного накладання). Скінченне накладання, тобто ІФ вигляду $f = f_1 \vee \dots \vee f_n$ можна представити як ациклічну ІФ в базисі $\{f_1, \dots, f_n\}$.

Нехай ІФ f_i має арність (U, V_i) для всіх $i = \overline{1, n}$ (якщо перші компоненти арностей не всі рівні між собою, то функція f всюди невизначена). Позначимо $V = \bigcup_{i=1}^n V_i$. Тоді

$$f = T_{U,V}^{\Xi}(f_1, \dots, f_n) \text{ при}$$

$$\Xi = \begin{bmatrix} \text{id}_U & \text{id}_U & \dots & \text{id}_U & \emptyset \\ & \emptyset & \dots & \emptyset & \text{id}_{V_1} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & \emptyset & \text{id}_{V_{n-1}} \\ & & & & \text{id}_{V_n} \end{bmatrix}.$$

Розгляд подальших властивостей ациклічних ІФ в загальному випадку вимагає великої кількості технічних деталей, тому вони будуть показані на змістовних прикладах.

Твердження 4 (про структурну складність ациклічних ІФ). Не кожна ациклічна ІФ за своєю структурою є послідовно-паралельною в тому ж базисі (разом з тим, для кожної ациклічної ІФ можна побудувати послідовно-паралельну, яка співпадає з нею в сенсі відношення „вхід-вихід”, див. Твердження 5).

В якості приклада можна взяти функцію (див. рис. 3) $f = T_{V_0 \cup V_4}^{\Xi}(f_1, f_2, f_3)$, в базисі $\{f_1, f_2, f_3\}$, де

$$\Xi = \begin{bmatrix} \text{id}_{\{x,y\}} & \emptyset & \text{id}_{\{y\}} & \emptyset \\ & \text{id}_{\{x\}} & \emptyset & \text{id}_{\{x\}} \\ & & \text{id}_{\{x\}} & \emptyset \\ & & & \text{id}_{\{y\}} \end{bmatrix},$$

при арностях, вказаних у табл. 1.

Таблиця 1.

Арності функцій f_i .

i	0	1	2	3
V_i	$\{x, y\}$	$\{x\}$	$\{x\}$	$\{y\}$
U_{i+1}	$\{x, y\}$	$\{x\}$	$\{x, y\}$	$\{x, y\}$

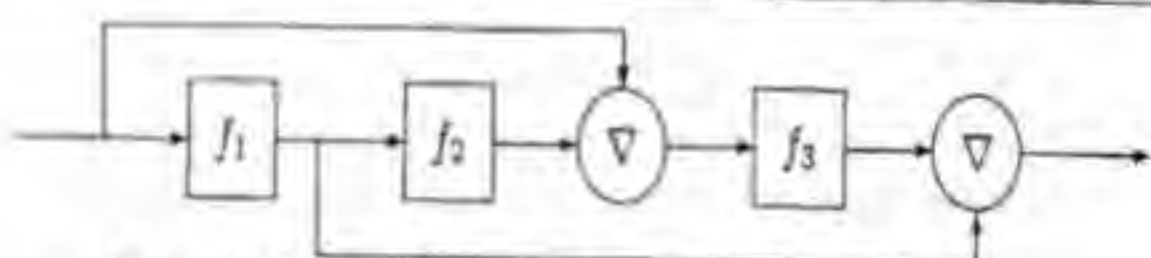


Рис. 3. Ациклічна ІФ, що не є послідовно-паралельною

З означення послідовно-паралельної ІФ слідує, що вона є або базисною ІФ, або добутком чи накладанням двох послідовно-паралельних ІФ. Видно, що ІФ f не є ні добутком, ні накладанням якихось інших ІФ.

Твердження 5 (про зведення ациклічних ІФ до послідовно-паралельного вигляду). Кожну ациклічну ІФ можна перетворити на еквівалентну їй послідовно-паралельну в тому ж базисі, при цьому кількість входжень базисних функцій в композиційний терм збільшиться, але не вводяться додаткові імена.

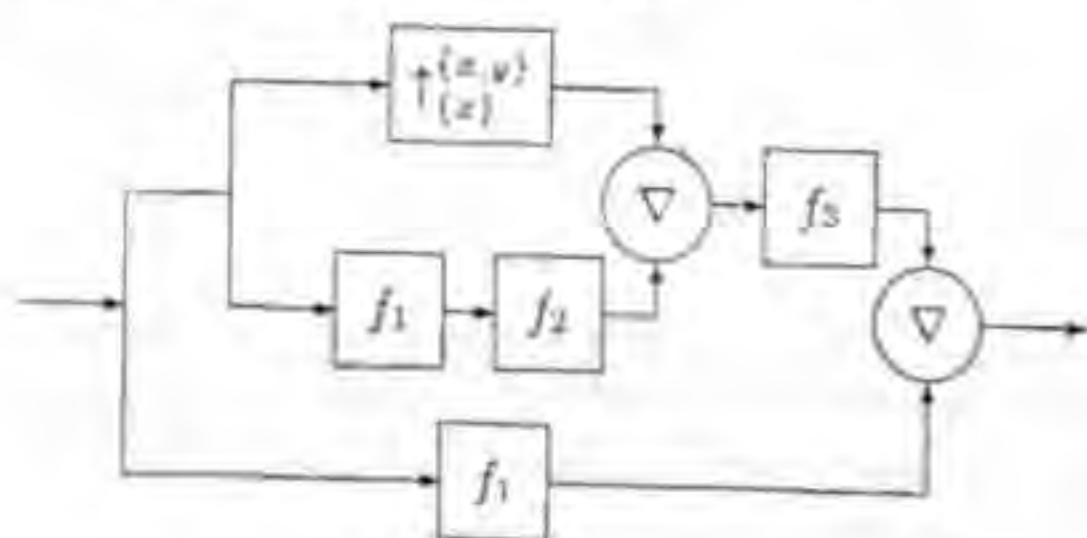


Рис. 4. Послідовно-паралельна ІФ, еквівалентна ациклічній

Для ациклічної ІФ з попереднього прикладу маємо еквівалентну послідовно-паралельну ІФ (див. рис. 4):

$$f = f_1 \nabla \left(\left(\uparrow_{\{x\}}^{\{x,y\}} \nabla (f_1 \circ f_2) \right) \circ f_3 \right).$$

Як видно, послідовно-паралельна ІФ має на одне входження функції f_1 більше, ніж вихідна ациклічна ІФ.

Твердження 6 (про зведення ациклічних ІФ до ланцюгового вигляду). Кожну ациклічну

ІФ можна перетворити на еквівалентну (з точністю до „зайвих” імен) ланцюгову ІФ в тому ж базисі, композиційний терм якої має таку ж кількість входжень базисних функцій, але містить додаткові імена.

Зазначимо, що більш слабе твердження „кожну ациклічну ІФ можна перетворити на еквівалентну їй ланцюгову (в тому ж базисі)” – тривіальне. Справді, згідно з попереднім ациклічну функцію можна перетворити на еквівалентну послідовно-паралельну (збільшивши, в загальному випадку, кількість входжень базисних функцій), а її, в свою чергу, на ланцюгову, згідно основної теореми [2]. Щоб уникнути зайвих входжень базисних функцій, потрібно перетворювати ациклічну ІФ безпосередньо в ланцюгову.

Спосіб 1. Для ациклічної ІФ з попередніх прикладів еквівалентною є наступна ланцюгова функція, параметри якої ξ_i та ζ_i наведені в табл. 2.

$$g = L_{\xi_1}^{\zeta_1}(f_1) \circ L_{\xi_2}^{\zeta_2}(f_2) \circ L_{\xi_3}^{\zeta_3}(f_3) \circ \uparrow_{\{x,y\}}^{\{x,x',y\}}$$

Таблиця 2.

Відображення ξ_i та ζ_i .

i	ξ_i	ζ_i
1	$\{x \mapsto x, y \mapsto y\}$	$\{x \mapsto x, y \mapsto y\}$
2	$\{x' \mapsto x, y \mapsto y\}$	$\{x \mapsto x\}$
3	$\{x' \mapsto x, x \mapsto x', y \mapsto y\}$	$\{x \mapsto x, y \mapsto y\}$

Таким чином, ациклічну функцію вдалося перетворити на ланцюгову, залучивши лише одне додаткове ім'я x' .

Спосіб 2. Разом з тим, найбільший інтерес становить загальний (хоча й, можливо, менш економний щодо допоміжних імен) метод перетворення ациклічних ІФ на ланцюгові. Пояснимо основну ідею такого методу. Припустимо, що x – одне з імен на виході i -ї підпрограми, $x \in V_i$, включаючи й особливий випадок $i = 0$, що відповідає входу усієї системи. Тоді $(i+1)$ -а ланка ланцюгової функції має перетворити його на нове ім'я x_i . Крім того, будь-яка ланка (нехай вона має номер k) має передавати на свій вихід незмінними всі отримані на вході імена вигляду x_j , де $0 \leq j < k$. Це означає, що на виході k -ї ланки є копії результатів роботи усіх попередніх ланок під допоміжними іменами вигляду x_j (таке ім'я дозволяє однозначно визначити i номер j

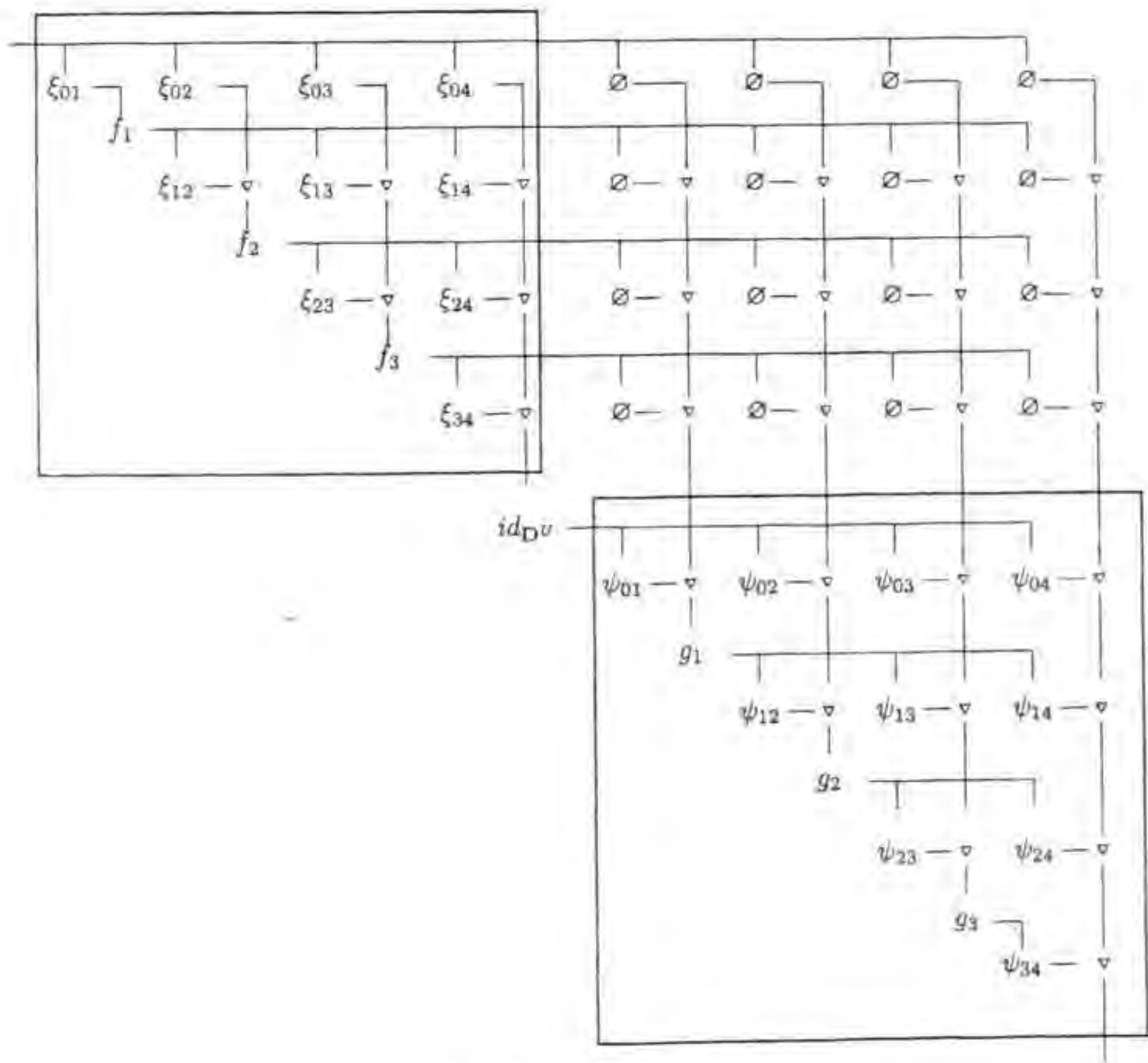


Рис. 5. Добуток двох ациклічних ІФ

підсистеми-попередника, від якої надійшов цей результат, і ім'я x , під яким його виробила функція f_j) та власні результати функції-ядра даної ланки f_k під іменами з множини V_k . Дуальним чином, якщо функції f_j на вхід потрібні дані під іменем x з виходу функції f_i для деякого $i < j-1$, тобто якщо $\xi_{i,j}(y) = x$ при деякому y , то ζ -компонента j -ї ланки ланцюгової функції має перейменувати x в y .

Таким чином, ланцюгова функція, еквівалентна даній ациклічній, будується з ланок, кожна з яких відповідає одній функцій-компоненту ациклічної функції та утворюється за описаним вище правилом, а також ще однієї ланки, яка відповідає за збирання результату функції з результатів її ланок. Для наведеного прикладу маємо таку ланцюгову функцію, параметри якої показані в табл. 3:

$$g = L_{\zeta_1}^{\xi_1}(f_1) \circ L_{\zeta_2}^{\xi_2}(f_2) \circ L_{\zeta_3}^{\xi_3}(f_3) \circ L_{\zeta_4}^{\xi_4}(id_{DV}) \circ \uparrow_{\left[\begin{smallmatrix} x_0, y_0, x_1, x_2, x, y \\ x, y \end{smallmatrix} \right]}.$$

Таблиця 3.

Відображення ξ_i та ζ_i для прикладу загального методу перетворення ациклічної ІФ на ланцюгову.

i	ξ_i	ζ_i
1	$\{x_0 \mapsto x, y_0 \mapsto y\}$	$\{x \mapsto x, y \mapsto y\}$
2	$\{x_0 \mapsto x_0, y_0 \mapsto y_0, x_1 \mapsto x\}$	$\{x \mapsto x\}$
3	$\{x_0 \mapsto x_0, y_0 \mapsto y_0, x_1 \mapsto x_1, x_2 \mapsto x\}$	$\{x \mapsto x, y \mapsto y_0\}$
4	$\{x_0 \mapsto x_0, y_0 \mapsto y_0, x_1 \mapsto x_1, x_2 \mapsto x_2, x \mapsto x_1, y \mapsto y\}$	$\emptyset$

Замкненість класу ациклічних ІФ відносно композицій множення та накладання

Твердження 7 (про замкненість відносно множення). Для довільних ациклічних функцій $f = T_{V,U}^{\Xi}(f_1, \dots, f_m)$ та $g = T_{U,W}^{\Psi}(g_1, \dots, g_n)$ їх

$$\begin{bmatrix} \xi_{01} & \dots & \xi_{0m} & \psi_{01} \circ \xi_{0,m+1} & \psi_{02} \circ \xi_{0,m+1} & \dots & \psi_{0n} \circ \xi_{0,m+1} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \xi_{m-1,m} & \psi_{01} \circ \xi_{m-1,m+1} & \psi_{02} \circ \xi_{m-1,m+1} & \dots & \psi_{0n} \circ \xi_{m-1,m+1} \\ & & & \psi_{01} \circ \xi_{m,m+1} & \psi_{02} \circ \xi_{m,m+1} & \dots & \psi_{0n} \circ \xi_{m,m+1} \\ & & & & \psi_{12} & \dots & \psi_{1,n+1} \\ & & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & & \psi_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

Рис. 6. Матриця перейменувань Z' для 2-го способу перетворення добутку ациклічних ІФ на ациклічну ІФ (твердження 7).

добуток $f \circ g$ може бути перетворений на еквівалентну ациклічну функцію.

Становлять інтерес два способи такого перетворення.

Спосіб 1. Згадаємо, що за означенням вихід ациклічної програми моделюється як вхід її уявної $(n+1)$ -ї підпрограми і навпаки, вхід ациклічної програми моделюється як вихід її уявної 0-ї підпрограми. Врахуємо також, що добуток $f \circ g$ не зміниться, якщо ввести до нього додатковий член, тотожну ІФ, арність якої узгоджена з арностями множників:

$$f \circ g = f \circ \text{id}_U \circ g.$$

Звідси безпосередньо маємо ациклічну ІФ (її структура графічно зображена на рис. 5)

$$h = T_{U,W}^Z(f_1, \dots, f_m, \text{id}_U, g_1, \dots, g_n),$$

де матриця перейменувань Z розмірності $(m+n+2) \times (m+n+2)$ має вигляд

$$Z = \begin{bmatrix} \xi_{01} & \dots & \xi_{0,m+1} & \emptyset & \dots & \emptyset \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \xi_{m,m+1} & \emptyset & \dots & \emptyset \\ & & & \psi_{01} & \dots & \psi_{0,n+1} \\ & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & \psi_{n,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Xi & \emptyset \\ & \Psi \end{bmatrix}.$$

Іншими словами,

$$\xi_{ij} = \begin{cases} \xi_{ij} & \text{при } 0 \leq i < j \leq m+1, \\ \psi_{i-m-1, j-m-1} & \text{при } m+1 \leq i < j \leq m+n+2, \\ \emptyset & \text{в інших випадках.} \end{cases}$$

Спосіб 2. Еквівалентною до добутку $f \circ g$ буде також ІФ $h' = T_{U,W}^{Z'}(f_1, \dots, f_m, g_1, \dots, g_n)$, де матриця перейменувань Z' розмірності $(m+n+1) \times (m+n+1)$ має вигляд, показаний на рис. 6., тобто

$$\xi'_{ij} = \begin{cases} \xi_{ij} & \text{при } 0 \leq i < j \leq m, \\ \psi_{i-m, j-m} & \text{при } m+1 \leq i < j \leq m+n+1, \\ \psi_{0, j-m} \circ \xi_{i, m+1} & \text{в інших випадках.} \end{cases}$$

Видно, що в першому способі в ациклічну програму вводиться одна проміжна, інтерфейсна підпрограма. З одного боку, ця підпрограма тривіальна, а з другого – її введення спрощує вигляд матриці Z , уникаючи перехресних зв'язків між підпрограмами f_i та g_i .

Твердження 8 (про замкненість відносно накладання). Накладання $f \nabla g$ довільних ациклічних ІФ $f = T_{U,V}^\Xi(f_1, \dots, f_m)$ та $g = T_{U,W}^\Psi(g_1, \dots, g_n)$ може бути перетворене на еквівалентну ациклічну функцію вигляду

$$h = T_{U,V \cup W}^\Phi(f_1, \dots, f_m, g_1, \dots, g_n),$$

де матриця Φ розмірності $(m+n+1) \times (m+n+1)$ визначається наступним чином:

1. $\varphi_{ij} = \xi_{ij}$ при $0 \leq i < j \leq m$;
2. $\varphi_{0j} = \psi_{0, j-m}$ при $m+1 \leq j \leq m+n$;
3. $\varphi_{0, m+n+1} = \xi_{0m} \nabla \psi_{0n}$;
4. $\varphi_{ij} = \emptyset$ при $1 \leq i \leq m, m+1 \leq j \leq m+n$;
5. $\varphi_{i, m+n+1} = \xi_{i, m+1}$ при $1 \leq i \leq m$;
6. $\varphi_{ij} = \psi_{i-m, j-m}$ при $m+1 \leq i < j \leq m+n+1$.

Наприклад, при $m=n=3$ матриця Φ має вигляд

$$\Phi = \begin{bmatrix} \xi_{01} & \xi_{02} & \xi_{03} & \psi_{01} & \psi_{02} & \psi_{03} & \xi_{04} \nabla \psi_{04} \\ & \xi_{12} & \xi_{13} & \emptyset & \emptyset & \emptyset & \xi_{14} \\ & & \xi_{23} & \emptyset & \emptyset & \emptyset & \xi_{24} \\ & & & \emptyset & \emptyset & \emptyset & \xi_{34} \\ & & & & \psi_{12} & \psi_{13} & \psi_{14} \\ & & & & & \psi_{23} & \psi_{24} \\ & & & & & & \psi_{34} \end{bmatrix}.$$

Таким чином, клас всіх ациклічних ІФ замкнений відносно композицій множення (яке є моделлю послідовного виконання програм) і накладання (яке є моделлю паралельного виконання).

Висновки

Наведені вище властивості дозволяють стверджувати, що ациклічні ІФ являють собою найбільш загальну з багатьох можливих моделей структури і поведінки таких систем обробки даних, де потік даних просувається від входу до виходу, можливо розгалужуючись на паралельні потоки, які потім можуть в довільному порядку зливатися між собою, але ніде не рухаються в зворотному напрямку, від виходу до входу. Ланцюгові ІФ також здатні моделювати даний клас систем, але лише за рахунок штучного „розгладжування” сімейства паралельних потоків даних в один загальний потік. Також даний клас систем моделюється за допомогою послідовно-паралельних ІФ, але лише за умови, що паралельні потоки даних зливаються між собою лише в порядку, протилежному до того, в якому вони розгалужувалися. Хоча ІФ будь-якого з трьох названих класів можна привести до будь-якого іншого класу, перетворення ациклічної ІФ на послідовно-паралельну чи ланцюгову вимагає зайвих входжень базисних функцій до композиційного терму та допоміжних імен відповідно, тоді як перетворення послідовно-паралельних та ланцюгових ІФ до ациклічного вигляду додаткових ресурсів не потребує.

Список використаних джерел

1. Парфірова Т.С. Композиционная модель последовательных связей в информационных системах / Т.С. Парфірова // Материалы X международного семинара „Дискретная математика и ее приложения” (Москва, МГУ 1-6 февраля 2010 г.) / под. ред. О.М. Касим-Заде. М.: Изд-во мехмат факультета МГУ, 2010. С. 198-201.
2. Парфірова Т.С. Про зведення послідовно-паралельних композиційних програм до чисто послідовного виду / Т.С. Парфірова // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фіз.-мат. науки. – 2010. – № 1. – С. 132-137.
3. Парфірова Т.С. Поняття взаємодії з точки зору сутнісної платформи / Т.С. Парфірова // Наукові записки НАУКМА. Сер. Комп'ютерні науки. – 2010 (у друці).
4. Редько В.Н. Экзистенциальные основания композиционной парадигмы / В.Н. Редько //

Кибернетика и системный анализ. – 2008. – № 2 – С. 3-12.

5. Редько В.Н. Программолгические основания сущностной платформы / В.Н. Редько, И.В. Редько, Н.В. Гришко // Проблемы программирования. – 2008. – № 2-3 (Спец. выпуск). – С. 75-83.

6. Редько В.Н. Композиция программ и композиционное программирование / В.Н. Редько // Программирование. – 1978. – № 5. – С. 3-24.

7. Редько В.Н. Основания композиционного программирования / В.Н. Редько // Программирование. – 1979. – № 3. – С. 3-13.

8. Редько В.Н. Композиционная структура программологии / В.Н. Редько // Кибернетика и системный анализ. – 1998. – № 4. – С. 47-66.

9. Редько І.В. Теорія дескриптивних середовищ та її застосування: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня доктора фіз.-мат. наук: спец. 01.05.03 „Математичне та програмне забезпечення обчислювальних машин і систем” / Редько І.В. – Київ. 2008. – 32 с.

10. Никитченко Н.С. Композиционно-номинативный подход к уточнению понятия программы / Н.С. Никитченко // Проблемы программирования. – 1999. – № 1. – С. 16-31.

11. Никитченко Н.С. Композиционные логики номинативных данных / Н.С. Никитченко // Проблемы программирования. – 2003. – № 3. – С. 29-40.

12. Омельчук Л.Л. Системи композиційно-номінативних специфікацій об'єктно-орієнтованих програм / Л.Л. Омельчук // Dynamical system modeling and ability investigation. – Thesis of conference reports. – Kyiv, Ukraine, 2009. P. 339.

13. Нікітченко М.С. Композиционно-номинативные аспекты адресного программирования / М.С. Нікітченко // Кибернетика и системный анализ. – 2009, № 6. – С. 24-35.

14. Никитченко Н.С. Семантико-синтаксические структуры программ: дис. ... кандидата физ.-мат. наук.: 01.01.09 / Никитченко Николай Степанович – К., 1980. – 134 с.

15. Parfirova T. Compositional Model of Acyclic Programs / T. Parfirova, Vinnyk V // CSE'2010 International Scientific Conference on Computer Science and Engineering, September 20-22, 2010, Košice - Stará Ľubovňa, Slovakia.

Надійшла до редколегії 30.04.10

УДК 519.9

Потієнко М.В., асп.

Міждисциплінарний підхід до модельовання пам'яті як базової функції людського мозку

Одними з головних функцій мозку є функції пам'яті: запам'ятовування та розпізнавання різної інформації. У даній роботі представляється міждисциплінарний підхід до розв'язку задачі модельовання людської пам'яті. Такий підхід представляє собою синтез результатів досліджень різних наук (математики, біології, психології тощо) для отримання найбільш точної моделі та розуміння процесів, які відбуваються у мозку людини під час використання пам'яті.

Ключові слова: нейронні мережі, пам'ять, мозок.

*E-mail: dmelk@ukr.net

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

З розвитком комп'ютерів з'являється можливість модельовання процесів, що відбуваються в людському організмі, для кращого розуміння їх природи. Так моделюється робота імунної системи, кровоносної, робота різних органів, таких як серце, тощо. Крім того дуже багато уваги приділяється модельованню роботи людського мозку. Дослідженнями в цій області займається дуже багато наук, як гуманітарних – психологія, так і природничих – біологія, фізика, математика.

Розуміння того, як працює мозок, може дати відповіді на запитання що таке мислення, що таке свідомість, тощо. Але задача модельовання роботи мозку дуже складна. Тому її треба розбити на підзадачі – модельовання окремих незалежних функцій мозку, а потім синтез результатів.

Людський мозок має дуже багато функцій, але можна виділити деякі базові, за допомогою яких виконуються усі інші. Однією з таких функцій і буде пам'ять [1]. Саме пам'ять пов'язує усі наші відчуття, дозволяє будувати та зберігати представлення про навколишній світ. Таким чином модельовання роботи людського мозку буде доцільно почати з дослідження та модельовання людської пам'яті, як окремого елемента.

M.V. Potienko, postgraduate student

Interdisciplinary approach to modelling memory as a basic feature of human brain

One of the basic features of human brain are memorization and recognition various information. Given work represents the interdisciplinary approach to decision of a problem of modelling of human memory. It consists in synthesis of results of various sciences (mathematics, biology, psychology etc) for purpose of reception of the most exact model and understanding of processes that occur in the human brain during memory.

Key Words: neural networks, memory, brain.

Таку задачу найкраще всього вирішувати за допомогою междисциплінарного підходу: синтезуючи результати досліджень в області людської пам'яті різних наук, не тільки природничих, але і гуманітарних. Такими дослідженнями займаються: психологія, біологія, фізика, математика та інформатика.

Психологія, вивчаючи людину, розглядає її як "чорну скриньку", досліджуючи реакції на зовнішні фактори. Результати таких досліджень дозволяють описати структуру людської пам'яті – головні елементи, та їх зв'язок між собою [1,2].

Базовими елементами є короткотривала та довготривала пам'ять (Рис. 1). При цьому короткотривала пам'ять оброблює та зберігає лише тоді, коли вони подаються на вхід. При чому данні можуть бути не лише від органів чуття, а також від самої пам'яті або інших елементів мозку. Оброблені данні зберігаються в довготривалій пам'яті.

У свою чергу довготривала пам'ять також ділиться на дві частини: епізодична та семантична. В епізодичній пам'яті зберігаються моменти життя людини, пов'язані саме з нею, її "я". Так зберігаються відчуття, емоції в той момент, інші люди, тощо.

Семантична пам'ять зберігає абстрактні данні, які не пов'язані з самою людиною: інформацію про мову, рухи, тощо. Людина може розмовляти,

правильно рухатись, робити складні речі саме завдяки даним, що знаходяться у семантичній пам'яті.

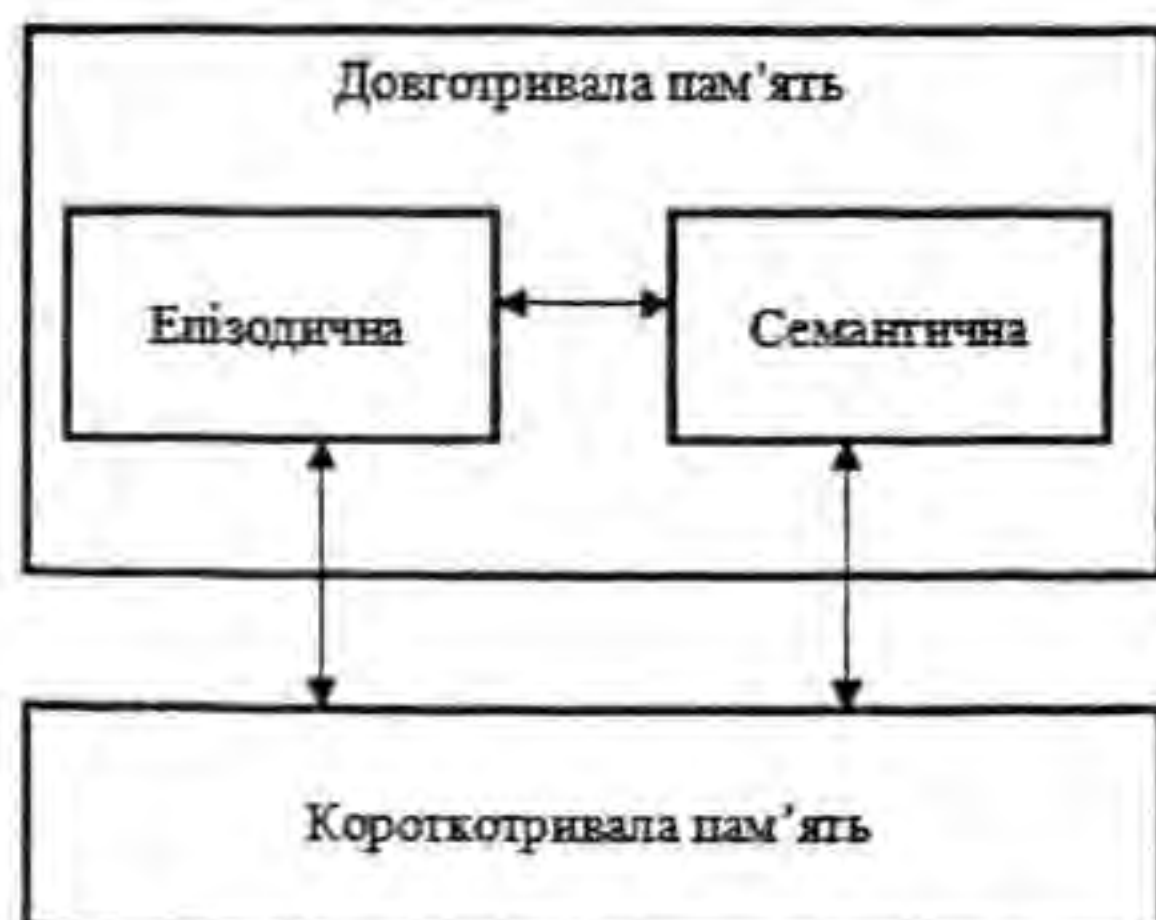


Рис. 1 Структура пам'яті.

Тобто семантична пам'ять дозволяє людині робити те ж саме, що і інші люди, у той час, як епізодична пам'ять створює людську особистість, робить людину людиною.

Крім розділення пам'яті на два головних елементи, результати психологічних досліджень дозволяють описати і зв'язок цих елементів, а також результат обробки даних короткотривалою пам'яттю.

В довготривалій пам'яті зберігається опис класів реальних об'єктів, а не інформація про кожен елемент класу [1]. Кожен клас представляє собою послідовність характеристик, при чому кожна характеристика також може бути класом.

Таким чином короткотривала пам'ять оброблює вхідні дані, класифікуючи їх, та передає інформацію про клас у довготривалу пам'ять.

Знаючи деяку початкову підпослідовність характеристик можна визначити множину класів, кожен з яких може відповідати повній послідовності. Так можна визначити ймовірну множину наступних характеристик.

Саме інформація про можливі наступні характеристики передається від довготривалої пам'яті у короткотривалу [2].

Дослідження психологів дають нам концептуальне уявлення про те, з чого складається пам'ять людини, та як її елементи взаємодіють один з одним.

Біологія вивчає людський мозок як на макрорівні: нейронні мережі, їх структура та взаємодія, так і на мікрорівні: окремі нейрони, їх робота, синапси, тощо. Тобто можна описати кожен елемент мозку та його взаємодію з

іншими. Якщо додати до цих знань результати психологічних досліджень, то можна виділити головні елементи мозку, які відповідають за людську пам'ять.

Кора головного мозку (неокортекс) людини виконує функції короткотривалої пам'яті: отримуючи вхідний сигнал, вона класифікує його, та передає далі, у гіпокамп, а потім у таламус. Таламус та гіпокамп – довготривала пам'ять. Гіпокамп представляє собою епізодичну пам'ять, а таламус – семантичну [3-5].

Крім того частину функцій довготривалої пам'яті у собі несе також і неокортекс. Під час своєї роботи він постійно навчається, змінює структуру, і тому може розпізнавати найпростіші класи.

Таке розділення пам'яті підтвердилось експериментом з пацієнтом Г.М., якому видалили гіпокамп. Після цього він повністю втратив епізодичну пам'ять, хоча продовжував поводитися нормально. Пацієнт Г.М. не міг запам'ятати нічого пов'язаного з собою та його оточенням: він забував людей, як тільки переставав про них думати, забував події, тощо [5].

При цьому семантична та короткотривала пам'яті функціонували нормально. Пацієнт Г.М. міг розмовляти, робити складні математичні розрахунки, тощо. Він також пам'ятав епізоди свого життя, але лише коли він про них думав. Якщо ж його увага зосереджувалась на чомусь іншому – він одразу забував про попереднє життя [6].

Розглянемо структуру кожного окремого елементу. Гіпокамп і таламус мають подібну структуру. Кожен з них представляє собою велику нейронну мережу, в якій самі нейрони майже не поєднані один з одним. Кожен нейрон має багато синапсів, які йдуть до нейронів з неокортексу. Також нейрони гіпокампу і таламусу з'єднуються між собою. Таким чином представляється перехід запам'ятованих даних з епізодичної пам'яті у семантичну, та в іншому боці.

Найцікавішим елементом – є саме кора головного мозку. Вона має ієрархічну структуру, та складається з багатьох менших нейронних мереж – кортикальних колонок [7]. Кожна колонка також є ієрархічною мережею, яка складається з шести рівней ієрархії. При цьому нейрони шостого рівня в кожній колонці мають синапси, які передають сигнал нейронам гіпокампу та таламусу. Ієрархічний зв'язок між колонками відбувається за допомогою нейронів першого рівня, які передаються сигнал вгору по

ієрархії. Нейрони п'ятого та шостого рівня у свою чергу передаються сигнал колонкам, що стоять на нижчому рівні ієрархії.

Також кортикальні колонки, що знаходяться на одному рівні, мають зв'язки між собою, через свої нейрони першого рівня.

Головною особливістю кори є те, що кількість обернених зв'язків, які передають сигнал вниз по ієрархії, значно більша ніж кількість прямих зв'язків, що передають сигнал вверх по ієрархії.

Представлення про кожний абстрактний клас зберігається у таламусі. Кожен нейрон таламусу відповідає за деякий клас. Так само представлення про кожен клас, що відноситься до людини, зберігаються в гіпокампі. Також кожен нейрон гіпокампу відповідає за свій клас.

Нейрони першого рівня ієрархії у колонці поєднані з нейронами таламуса та гіпокампа. Таким чином, якщо колонка визначає деякий клас, то з таламусу або гіпокампу приходить підтвердження. Якщо ж клас невідомий, то колонка передає ввєрх по ієрархії визначені характеристики. Це означає що на даному рівні визначити клас неможливо. Якщо даний рівень є найвищим рівнем в ієрархії, то це буде означати, що вхідні данні описують новий клас.

можливі наступні характеристики. Крім того, якщо клас розпізнається на вищому рівні, то сигнал про це також передається на нижчі рівні. Так реалізується можливість запам'ятовувати класи у якості характеристик інших класів.

Як бачимо результати досліджень біологами мозку людини на макрорівні у поєднанні з результатами досліджень психологів дають нам представлення про структуру пам'яті, її елементів, та їх взаємодію (Рис. 2).

Розглядати біологічні дослідження нейронів, синапсів, треба лише у синтезі з фізико-математичною базою. Таким чином можна математично описати роботу нейрона.

Робота біологічного нейрона відрізняється від роботи формального математичного нейрону. Так біологічний нейрон після активації переходить у стан абсолютної рефрактерності, під час якого він не може бути активованим [4]. Після цього настає період відносної рефрактерності, коли поріг нейрона поступово зменшується до значення порогу у стані спокою. Математично це можна описати так:

$$U_p(t) = U_p(0) + Ee^{-\frac{t}{\tau}}$$

де $U_p(0)$ – поріг нейрону в стані спокою

E – величина порога клітини в момент початку періода рефрактерності, що прийнятий за початок відліку.

τ – стала, значення якої – час періоду рефрактерності [8].

Знаючи математичну модель роботи нейронів, структури нейронних мереж та їх з'єднання у пам'яті людини можна побудувати комп'ютерну модель.

Крім того біологічний нейрон може передавати два типи сигналів – інгібаторні та збуджуючі, в залежності від типу вхідних сигналів. Так якщо напруга на вході змінюється у меншу сторону на величину більшу ніж поріг нейрона, то генерується інгібаторний вихід. В іншому випадку – збуджуючий.

Відповідно до цього існують два види синапсів: інгібаторні та збуджуючі. Вони також розрізняються за типом передаваного сигналу. Інгібаторні синапси передаються лише від'ємний сигнал, у той час як збуджуючі – додатний [9].

Звичайний нейрон може бути активований обома шляхами та передавати описані вище сигнали. Але віділяють ще два типи нейронів: корзинчатий та антикорзинчатий [10].

Корзинчатий нейрон в незалежності від змін напруги на вході при активації завжди передає інгібаторні сигнали. Антикорзинчатий нейрон

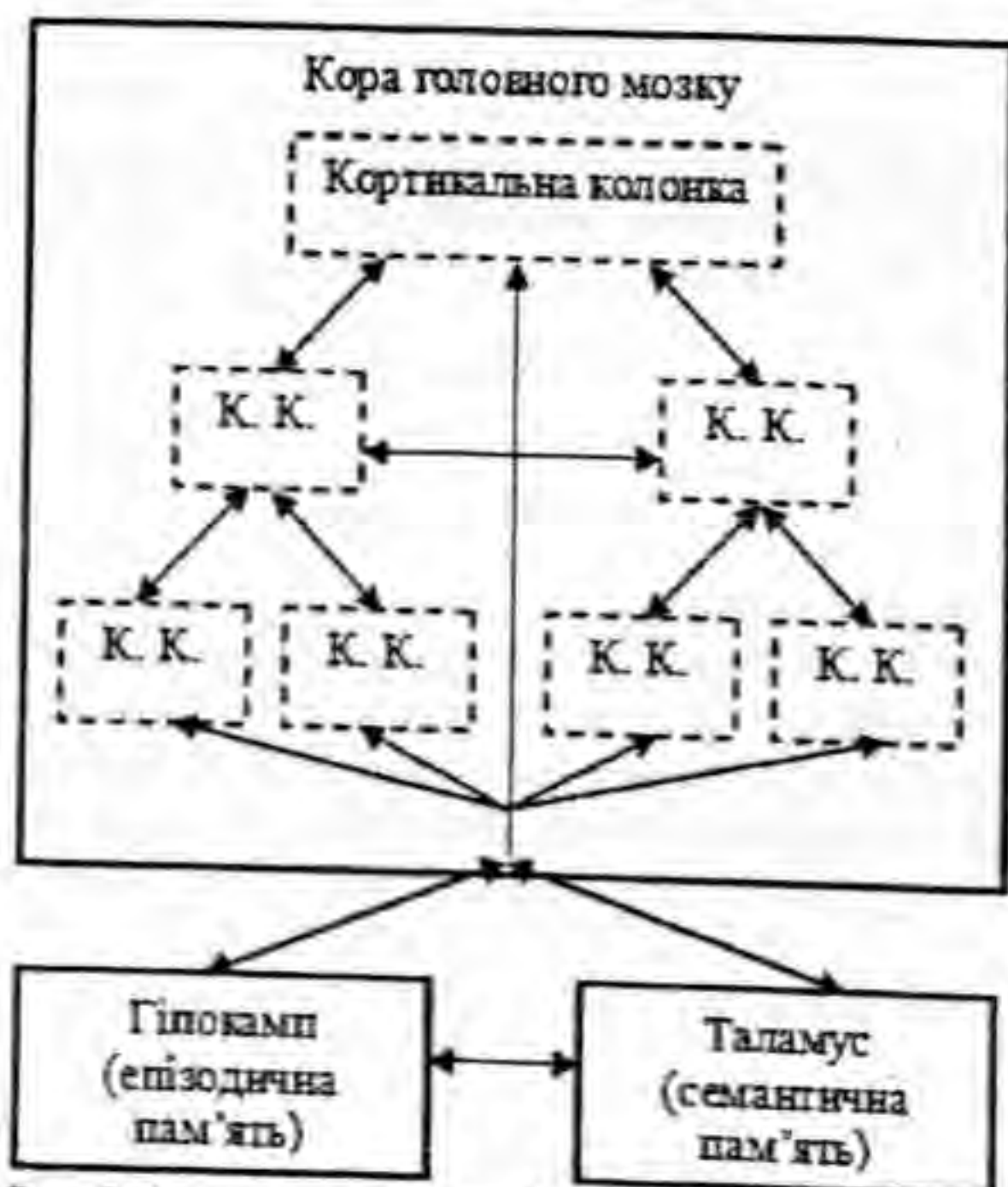


Рис. 2 Структура взаємодії елементів пам'яті людини. К.К. – кортикальна колонка.

Оскільки нейрони таламуса і гіпокампа збуджуються під час проходження сигналу по кожному рівню ієрархії колонок, вони передають сигнал до тих колонок, які відповідають за

працює в повністю протилежному напрямку – він завжди передає лише збуджуючі сигнали.

Корзинчаті нейрони знаходяться як у таламусі та гіпокампі, так і в корі головного мозку – кортикальних колонках.

Так третій рівень ієрархії в кортикальній колонці складається з пар нейронів – корзинчатого та звичайного [1]. Корзинчатий нейрон зв'язаний вихідними синапсами лише зі своїм парним звичайним нейроном. Вхідні синапси дублюються для кожного нейрона з пари. Якщо активується корзинчатий нейрон – він не дає активуватись парному звичайному нейрону.

Існування корзинчатого нейрона в парі нейронів на третьому рівні ієрархії кортикальної колонки дозволяє колонці не передавати інформацію про об'єкти, які вона сама в змозі розпізнати.

Тобто пам'ять людини є однією з базових функцій мозку і моделювання його роботи доцільно починати з дослідження пам'яті, як окремого компоненту. Таке дослідження найкраще робити за допомогою міждисциплінарного підходу – синтезу знань про пам'ять різних наук: психології, біології, фізики, математики, інформатики.

Психологія дозволяє нам виділити головні елементи, які причетні до процесу запам'ятовування та розпізнання відомих даних. Біологічні дослідження пов'язують ці елементи з ділянками мозку, що дозволяє нам визначити їх структуру. Так компонент пам'яті складається з трьох головних елементів: класифікуючого (короткотривала пам'ять, кора головного мозку), епізодичної бази знань (гіпокамп), семантичної бази знань (таламус). Всі ці три елементи поєднані між собою, що дозволяє не тільки зберігати в двох базах знань розрізнені класи, а й перетворювати класи однієї з баз в класи іншої та навпаки.

Біологічні дослідження на мікрорівні разом з фізико-математичними знаннями, дозволяють описати процес роботи мінімальних компонентів пам'яті: нейронів та синапсів.

В результаті міждисциплінарного підходу створюється математична модель пам'яті людини, як окремого елементу. Вона складається з трьох головних складників: кори, гіпокампу та таламусу. Кора є складною ієрархічною нейронною мережею, що складається з колонок. При цьому колонки одного рівня ієрархії також зв'язані між собою. Кожна колонка – це також ієрархічна нейронна мережа. Особливість кори головного мозку полягає у тому, що кількість

обернених зв'язків, які передають сигнал вниз по ієрархії, значно перевищує кількість прямих зв'язків, які, відповідно, передають сигнал вверх по ієрархії. Таламус і гіпокамп представляють собою карти нейронів поєднані з колонками кори, та між собою. Також кожен нейрон працює так само, як його біологічний аналог – з урахуванням періодів рефрактерності після активації, можливості передавати як збуджуючий так і інгібаторний сигнал. Така математична модель реалізується програмно.

Це дозволяє досліджувати роботу елементів мозку відповідальних за пам'ять у реальному часі, краще зрозуміти принципи цієї роботи, а також використовувати переваги людської пам'яті над штучною, такі як інваріантність, асоціативність, ієрархічність.

Список використаних джерел

1. Хоккинс Дж., Блейкли С. Об интеллекте. – М.: Вильямс, 2004. – 240 с.
2. Роуз С. Устройство памяти. От молекул к созанию. – М.: Мир, 1995. – 384 с.
3. Блум Ф., Лейзерсон А., Хофстедер Л. Мозг, разум и поведение. – М.: Мир, 1998. – 248 с.
4. Покровский В.М., Коротько Г.Ф. Физиология человека. – М.: Медицина, 2007. – 816 с.
5. Cohen N.J., Corkin S. The amnesic patient h. m.: Learning and retention of a cognitive skill. // Neuroscience Abstract. – 1981. – 7. – P.235
6. Corkin S. Lasting consequences of bilateral medial temporal lobectomy: Clinical course and experimental findings in h. m. // Seminars in Neurology. – 1984. – 4. – P.249-259
7. Эдельмен Дж., Маункастл В. Разумный мозг. – М.: Мир, 1981. – 135 с.
8. Позняк Н.В. Моделирование нейронных структур. – М.: Наука, 1970. – 264 с.
9. Экклс Дж. Физиология синапсов. – М.: Мир, 1966. – с.
10. Суворов И.С., Клюквин В.И., Пивоварова Р.П. Нейронные сети. – Воронеж: ВГУ, 1994. – с.

Надійшла до редколегії 03.06.10

УДК 330.4

Рутицька В. В., к. ф.-м. н.,
Степанов* О. В., студ.

Про розв'язання суперечності між інвестиційними оцінками NPV та IRR для конфліктуючих проектів

Серед інвестиційних показників найбільш широко застосовуються NPV та IRR. Для деяких пар проектів ці показники можуть давати різний результат, а тому вступати у суперечність.

В даній статті запропоновано використати невизначеність ставки реінвестування та величин фінансових потоків у обчисленні NPV. Аналіз проводиться на основі математичного апарату теорії ймовірності та нечітких множин. Така постановка задачі дозволяє відмовитись від обчислення показника IRR на користь порівняння проектів за варіацією їх NPV.

Ключові слова: NPV, IRR, конфліктуючі проекти, нечіткі обчислення, теорія нечітких множин.

*E-mail: yltastep@gmail.com, vlarut@mail.ru

Статтю представив д. т. н., проф. Гаращенко Ф. Г.

В інвестиційному аналізі існує ряд показників, за якими оцінюють реальні інвестиції та інвестиційні проекти. Найбільш поширеними з них є чотири показники: NPV (Net Present Value – чиста приведена вартість), IRR (Internal Rate Return – внутрішня норма прибутковості), PI (Profitability Index – показник рентабельності) та DPP (Discounted Payback Period – дисконтований строк окупності) [1]. Усі ці показники розраховуються виходячи з часової концепції грошей, тобто за дисконтуванням грошових потоків. Можна навести багато прикладів, коли оцінюючи два проекти по одним показникам буде домінувати перший проект, а по іншим – другий. Тут і виникає суперечність між показниками [2].

У даній статті буде розглянуто випадок суперечності між NPV та IRR, як між найбільш застосовуваними серед показників.

Чиста приведена вартість – це абсолютний показник прибутку, приведенного до нульової точки грошового потоку:

$$NPV = \sum_{i=0}^n CF_i(1+r)^{-i},$$

де n – кількість періодів фінансового потоку що розглядається, CF_i – надходження чи витрати

V. V. Rutytska k. p.-m. s.,
A. V. Stepanov stud.

The approach to resolving inconsistency between NPV and IRR investment estimations for conflict projects

Most common among investment indicators are NPV and IRR. For some couples of projects, these estimations will likely prefer different projects, so come in conflict.

This article has been requested to use uncertainty reinvestment rates and magnitudes of financial flows in calculating NPV. It was suggested to use the mathematical apparatus of classic probability theory and fuzzy sets.

This statement of the problem can refuse to calculate the index of IRR, benefit comparison of projects for a variation of NPV.

Key Words: NPV, IRR, conflict investment projects, fuzzy calculating, fuzzy set theory.

(тоді знак мінус) в i -ому періоді, r – дисконтна ставка.

В розрахунку NPV та IRR використовується часовий фактор грошей. По суті, NPV – це ті гроші, що відразу опиняються в кишені інвестора після прийняття рішення про інвестування проекту.

Окрім величин конкретних грошових витрат та надходжень, NPV залежить від відсоткової ставки r . Залежність ця нелінійна та найчастіше на проміжку від 0 до IRR обернена: з ростом r NPV спадає, при $r = IRR$ – обнуляється. Останнє і є визначенням IRR – це значення відсотку r , при якому чиста приведена вартість дорівнює нулю, тобто розв'язок рівняння:

$$\sum_{i=0}^n CF_i(1+r)^{-i} = 0.$$

Отже, IRR є максимальною ставкою, при якій проект ще приносить дохід, а далі NPV стає від'ємним. Зауважимо складність знаходження в загальному випадку аналітичного виразу для IRR через величини потоків.

Графічно ситуація конфлікту між NPV та IRR показана на рис. 1.

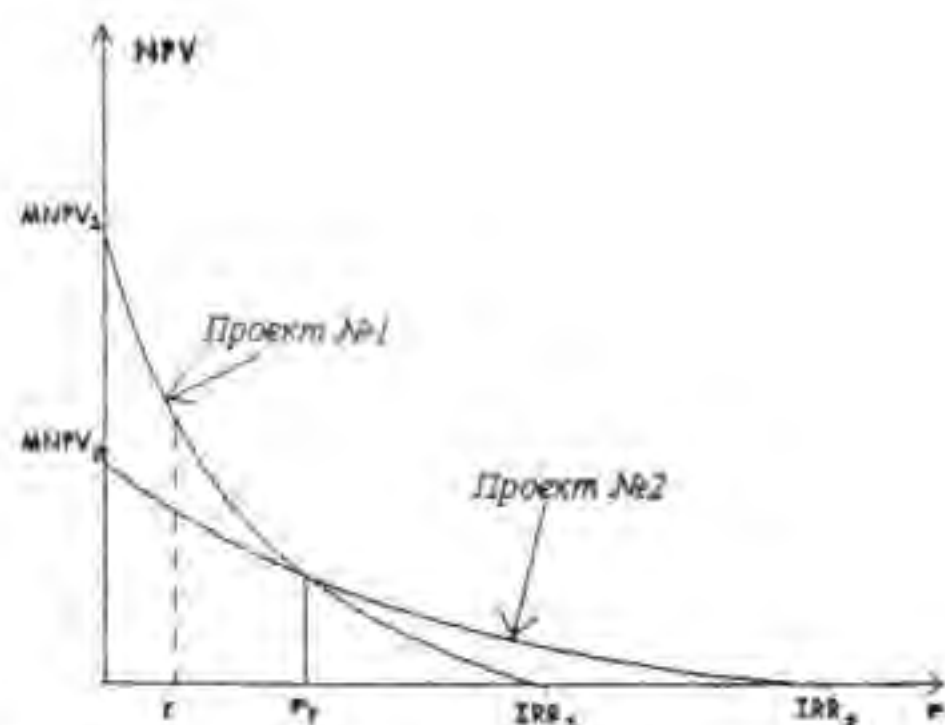


Рис. 1 Графіки залежності NPV від ставки r .

На цьому графіку проілюстровано залежності NPV від відсотку для двох проектів. Тут $MNPV$ – граничне (marginal) значення чистої приведеної вартості, при якому відсоток реінвестування r (в деяких джерелах – вартість капіталу) дорівнює нулю; r_f – це відсоток, при якому чисті приведені вартості двох проектів рівні один одному: $NPV_1 = NPV_2$. Це значення називають точкою Фішера [2]. Коли така точка існує, і при цьому спільне значення NPV додатне, то тоді і тільки тоді виникає конфлікт NPV та IRR. Всі інші варіанти взаємного розташування показані у [2].

Таким чином, умови конфлікту показників мають вигляд:

$$\begin{aligned} MNPV_1 &> MNPV_2, \\ r_f &< IRR_1 < IRR_2. \end{aligned} \quad (1)$$

Е.Ф. Бріггем, Р. Брейлі та С. Майерс визначають, що конфлікт такого роду виникає лише між взаємовиключними проектами [4]. Застосування методу NPV ґрунтується на умові, що ставка реінвестування грошових потоків дорівнює вартості капіталу. В той же час застосування методу IRR припускає, що фірма має можливість реінвестування за ставкою, яка дорівнює IRR [4].

Отже, найкращим припущенням відносно ставки реінвестування є вартість капіталу r , що властива методу NPV. Базуючись на цьому, фірмам, які хочуть отримати капітал, вартість якого приблизно дорівнює сучасній ставці, доречно використовувати метод NPV.

Конфлікт між інвестиційними оцінками NPV та IRR – це ще одна форма прояву конфлікту «дохідність-ризик» [2]. Дійсно, IRR є максимально можливою ставкою реінвестування для проекту що розглядається. Вона ще забезпечує невід’ємне значення його NPV. IRR для конкретного проекту є границею множини ставок

реінвестування. Для того щоб проект мав додатне значення NPV, найбільша ставка повинна бути менша за IRR. Виходячи з цього, приходимо до некоректності ранжування проектів за граничною, максимально можливою ставкою реінвестування, тобто за IRR.

Але серед економістів, інвесторів та інвестиційних менеджерів саме метод IRR є широко вживаним. По статистиці, в Америці три з чотирьох інвестиційних менеджерів віддають перевагу саме IRR при ранжуванні проектів [5]. Згідно А. Хелферту, внутрішня норма окупності більш застосовувана, ніж інші методи [6].

При порівнянні внутрішніх норм окупності різних проектів припускають, що грошові потоки, отримані упродовж життєвого циклу проекту, можуть бути реінвестовані за своїми унікальними нормами. Отже, менеджери, приймаючи ставки у 15 – 20 % як інвестиційний стандарт, повинні розуміти, що грошові потоки від проекту з IRR у 30 % не вдасться реінвестувати з такою ж високою ставкою.

IRR показує максимально допустимий відносний рівень витрат, які можуть бути асоційовані з даним проектом. Наприклад, якщо проект повністю фінансується із банківської суди, то IRR показує верхню межу банківської ставки, перевищення якої робить проект збитковим [2].

При оцінці проектів за IRR, Ковальовим було запропоновано орієнтуватись на різницю між IRR та дійсною величиною річного банківського відсотка. Цю різницю можна розглядати як стійкість проекту, деякий «запас міцності» до несприятливих змін економіки. Проекти з більшою різницею є домінуючими та більш ефективними [2].

Таким чином: якщо контури NPV проектів є монотонно спадними функціями для деякого додатного інтервалу значень ставки реінвестування та при цьому вони перетинаються в області додатних значень NPV, то проект, у якого різниця IRR та ставки реінвестування більша, є менш ризикованим з точки зору недоотримання додатних значень NPV.

Користуючись останнім твердженням, узагальнимо ці ідеї за допомогою математичного апарату.

Ймовірно-статистичний підхід.

Нехай нам відомий розподіл ставки реінвестування r заданий його щільністю $f_r(\xi)$. Відомо, що математичне сподівання r при цьому матиме вигляд [7]:

$$M(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f_r(x) dx.$$

Нехай

$$NPV_{1,2}(r) = NPV_1(r) - NPV_2(r) = \sum_{i=0}^{n_1} CF_1^i (1+r)^{-i} - \sum_{i=0}^{n_2} CF_2^i (1+r)^{-i}. \quad (2)$$

Тобто це функція залежності різниці чистої приведеної вартості двох конкуруючих проектів з рис. 1. Із умов (1) випливає наступна властивість:

$$\begin{aligned} NPV_{1,2}(r) &> 0, \quad r < r_f \\ NPV_{1,2}(r) &< 0, \quad r > r_f. \end{aligned} \quad (3)$$

Обчислимо математичне сподівання $NPV_{1,2}(r)$ в залежності від r :

$$M(NPV_{1,2}) = \int_{-\infty}^{+\infty} NPV_{1,2}(x) \cdot f_r(x) dx. \quad (4)$$

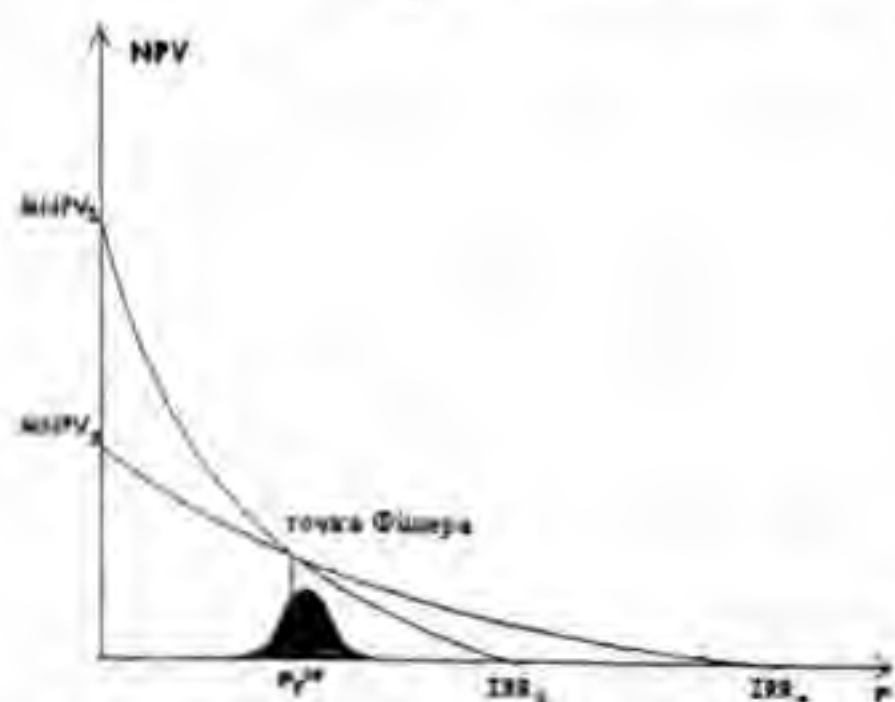


Рис. 2 Ілюстрація ймовірно-статистичного підходу.

Знайшовши $M(NPV_{1,2})$, і порівнявши його з нулем, можна стверджувати про домінування одного проекту над іншим, а саме:

- $M(NPV_{1,2}) > 0 \Rightarrow$ проект під номером один має перевагу над другим;
- $M(NPV_{1,2}) < 0 \Rightarrow$ другий проект домінує над першим.

Якщо ж величина $M(NPV_{1,2})$ дорівнює нулю, то по заданому розподілу ставок проекти еквівалентні.

Дійсно, ця величина є очікуваною різницею чистих приведених вартостей для побудованого розподілу ставок. Таким чином, якщо більшість розподілу буде справа від точки Фішера, то очікувана різниця між IRR_2 та ставкою r буде більшою за аналогічну різницю для IRR_1 (рис. 2). А з властивості (3), $M(NPV_{1,2})$ в цьому випадку буде менше нуля. Отже, імовірніше, що дохід від

другого проекту буде більшим та його «запас міцності» теж кращий. І навпаки - якщо більшість розподілу буде зліва від точки Фішера, то перший проект домінує над другим.

Тепер розглянемо методи побудови розподілу ставок і який зміст може мати цей розподіл.

Розглянемо простий приклад проекту з заданим фінансовим потоком у грошових одиницях (г.о.):

0-ий рік: -1000 г.о.;

1-ий рік: + 700 г.о.;

2-ий рік: + 500 г.о.;

Розрахуємо NPV при ставці у 10% річних:

$$NPV = -1000 + \frac{700}{1+0.1} + \frac{500}{(1+0.1)^2} \approx 50.$$

Отже, приблизно 50 г.о.

Якщо ж інвестор покладе на початку періоду ці 1000 г.о. у банк на депозит, то при цій же ставці через два роки він зможе забрати $1000 \times (1+0.1)^2 = 1210$ г.о. Якщо ж порахувати прибутки від проекту: $700+500=1200$, то вони будуть менші, ніж поклавши гроші на депозит.

Справа в тому, що після отримання першого прибутку у 700 г.о., інвестору треба покласти ці гроші на депозит під 10 % відсотків річних (тобто реінвестувати), і тоді він отримує додаткові 50 г.о.

Таким чином, ставка реінвестування при розрахунку NPV повинна обиратися з наступних міркувань: за цією ставкою інвестор зможе покласти гроші в банк, надати позичальнику кредит, чи з цією дохідністю інвестувати ці гроші у новий проект. У кожного способу реінвестування є свій власний ризик.

Задачу ускладнює також невизначеність ринку грошових вкладів, тому що нам треба спрогнозувати ставку у майбутньому. Отже, значенню цієї ставки можна надати випадковий характер, що і робиться в запропонованому підході.

Для визначення розподілу ставки можна зробити маркетингові дослідження ринку вкладів. Наприклад, опитати експертів на предмет мінімальної та максимальної прогнозованої ставки. Далі припускається нормальність розподілу ставки і використовується правило 3-сігм.

Останнє правило можна використати для визначення параметрів розподілу. Значення ставки буде знаходитись в інтервалі $[a - 3\sigma; a + 3\sigma]$ з імовірністю 99,7%, де a - це математичне сподівання, а σ - середньоквадратичне відхилення. За нижню

границю беремо мінімальну експертну оцінку, а за верхню - максимальну, і отримуємо систему для знаходження a та σ :

$$\begin{cases} a - 3\sigma = r_{\min}^{\text{експ}} \\ a + 3\sigma = r_{\max}^{\text{експ}} \end{cases} \quad (5)$$

Якщо в нас є m суджень експертів у вигляді пар $\{r_{\min}^i, r_{\max}^i\}$, то загальний розподіл будемо на підставі середніх оцінок мінімальної та максимальної ставки, тобто на підставі пари

$\left\{ \frac{\sum_{i=1}^m r_{\min}^i}{m}, \frac{\sum_{i=1}^m r_{\max}^i}{m} \right\}$ та системи (5). Причому це еквівалентно знаходженню середніх арифметичних знайдених a та σ для кожної пари оцінок експертів.

Звичайно, у такого підходу вирішення суперечності між проектами є свої вади. По-перше, це припущення нормальності розподілу. У реальному житті нормальний розподіл є частіше винятком, ніж правилом [9].

Також, при використанні тільки мінімальної та максимальної оцінки неважко помітити, що найбільш ймовірне значення ставки буде рівно посередині інтервалу. Це виходить з симетричності розподілу. Але набагато інформативніше було б, якщо експерт задавав три оцінки - мінімальну, найбільш ймовірну і максимальну. І тоді умова симетричності була б не обов'язкова.

Математичним апаратом, який є більш гнучким в цьому розумінні ніж теорія ймовірності, є теорія нечітких множин. Розглянемо новий метод розв'язання поставленої задачі в рамках цієї теорії.

Підхід на основі нечітких множин

Розглянемо математичний апарат, запропонований у 70-х роках Л. Заде, для розв'язання задач з невизначеностями, суб'єктивними ймовірностями, нечіткими "розпливчатыми" даними тощо. Цей апарат є відносно легким і в той же час потужним засобом розв'язання дуже широкого спектру задач [10].

Будемо використовувати поняття нечіткого числа (L-R) типу. При цьому у якості функцій $L(x)$ та $R(x)$ оберемо лінійні функції, тобто нечіткі числа в нас будуть трикутного вигляду, хоча в якості цих функцій можна взяти будь-які монотонні функції (наприклад розглядати нечіткі числа у формі трапеції) [10].

Функція належності трикутного числа матиме вигляд:

$$\mu(x) = \begin{cases} \frac{x-a}{b-a}, & x \in [a, b] \\ \frac{x-c}{b-c}, & x \in [b, c] \\ 0, & \text{інакше} \end{cases} \quad (6)$$

де $a, b, c \in \mathbb{R}$; $a \leq b \leq c$.

Таким чином, нечітке трикутне число може задаватися впорядкованою трійкою (a, b, c) , яка по суті характеризує мінімальне значення a (песимістичний прогноз), найочікуваніше середнє значення b та максимальне c (оптимістичний прогноз). Отже, побудова прогнозів на рахунок ставки у такому вигляді не повинна викликати проблем у експертів.

На рис. 3 показано нечітке трикутне число $A = (1, 5, 7)$.

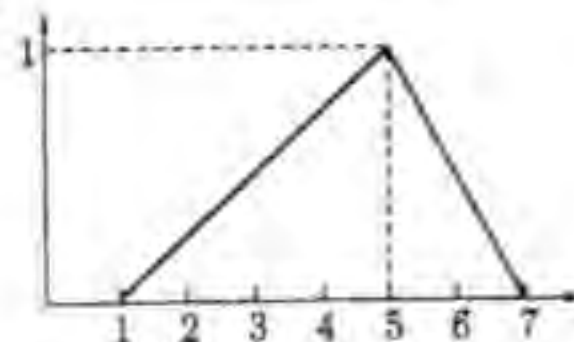


Рис. 3 Трикутне нечітке число.

Для обчислення NPV з використанням нечіткого представлення значення ставки r , треба визначити арифметичні операції для нечітких чисел. Побудуємо їх спираючись на принцип узагальнення Л.Заде [10].

Якщо в нас задана функція $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ і кожна зі змінних x_i задана своєю функцією належності $\mu_i(x)$, то функція належності f визначається із наступного співвідношення:

$$\mu_f(y) = \begin{cases} \sup_{(x_1, \dots, x_n) \in f^{-1}(y)} [\min\{\mu_i(x_i)\}], & f^{-1} \neq \emptyset \\ 0, & \text{інакше.} \end{cases}$$

По суті, це правило означає, що зафіксувавши рівень довіри (можливості, ймовірності) α , ми повинні отримати на цьому рівні максимально можливий розмах значення функції, отримане зі змінних на цьому ж рівні α . Отже, логічне підґрунтя цього правила є достатньо потужним.

Введемо позначення необхідних величин:

$$\begin{aligned} \tilde{r} &= (a_r, b_r, c_r); \\ \tilde{CF}_i &= (a_{CF_i}, b_{CF_i}, c_{CF_i}). \end{aligned} \quad (7)$$

Тоді, використовуючи розклад по α рівням, будемо мати:

$$\bar{r} = \bigcup_{\alpha \in [0,1]} (\alpha(b_r - a_r) + a_r, \alpha(b_r - c_r) + c_r); \quad (8)$$

$$\bar{CF}_i = \bigcup_{\alpha \in [0,1]} (\alpha(b_{CF_i} - a_{CF_i}) + a_{CF_i}, \alpha(b_{CF_i} - c_{CF_i}) + c_{CF_i}); \quad (9)$$

$$CF_{i,\alpha}^- = \frac{\alpha(b_{CF_i} - a_{CF_i}) + a_{CF_i}}{(\alpha(b_r - c_r) + c_r + 1)^i}; \quad (10)$$

$$CF_{i,\alpha}^+ = \frac{\alpha(b_{CF_i} - c_{CF_i}) + c_{CF_i}}{(\alpha(b_r - a_r) + a_r + 1)^i}; \quad (11)$$

$$\frac{\bar{CF}_i}{(1+\bar{r})^i} = \bigcup_{\alpha \in [0,1]} (CF_{i,\alpha}^-, CF_{i,\alpha}^+). \quad (12)$$

Далі, можна записати вираз для NPV:

$$\bar{NPV} = \bigcup_{\alpha \in [0,1]} \left(\sum_{j=0}^n CF_{j,\alpha}^-, \sum_{j=0}^n CF_{j,\alpha}^+ \right). \quad (13)$$

Зауважимо, що нечіткими числами ми вважаємо і величини фінансових потоків. У випадку чітких величин треба у трійці покласти всі три числа рівними.

Використання нечіткого представлення величин фінансових потоків дозволяє враховувати усі фінансові операційні ризики пов'язані з проектом [11]. Інвестор аналізуючи бізнес-план проекту може для кожного звітного періоду визначити песимістичний прогноз доходів і витрат, оптимістичний та найбільш ймовірний на його думку. Так він визначить трикутне нечітке число $\bar{CF}_i$, яке і використовується у розрахунках.

Знайшовши такі нечіткі представлення чистої приведеної вартості для двох проектів і віднявши від першого друге у сенсі операцій над нечіткими числами (за допомогою α -розкладів), отримуємо нове нечітке число $\bar{NPV}_{1,2}$.

Введемо означення дефазифікації, яке нам знадобиться далі. Дефазифікація – це процедура відображення нечіткого числа у чітке. По суті, це процес співставлення нечіткій множині конкретного числа, яке повинно відображати властивості цієї множини.

Зробивши дефазифікацію $\bar{NPV}_{1,2}$ і проаналізувавши знак отриманої величини, можна вже стверджувати про домінування одного проекту над іншим. При цьому правила домінування залишаються тими же, що і в ймовірно-статистичному підході.

Існує декілька методів дефазифікації (перший максимум, середній максимум, висотна дефазифікація), але найбільш вживаним є метод

знаходження середнього, чи інакше центра тяжіння:

$$Defuz(\bar{NPV}) = \frac{\sum_{x \in \Omega} x \cdot \mu_{\bar{NPV}}(x)}{|\bar{NPV}|} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x \mu_{\bar{NPV}}(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \mu_{\bar{NPV}}(x) dx}. \quad (10)$$

В цьому виразі інтегрування, насправді, проводиться в межах додатних значень функції належності, тобто на скінченному інтервалі.

Тепер, щодо агрегації суджень декількох експертів. Тут можна виділити два підходи:

- агрегація нечітких чисел $\bar{NPV}_{1,2}$, сформованих кожним експертом;
- агрегація вже дефазифікованих оцінок.

Розглянемо наступний випадок розташування двох нечітких чисел $\bar{NPV}_{1,2}^1$ та $\bar{NPV}_{1,2}^2$ визначених двома експертами незалежно (рис. 4).

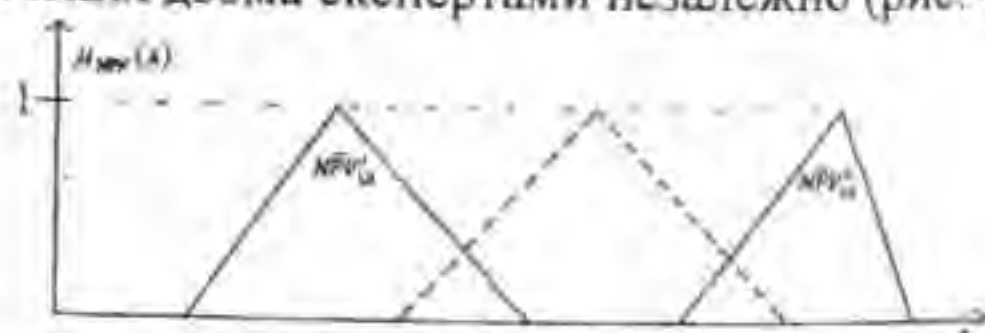


Рис. 4 Два нечітких числа, та їх середнє.

Пунктиром позначено середнє арифметичне $\bar{NPV}_{1,2}^1$ та $\bar{NPV}_{1,2}^2$ у сенсі операцій над нечіткими числами. В цьому випадку середнє число по суті не відображає свідчень у нечіткому вигляді жодного з експертів.

Вибір нечіткого перетину в якості агрегатора, виходячи з прикладу, має очевидні вади.

Якщо ж в якості агрегатора обрати нечітке об'єднання, то це по суті призводить до другого випадку – агрегації вже дефазифікованих оцінок. Зауважимо, що середнє арифметичне дефазифікованих оцінок врахує і саме рішення, і впевненість експерта у своєму рішенні.

Приклад застосування методу.

Розглянемо приклад двох проектів, що конкурують, наведений у [12]. Маємо два фінансових потоки, наведені в таблиці 1:

Таблиця 1

	Проект №1	Проект №2
Інвестиції, г.о.	70	70
Прибутки, г.о.:		
1-ий рік	10	50
2-ий рік	20	40
3-ий рік	30	20
4-ий рік	45	10
5-ий рік	60	10

Всього:	165	130
---------	-----	-----

Зауважимо, що дохід розподілений по різному: для проекту 1 основні інвестиції у кінці періоду, для 2 – на початку.

На основі цих даних були побудовані нечіткі оцінки фінансових показників у кожному році у вигляді трикутних нечітких чисел.

Таблиця 2

	Проект А			Проект Б		
1-ий рік	8	10	12	45	47	50
2-ий рік	15	17	21	38	42	45
3-ій рік	25	30	33	15	20	25
4-ий рік	40	47	55	8	10	15
5-ий рік	55	62	67	5	7	10

В якості ставки реінвестування для обох проектів було обрано $\bar{r} = (10, 15, 18)\%$.

Були побудовані нечіткі оцінки $\tilde{NPV}$ для кожного з проектів та $\tilde{NPV}_{1,2}$ (рис. 5).

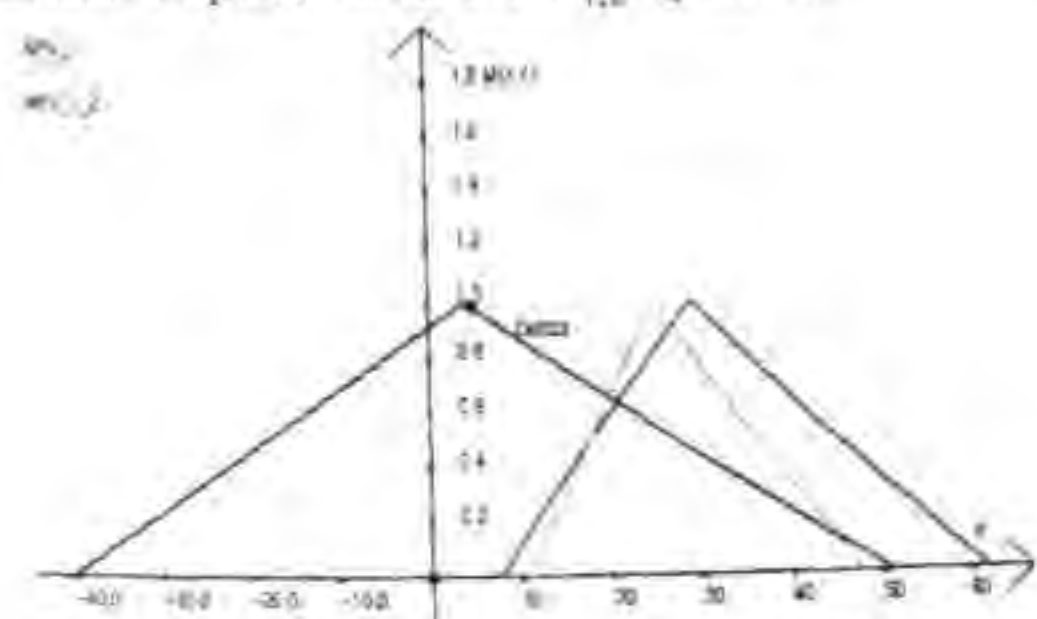


Рис. 5: Нечіткі оцінки двох проектів, та їх різниця.

Для двох даних проектів $\text{Defuz}(\tilde{NPV}_{1,2}) = 4.76$. Отже, можна зробити висновок про домінування проекту №1 (візуально це теж підтверджується).

Зауважимо, що результат – висновок про домінування, співпадає з наведеним у [12].

Застосувавши принцип побудови граничного проекту шляхом віднімання показників одного проекту від іншого [1], матимемо той же результат домінування проекту №1.

Висновок

В статті запропоновано два методи розв'язання суперечності оцінок NPV та IRR між конкуруючими інвестиційними проектами: ймовірно-статистичний та метод з

використанням нечітких чисел. Другий метод можна вважати узагальненням першого.

Обидва методи дають нам математичний апарат, який замінює оцінки NPV та IRR при виборі між двома конкуруючими проектами.

Відмітимо, що в наших методах закладено врахування невизначеностей грошових потоків та операційних ризиків. Також, в другому методі отримані кінцеві нечіткі значення NPV по кожному проекту можуть бути використані і для оцінки ризикованості проектів. Огляд таких оцінок можна знайти у [9, 11].

Список використаних джерел

1. Аньшин В. М. Инвестиционный анализ. – М.: Дело, 2004. – 280 с.
2. Галасюк В.В. О «конflikте» критериев IRR и NPV // http://www.cfin.ru/finanalysis/invest/npv_vs_irr.shtml.
3. Брейлі Р., Майерс С. Принципы корпоративных финансов. – М.: ЗАО "Олимп-Бизнес", 1997. – 1120 с.
4. Брігхем Є. Ф. Основи фінансового менеджменту. – К.: Молодь, 1997. – 1003 с.
5. Graham J. R., Harvey C. R. The Theory and Practice of Corporate Finance: Evidence from the Field // Journal of Financial Economics. – 2001. – 60. – P. 187-243.
6. Хелферт Э. Техника финансового анализа. – М.: ЮНИТИ, 1996. – 663 с.
7. Анісімов В. В., Черняк О. І. Математична статистика: Навч. Посібник для студентів вузів. – К.: МП «Леся», 1995. – 104 с.
8. Бирман Г., Шмидт С. Экономический анализ инвестиционных проектов. – М.: ЮНИТИ, 1997. – 508 с.
9. Недосекин А. О. Нечетко-множественный анализ риска фондовых инвестиций. – СПб.: Сезам, 2002. – 167 с.
10. Мациевский С. В. Нечеткие множества: Учебное пособие. – Калининград: Изд-во КГУ, 2004. – 176 с.
11. Севастьянов П. В., Севастьянов Д. П. Оценка финансовых параметров и риска инвестиций с позиций теории нечетких множеств // "Надежные программы". – 1997. – №1. – С. 10-18
12. Волков И.М., Грачева М.В., Алексанов Д.С. Критерии оценки проектов // http://www.cfin.ru/finanalysis/cf_criteria3.shtml

Надійшла до редколегії 09.03.2010.

УДК 519.9

Савран Р.О.

Розробка стеганоалгоритму стійкого до методів стеганоаналізу

Стеганографія – це процес приховування одної інформації в іншій. В цій роботі розглядається алгоритм приховання інформації в зображеннях без стиснення, проводиться порівняльний аналіз відомих алгоритмів із розробленим.

Ключові слова: стеганографія, стеганоалгоритм, стеганоаналіз

*E-mail: ahill84@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н. Гаращенко Ф.Г. (член редколегії журналу)

Вступ

Стеганографія – це наука про приховування інформації таким чином, щоб її наявність не могла бути виявлена. Її розвиток визваний необхідністю захисту інтелектуального права в мережі Інтернет та заборонаю в багатьох країнах використання методів криптографії в особистих цілях. В прихованні інформації може бути виділено два основні напрямки приховування інформації: невиявлення наявності повідомлення, та за умови активного супротивника, тобто такого, що може вносити зміни в повідомлення.

Наукове вивчення стеганографії бере свій початок у 1983 році, коли Сіменс[1] зробив постановку задачі стеганографії з пасивним супротивником у вигляді обміну інформації між в'язнями. В цій постановці, два в'язні, Аліса та Боб намагаються обмінятися планом втечі. Вони можуть обмінюватися інформацією тільки по відкритому каналу, до якого має доступ охоронець Віллі. Якщо Віллі виявить наявність передачі прихованої інформації, він може перервати обмін повідомленнями і таким чином перешкодити втечі. Проблема стеганографії формулюється наступним чином: як Аліса та Боб можуть приготувати план втечі обмінюючись інформацією через відкритий канал таким чином, щоб Віллі не виявив наявності прихованої інформації в повідомленнях. Цим стеганографія відрізняється від криптографії. Якщо в криптографії намагаються приховати зміст

Savran R.O.

Development of Steganoalgorithm secure from Steganoanalytic attacks

Steganography – is a process of hiding information in innocent looking messages. In this work a new algorithm of hiding messages in uncompressed images is proposed. This algorithm is compared to several known hiding techniques.

Key Words: steganography, steganoalgorithm, steganoanalysis.

повідомлення, в стеганографії приховується сам факт наявності такого повідомлення. Постановка задачі з активним супротивником має інше застосування, оскільки факт наявності повідомлення відомий, але необхідно захистити це повідомлення від видалення. Стеганографія з активним супротивником може бути поділена на два напрямки – цифрові водяні знаки та ідентифікація власника. Цифрові водяні знаки використовуються для маркування об'єктів інтелектуального права та подальшого визначення власника, всі об'єкти маркуються однаково. Ідентифікація власника використовується для унікального визначення копії об'єкта інтелектуального права, тобто в кожний об'єкт вбудовується унікальний маркер.

В роботі розглядається постановка задачі Сіменса, де процес вбудовування може бути представлений наступним чином:

$$y = x + g(x, K, s), \text{ де}$$

y – стегоконтейнер, тобто зображення, що містить приховане повідомлення.

K – ключ, секретна інформація, якою Аліса та Боб обмінялися, коли були на волі.

x – пустий контейнер, тобто зображення, що не містить прихованого повідомлення.

s – повідомлення, що необхідно приховати.

g – функція, що перетворює приховане повідомлення в деякий адитивний сигнал.

Функція отримання прихованого розпізнавання.
повідомлення:

$$x = g^{-1}(y, K)$$

Додатково накладаються наступні вимоги:

1. Ключ K невідомий охоронцю Віллі.
2. Віллі не відомий пустий контейнер x .

Вимога 2 є обов'язковою, оскільки маючи пустий та стегоконтейнер, охоронець Віллі може виявити наявність прихованого повідомлення за допомогою порівняння контейнерів.

На практиці ці умови неважко досягнути. Для цього достатньо, наприклад, зробити фотографії живої природи, а після застосування стеганоалгоритму знищити оригінал.

Сучасні стеганоаналітичні алгоритми

Якщо в якості пустих контейнерів виступають знімки зроблені однією фотокамерою, то, як показано в роботі [1], ці контейнери мають певний розподіл, що відрізняється для різних фотокамер (мається на увазі розподіл шуму зображення). Теж саме можна сказати про сканери та інші методи отримання зображень з природи. Крім того розглядаються зображення, які складаються з відтінків сірого.

Тепер обґрунтуємо вибір саме такого виду контейнерів з точки зору стеганографа. Як показали останні дослідження [2], виявлення наявності скритого повідомлення є найважчим саме для зображень отриманих скануванням чи цифрових фотографій, зображень, що не є стиснутими та зображень з відтінків сірого.

Спроба розробити алгоритм, що буде стійким до атак стеганоаналізу була зроблена в роботі [3], але нові алгоритми стеганоаналізу дозволяють виявити і цей метод стеганографії. Тому в роботі пропонується новий метод стеганографії, що є стійким до атаки запропонованої в [1] та подібних їй атак.

Методи стеганоаналізу базуються на аналізі шуму зображення, тому що саме він використовуються для приховування даних. Для аналізу використовують, як правило, вейвлет-перетворення за деяким базисом. Після цього підраховуються деякі характеристики отриманих перетворень. Це повторюється для великої кількості пустих контейнерів і стегоконтейнерів, отриманих з них. Потім за допомогою побудованого дискримінатора [1] робиться

Вперше такий підхід було запропоновано у роботі [6].

Запропонований алгоритм

В роботі запропоновано алгоритм, що базується на роботі [3] із використанням методу $\pm k$ вбудовування [4]. Визначати, як саме обирати k , будемо з наступних умов:

вейвлет-декомпозиція є лінійною, тому її можна представити у вигляді системи лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$S_h = A * x,$$

де A - матриця перетворень, а S_h - високочастотні компоненти сигналу x .

Використовуючи лінійність, запишемо вираз (2) для модифікованого контейнера методом $\pm k$:

$$\begin{aligned} S'_h &= A * (x + g(x, K, s)) = A * x + A * g(x, K, s) \\ &= S_h + A * g(x, K, s) \end{aligned}$$

Отже:

$$\begin{aligned} S'_h - S_h &= A * g(x, K, s) \\ g(x, K, s) &= \begin{cases} -3, -1, 1, 3, & \text{якщо } s'_i \oplus x_i = 1, \\ -2, 0, 2, & \text{якщо } s'_i \oplus x_i = 0, \end{cases} \end{aligned}$$

де s'_i - це біт зашифрованого повідомлення за допомогою алгоритму AES[5].

Для визначення значення функції g (наприклад $-3, -1, 1$ чи 3 , якщо $s'_i \oplus x_i = 1$) розглядається критерій:

$$\|k' - k\| \rightarrow \min_{g(x, K, s) \in D},$$
$$D \subset \mathbb{Z}^n$$

де $k_i, k'_i, i = \overline{1, n}$ - висота відповідних гістограм векторів S_h та S'_h .

Алгоритм функції g (вбудовування):

1. Будуємо гістограму вектора S_h .
2. Обчислюємо вектор s' , що є зашифрованим повідомленням.
3. Будуємо гістограму вектора S'_h .
4. Цикл. Якщо $g_i = 1$, то значення g_i в циклі буде пробігати значення $[-3, -1, 1, 3]$, інакше - $[-2, 0, 2]$.
5. Розраховуємо при якому значенні g_i буде досягатися мінімальне значення

$$\|k' - k\|.$$

6. Повторюємо кроки 4-5 для всіх значень i .

7. По формулі (1) будуємо стегоконтейнер.

Алгоритм функції g^{-1} отримання прихованого повідомлення із стегоконтейнера:

1. Обчислюємо вектор y' , який є найменшими значущими бітами стегоконтейнера.

2. Дешифруємо отриманий вектор за допомогою алгоритму AES.

3. Отриманий вектор буде початковим повідомленням x .

Отримані результати.

За допомогою програмного середовища Matlab було розроблено програмне забезпечення, що реалізовує даний алгоритм та стеганоаналітичний алгоритм, запропонований в роботі [1]. Для порівняння було обрано алгоритми вбудовування Найменшого значущого біту та алгоритму OutGuess, запропонованого у роботі [3]. В якості пустих контейнерів було обрано 1000 фотографій природи з сайту <http://photo.online.ua>. Щільність заповнення була взята 25% (кількість біт повідомлення на один незначущий біт зображення), в якості повідомлення було обрано послідовність псевдовипадкових чисел.

Список використаних джерел

1. J. Fridrich, T. Holotyak, S. Voloshynovskiy Blind Statistical Steganalysis of Additive Steganography Using Wavelet Higher Order Statistics // Proc. of the 9th IFIP TC-6 TC-11 Conference on Communications and Multimedia Security, Sep. 19-21, 2005, Salzburg, Austria.
2. A. Ker: Resampling and the Detection of LSB Matching in Color Bitmaps // Proc. SPIE Electronic Imaging, Security, Steganography and Watermarking of Multimedia Contents VII, 2005.
3. N. Provos, "Defending Against Statistical Steganalysis" // 10th USENIX Security Symposium, Washington, DC, August 2001.
4. T. Sharp, "An Implementation of Key-Based Digital Signal Steganography" // I. S. Moskowitz (ed.): Information Hiding, 4 International Workshop, LNCS 2137, Springer-Verlag, New York, pp. 13-26, 2001.

Отримано наступні результати :

Імовірність похибки першого роду	Імовірність правильного визначення		
	НЗБ	OutGuess	Запропонований алгоритм
0,10	0,35	0,23	0,20
0,20	0,60	0,34	0,29
0,30	0,74	0,51	0,45
0,40	0,82	0,67	0,59

Імовірність похибки першого роду в даному випадку – це імовірність знаходження прихованого повідомлення в пустому контейнері, імовірність правильного визначення – це імовірність того, що алгоритм визначить, що повідомлення є стегоконтейнером.

Результати показали, що даний алгоритм є суттєвим покращенням алгоритму НЗБ та дає дещо кращі результати у порівнянні з алгоритмом OutGuess. Але стеганоалгоритм [1] має змогу визначити стегоконтейнер з імовірністю більшою, ніж імовірність похибки першого роду, що вказує на можливість вдосконалення запропонованого алгоритму. Також було б цікавим дослідити допустимі межі щільності вбудовування.

5. Старт Н. Криптографія. – Москва : Техносфера, 2005. – 528 с.
6. Avcibas, N. Memon, and B. Sankur: "Steganalysis Using Image Quality Metrics", in E. Delp et al. (eds.): Proc. SPIE Electronic Imaging, Security and Watermarking of Multimedia Contents II, vol. 4314, pp. 523-531, 2001.
7. J. Zollner, H. Federrath, H. Klimant, A. Pfitzmann, R. Piotraschke, A. Westfeld, G. Wicke, and G. Wolf. Modelling the Security of Steganographic Systems. In Proceedings of Information Hiding - Second International Workshop. Springer-Verlag, April 1998.
8. Хорошко В.О., Азаров О.Д., Щелест М.Е., Яремчук Ю.Є. Основи комп'ютерної стеганографії: Навчальний посібник для студентів та аспірантів. – Вінниця: ВДТУ, 2003.- 143 с.

Надійшла до редколегії 27.05.10

Умова 2. Існує таке число k_1 , що кожен граф G_n ($n=1,2,\dots$) може бути отримано з графу G_{n+1} за рахунок склеювання k_1 вершин.

Умова 3. Існує таке число k_2 , що $|E(v)|=k_2$ для кожної вершини $v \in V_n$ ($n=1,2,\dots$) графу G_n .

Умова 4. У кожному графі G_n ($n=1,2,\dots$) існує такий гамільтонів цикл $\bar{c}_0$, що може бути побудовано послідовність гамільтонових циклів

$$\bar{c}_0, \bar{c}_1, \dots, \bar{c}_{h(n)}, \quad (4)$$

для якої перехід від $\bar{c}_i$ ($i=0,1,\dots,h(n)-1$) до $\bar{c}_{i+1}$ здійснюється зі складністю $O(1)$ ($n \rightarrow \infty$), а $h(n)$ є експонентою від $f(n)$.

Побудуємо послідовність (3) регулярних зв'язних графів, та встановимо нижню оцінку кількості гамільтонових циклів у графі G_n ($n=1,2,\dots$).

1. Аналізуємо послідовність графів

Відомо, що з усіх розбиттів множини S ($|S|=3n$) найбільшу кількість трансверсалей має її розбиття на 3-елементні блоки. З цього випливає, що доцільно проаналізувати таку послідовність зв'язних регулярних графів $G_n = (V_n, E_n)$ ($n=1,2,\dots$), що

$$V_n = \{0, 1, \dots, 3n-1\} \quad (n=1, 2, \dots),$$

а E_n ($n=1,2,\dots$) є множиною усіх таких ребер, що кожен підграф графа G_n , який визначено множиною вершин

$$V_{n,i} = V_{n,i}^{(1)} \cup V_{n,i}^{(2)} \quad (i=0, 1, \dots, n-1),$$

де

$$V_{n,i}^{(1)} = \{3i, 3i+1, 3i+2\},$$

$$V_{n,i}^{(2)} = \{j, j+1, j+2\} \quad (j = (3i+3) \pmod{3n}),$$

ізоморфний повному графу K_3 .

Оскільки для побудованої послідовності графів $f(n)=3n$ та $g(n)=12n$, то умову 1 задовільнено.

Граф G_n ($n=1,2,\dots$) може бути отримано з графу G_{n+1} за рахунок склеювання $k_1=3$ вершин $3n$, $3n+1$ та $3n+2$ відповідно з вершинами 0, 1 та 2, що задовольняє умову 2.

Оскільки $|E(v)|=8$ для кожної вершини $v \in V_n$ ($n=1,2,\dots$) графу G_n , то $k_2=8$, тож побудована послідовність графів $G_n = (V_n, E_n)$ ($n=1,2,\dots$) задовольняє умову 3.

2. Основний результат

Встановимо відповідність визначеної вище послідовності графів G_n ($n=1,2,\dots$) умові 4.

Теорема 1. У кожному графі G_n ($n=1,2,\dots$) існує такий гамільтонів цикл $\bar{c}_0$, що може бути побудовано послідовність гамільтонових циклів $\bar{c}_0, \bar{c}_1, \dots, \bar{c}_{h(n)}$, для якої перехід від $\bar{c}_i$ до $\bar{c}_{i+1}$ ($i=0,1,\dots,h(n)-1$) здійснюється зі складністю $O(1)$ ($n \rightarrow \infty$), та має місце рівність

$$h(n) = \begin{cases} (\sqrt{6})^{f(n)}, & n=2k \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(\sqrt{6})^{f(n)}, & n=2k+1 \end{cases} \quad (5)$$

Доведення. Зафіксуємо таку послідовність

$$j_0, j_1, \dots, j_{n-1} \in V_n \quad (6)$$

вершин графу G_n ($n=1,2,\dots$), що

$$j_i \in V_{n,i}^{(1)} = \{3i, 3i+1, 3i+2\} \quad (i=0, 1, \dots, n-1).$$

Можуть мати місце наступні два випадки.

1. Нехай n – парне число, тобто $n=2k$. $U(j_0, j_1, \dots, j_{2k-1})$ – множина таких гамільтонових циклів $\bar{c}$ у графі G_n , що:

1) кожне ребро

$$\{j_{2l-1}, j_{2l \pmod{n}}\} \in E_n \quad (l=1, \dots, k)$$

належить циклу $\bar{c}$;

2) фрагмент

$$j_{2l} \dots j_{2l+1} \quad (l=0, 1, \dots, k-1)$$

циклу $\bar{c}$ містить в собі лише вершини, що належать множині $V_{n,2l}$.

Кожен підграф графа G_n , який визначено множиною вершин $V_{n,2l}$ ($l=0, 1, \dots, k-1$), є ізоморфний повному графу K_3 . Тому

$$\begin{aligned} |U(j_0, j_1, \dots, j_{2k-1})| &= (4!)^k = \\ &= 24^k = 24^{\frac{1n}{2}} = (\sqrt{24})^{f(n)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Зрозуміло, що множину $U(j_0, j_1, \dots, j_{2k-1})$ можна впорядкувати так, що перехід від кожного

гамільтонового циклу до наступного буде здійснюватися зі складністю $O(1)$ ($n \rightarrow \infty$).

Оскільки послідовність (6) може бути обрана

$$3^n = (\sqrt[6]{9})^{3n} = (\sqrt[6]{9})^{f(n)} \quad (8)$$

способами, а для різних послідовностей (6) множини $U(j_0, j_1, \dots, j_{2k-1})$ не перетинаються, то з (7) та (8) випливає, що

$$h(n) = (\sqrt[6]{24})^{f(n)} (\sqrt[6]{9})^{f(n)} = (\sqrt[6]{6})^{f(n)},$$

що і треба було довести.

1. Нехай n – непарне число, тобто $n = 2k + 1$. Позначимо $W(j_0, j_1, \dots, j_{2k})$ множину таких гамільтонових циклів $\tilde{c}$ у графі G_n , що:

1) кожне ребро

$$\{j_{2l-1}, j_{2l}\} \in E_n \quad (l = 1, \dots, k)$$

належить циклу $\tilde{c}$;

2) фрагмент

$$j_{2l} \dots j_{2l+1} \quad (l = 0, 1, \dots, k-1)$$

циклу $\tilde{c}$ містить в собі лише вершини, які належать множині $V_{n,2l}$;

3) фрагмент

$$j_{2k} v v' j_0 \quad (v, v' \in V_{n,2k}^{(1)})$$

належить циклу $\tilde{c}$.

Оскільки

Список використаних джерел

1. Menezes A. Handbook of applied cryptography / A. Menezes, P. van Oorschot, S. Vanstone. – N.Y.: CRC Press, Inc., 1997. – 780 p.
2. Молдовян А.А. Криптография: скоростные шифры / А.А. Молдовян, Н.А. Молдовян,

$$|W(j_0, j_1, \dots, j_{2k})| = 2(4!)^k = \frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt[6]{24})^{f(n)},$$

послідовність (6) може бути обрана

$$3^n = (\sqrt[6]{9})^{3n} = (\sqrt[6]{9})^{f(n)}$$

способами, а для різних послідовностей (6) множини $W(j_0, j_1, \dots, j_{2k})$ не перетинаються, то

$$h(n) = \frac{1}{\sqrt{6}} (\sqrt[6]{6})^{f(n)},$$

що і треба було довести.

Теорему доведено.

Висновки

Побудована послідовність регулярних зв'язних графів $G_n = (V_n, E_n)$ ($n = 1, 2, \dots$) дає змогу генерувати, один за одним, експоненційні по числу елементів послідовності гамільтонових циклів, за допомогою лише локальних обчислень на графі, що мають константну складність.

Дослідження півгруп переставлень, що породжуються побудованими послідовностями гамільтонових циклів окреслює напрямок подальших досліджень.

Інший напрямок пов'язан з аналізом доцільності використання переставлень, що породжуються побудованими послідовностями гамільтонових циклів, у пошарових блоках керуємих переставлень [2].

Н.Д. Гуц и др. – СПб: БХВ-Петербург, 2002. – 496 с.

3. Bollobás B. Modern graph theory / B. Bollobás. – N.Y.: Springer-Verlag, Inc, 1998. – 394 p.
4. Скобелев В.Г. Локальные алгоритмы на графах / В.Г. Скобелев. – Донецк: ИПММ НАН Украины, 2003. – 217 с.

Надійшла до редколегії 16.04.2010

УДК 519.71

Стешенко Г.М. інженер

Дослідження існування і єдності слабкого розв'язку для параболічних систем з сингулярними правими частинами

У даній роботі було розглянуто фізичну постановку задачі, а також за допомогою апіорних нерівностей для параболічних систем із сингулярними правими частинами було доведено теореми про існування єдиного розв'язку задачі про дифузивно-конвективний перенос суміші ізотопів у пористому середовищі із урахуванням явища філіації.

Ключові слова: апіорні нерівності, філіація, параболічні системи.

G. Steshenko

Investigation of existence and uniqueness of the weak solution of parabolic systems with singular right-hands

The convection-diffusion of isotope mixture in porous media accounting filiation is considered. The theorems on existence of a unique solution of the problem is proven using a priori inequalities for parabolic systems with singular right-hands.

Key Words: a priori inequality, filiation, parabolic systems.

*E-mail: grrtt@mail.ru

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Хусаїнов Д.Я.

1. Фізична постановка задачі

Припустимо, що радіоактивна суміш складається з ізотопів, до того ж кожний компонент може розпастися на наступний компонент відповідно до ланцюжка розпаду. Для того щоб описати перенос такої суміші скрізь пористе середовище в обмеженій області:

$$G = (0, T) \times \Omega, \quad \Omega \subset R^2, \quad \text{будемо}$$

використовувати модель, запропоновану в роботах Шоке [1, 2], Шоке і Циммермана [3], а також Дугласом і Спаньоло [4].

Нехай системи описується функцією: $u = (u_1, u_2, \dots, u_D)$, де $u_d = u_d(t, \xi_1, \xi_2)$, $d = \overline{1, D}$, $D \in N$. Кожна функція u_d визначена в циліндричній області $Q = (0, T) \times \Omega$, де $\Omega = \Omega_1 \cup \gamma \cup \Omega_2 \subset R^2$ — обмежена і однозв'язна область (діапазон змінної $\xi = (\xi_1, \xi_2)$) із регулярною границею $\partial\Omega$, розділена гладкою лінією $\gamma = \overline{\Omega_1} \cap \overline{\Omega_2} \subset R^2$ на дві однозв'язні області Ω_1 і Ω_2 із різною проникністю пористого середовища. Припустимо, що $Q_1 = (0, T) \times \Omega_1$, $Q_2 = (0, T) \times \Omega_2$ і

$Q_3 = (0, T) \times \gamma$, стан $u(t, \xi)$ системи, визначений наступними параболічними рівняннями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_d}{\partial t} - \sum_{m,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(k_{mj}^{(d)}(\xi) \frac{\partial u_d}{\partial \xi_j} \right) + \\ + \sum_{m=1}^2 \frac{\partial}{\partial \xi_m} (c_m^{(d)}(\xi) u^{(d)}) + \\ + q_d(\xi) u_d + q_{d-1}(\xi) u_{d-1} = f_d(t, \xi) \\ (t, \xi) \in Q_1 \cup Q_2, \quad d = \overline{1, D} \end{aligned} \quad (1.1)$$

і умовами:

$$u_d|_{t=0} = 0, \quad u_d|_{\xi \in \partial\Omega} = 0, \quad (1.2)$$

$$[(\omega_d, n)_{R^2}] = f_{0d}(t, \xi), \quad (t, \xi) \in Q_3, \quad (1.3)$$

$$[u_d] + R_1(\omega_d, n)_{R^2}^- + R_2(\omega_d, n)_{R^2}^+ = 0, \\ (t, \xi) \in Q_3, \quad (1.4)$$

де $k_{ml}^{(d)}(\xi) = \frac{D_{ml}^{(d)}}{wR_d}$, w — пористість

середовища, R_d — коефіцієнт віддачі, обумовлений пружною деформацією середовища відносно d -го компоненту, що відбиває вплив адсорбції, $D_{ml}^{(d)}$ — коефіцієнти дифузії d -го компонента вздовж осей Ox_α ,

$c_m^{(d)}(\xi) = \frac{v_m(\xi)}{wR_d}$ — проекції швидкості на вісі

Ox_α , $\alpha = 1, 2$, $q_d(\xi) = \lambda_d$, λ_d — швидкість розпаду d -го компонента на $(d+1)$ -й компонент, $d = 1, \dots, D$,

$f_d(t, \xi) = -\delta(x)Q_d(t)$, $Q_d(t) = (Q_1^{(d)}(t), Q_2^{(d)}(t), \dots, Q_p^{(d)}(t))$ — вектор невідомих потужностей точкових джерел d -го ізотопу,

$\delta(x) = (\delta(x-r_1), \delta(x-r_2), \dots, \delta(x-r_p))$ —

позначення, що відбиває точкову природу джерел, $\delta(x)$ — дельта-функція Дірака. Вектори r_i визначають координати джерел із невідомими потужностями $Q_\beta^{(d)}(t)$. Вимірювання

концентрації $\varphi_m(t)$ інтерпретується як середнє функції $u(t, x)$ в околах ω_m точок

спостереження $z_m \in \Omega$, $m = \overline{1, M}$. Маємо знайти величини $Q_\beta^{(d)}(t)$, $\beta = \overline{1, p}$, що мінімізують

стандартне відхилення $u(t, z_m)$ від $\varphi_m(t)$. Вихідний ізотоп має номер 1, а останній (стабільний) ізотоп має номер D (отже, $\lambda_0 = R_0 = 0$).

Крім того, $w_d = -K_d \text{grad } u_d + c^{(d)}u_d$ в $Q_1 \cup Q_2$,

$K^{(d)} = \{k_{ml}^{(d)}\}_{m,l=1}^2$ — невідроджена матриця,

$c^{(d)} = (c_1^{(d)}, c_2^{(d)})$ — вектор швидкості;

$\text{grad } u_d = (u_{d\xi_1}, u_{d\xi_2})$, $[u_d]$ — стрибок функції $u_d(t, \xi)$ в Q_3 , тобто:

$$[u_d](t, \xi_0) = u_d(t, \xi_0) - u_d^-(t, \xi_0), \quad \xi_0 \in \gamma,$$

$$u_d^+(t, \xi_0) = \lim_{\xi^* \rightarrow \xi_0} u_d(t, \xi^*),$$

$$u_d^-(t, \xi_0) = \lim_{\xi^- \rightarrow \xi_0} u_d(t, \xi^-), \quad \xi^* \in \Omega_2,$$

$$\xi^- \in \Omega_1;$$

$$[(\omega_d, n)_{R^2}], (\omega_d, n)_{R^2}^*, i (\omega_d, n)_{R^2}^-$$

визначаються як звичайно; $R_1(\xi) \geq 0$ і $R_3(\xi) \geq 0$ — неперервні функції на межі $\bar{\gamma}$, що характеризують фізичні параметри меж γ_1 і γ_3 ($R_1(\xi) + R_3(\xi) > 0$); і $n = (n_\xi, n_\eta)$ — вектор нормалі до межі γ , спрямований назовні області Ω_1 .

Умови (1.2) описують розподіл d -го компонента в момент $t=0$ (початкова умова) і вздовж межі $\partial\Omega$ (крайова умова). Умова (1.4) описує стрибок маси скрізь внутрішню межу. Якщо $f_{d0} = 0$, умови (1.3) и (1.4) перетворюються в однорідні умови неідеального контакту:

$$[(\omega_d, n)_{R^2}] = 0, \quad \alpha[u_d] + (\omega_d, n)_{R^2} = 0, \quad (t, \xi) \in Q_3,$$

$$\text{Де: } \alpha = \frac{1}{R_1 + R_3}.$$

Для того щоб розв'язати задачу (1.1)-(1.4), розіб'ємо її на окремі рівняння, що описують рух кожного компонента ($d = 1, \dots, D$), використовуючи метод розщеплення по фізичним процесам, запропонований Марчуком [6]. Отже, надалі ми будемо розглядати окремі рівняння параболічного типу із внутрішніми джерелами і стоками і не будемо указувати номер компонента.

В обмеженій області $G = (0, T) \times \Omega$, $\Omega \in R^2$ ми шукаємо розв'язок параболічного рівняння:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = f(t, x), \quad x \in \Omega, \quad 0 < t \leq T \quad (1.5)$$

$$u|_{(0,T) \times \partial\Omega} = 0, \quad u|_{t=0} = 0, \quad (1.6)$$

де

$$Au \equiv \sum_{m=1}^2 \frac{\partial}{\partial \xi_m} (c_m(\xi)u) - \sum_{m,l=1}^2 \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(k_{ml}(\xi) \frac{\partial u}{\partial \xi_l} \right),$$

$u(t, x)$ — концентрація забруднення в ґрунтових водах, $f(t, x) = -\delta(x)Q(t)$,

$Q(t) = (Q_1(t), Q_2(t), \dots, Q_p(t))$ — вектор невідомих значень потужності точкових джерел.

2. Дослідження існування та єдності розв'язку

Для дослідження наших просторів введемо наступні норми:

$$\|U\|_{L_2(Q)}^2 = \int_0^T \int \sum_{k,m=1}^3 (u_{km})^2 d\Omega dt$$

$$\|U\|_H^2(Q) = \int_0^T \int \sum_{k,m=1}^3 \left((u_{km})_t^2 + \sum_{i=1}^n (u_{km})_{x_i}^2 + \sum_{j=1}^n (u_{km})_{xy_j}^2 \right) d\Omega dt$$

Простір H_+ - поповнення простору $D(L^*)$ по аналогічній нормі з H .

По парам $H, L_2(Q)$ та $H_+, L_2(Q)$ побудуємо негативні простори $(H)^*$ та $(H_+)^*$ поповнюючи $L_2(Q)$ за нормами:

$$\|f\|_{(H)^*} = \sup_{\substack{U \in H \\ U \neq 0}} \frac{|(F, U)_{L_2(Q)}|}{\|U\|_H}$$

$$\|f\|_{(H_+)^*} = \sup_{\substack{V \in H_+ \\ V \neq 0}} \frac{|(F, V)_{L_2(Q)}|}{\|V\|_{H_+}}$$

Має місце ланцюжок щільних вкладень просторів:

$$H \subset L_2(Q) \subset (H)^*$$

$$H_+ \subset L_2(Q) \subset (H_+)^*$$

Наведемо леми отримані в роботі [1] без доведення:

Лема 1.

Для довільної функції $U(t, x) \in D(L)$ має місце оцінка:

$$\|LU\|_{L_2(Q)} \leq C_1 \|U\|_H$$

Лема 2.

Для довільної функції $V(t, x) \in D(L^*)$ має місце оцінка:

$$\|VL^*\|_{L_2(Q)} \leq C_1 \|V\|_{H_+}$$

Лема 3.

Для довільної функції $U(t, x) \in H$ має місце оцінка

$$C_1 \|U\|_H \leq \|LU\|_{L_2(Q)}$$

Лема 4.

Для довільної функції $V(t, x) \in D(L^*)$ має місце оцінка:

$$C_1 \|V\|_{H_+} \leq \|VL^*\|_{L_2(Q)}$$

Користуючись отриманими оцінками доведемо існування єдиного розв'язку задачі про дифузивно-конвективний перенос суміші ізотопів у пористому середовищі із урахуванням явища філіації.

Позначимо через $\langle \cdot, \cdot \rangle$ білінійну форму побудовану розширенням скалярного добутку в $L_2(Q)$ за неперервністю до білінійної форми на $(H)^* \times H$, та позначимо через $\langle \cdot, \cdot \rangle_+$ білінійну форму побудовану розширенням скалярного добутку в $L_2(Q)$ за неперервністю до білінійної форми на $(H_+)^* \times H_+$.

Розглянемо операторні рівняння:

$$LU = f \quad (2.1)$$

$$VL^* = g \quad (2.2)$$

Означення 1. $U \in L_2(Q)$ - називається слабким розв'язком рівняння (2.1), якщо:

$$(U, VL^*)_{L_2(Q)} = \langle f, V \rangle_+, \forall V \in H_+. \quad (2.3)$$

Зауваження 3. Аналогічно можна визначити слабкий розв'язок $V \in L_2(Q)$ рівняння (2.2).

Теорема 1. Для будь-якого елемента $f \in L_2(Q)$ існує єдиний розв'язок $U \in H$ операторного рівняння (2.1) в нормі простору $L_2(Q)$.

Доведення.

В силу нерівностей Лема 1 та Лема 3, а саме:

$$\|U\|_H \leq \|C_1 U\|_{L_2(Q)} \leq C_2 \|U\|_H,$$

оператор $L(\cdot)$ діє як лінійний неперервний оператор з простору H в $L_2(Q)$. З нерівності:

$$\|U\|_H \leq C_1 \|LU\|_{L_2(Q)}$$

Леми 1, випливає, що область значення оператора $L(\cdot)$ замкнена в $L_2(Q)$: $R(L) \subseteq L_2(Q)$. Залишається довести щільність її в $L_2(Q)$. Для цього треба показати для будь-якої $U \in H$ рівність $(G, LU)_{L_2(Q)} = 0$ виконується тільки у випадку коли $G = 0$. Для цього візьмемо G :

$$G = \begin{pmatrix} g_1(t, x) \\ g_2(t, x) \\ g_3(t, x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_T^t -e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} \tau} u(\tau, x) d\tau \\ \int_T^t -e^{-\frac{\kappa C_B^2}{k_B} \tau} v(\tau, x) d\tau \\ \int_T^t -e^{-\frac{\kappa C_C^2}{k_C} \tau} \omega(\tau, x) d\tau \end{pmatrix},$$

де C_A, C_B, C_C — константи, що мажорують $|a_i(x)|, |b_i(x)|, |c_i(x)|$, які існують в силу неперервності $a_i(x), b_i(x), c_i(x)$ в $\bar{\Omega}$ ($i = \overline{1, n}$), n — розмірність області Ω . Ясно, що функція $G(t, x)$ задовольняє умовам[1]:

$$\begin{aligned} v(x, t) &= 0, x \in \partial\Omega & v(x, T) &= 0 \\ \eta(x, t) &= 0, x \in \partial\Omega & \eta(x, T) &= 0 \\ \theta(x, t) &= 0, x \in \partial\Omega & \theta(x, T) &= 0, \end{aligned}$$

Представляючи $U(t, x)$ через $G(t, x)$, отримаємо:

$$U(t, x) = \begin{pmatrix} u(t, x) \\ v(t, x) \\ \omega(t, x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{1t}(t, x) \\ -e^{-\frac{\kappa C_B^2}{k_B} t} g_{2t}(t, x) \\ -e^{-\frac{\kappa C_C^2}{k_C} t} g_{3t}(t, x) \end{pmatrix}.$$

Розглянемо:

$$(LU, G)_{L_2} = (U, L^*G)_{L_2},$$

$$\begin{aligned} & \left(\begin{pmatrix} L_1 & -a(x) & 0 \\ 0 & L_2 & -b(x) \\ 0 & 0 & L_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(t, x) \\ v(t, x) \\ \omega(t, x) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} g_1(t, x) \\ g_2(t, x) \\ g_3(t, x) \end{pmatrix} \right) = \\ & = \left(\begin{pmatrix} u(t, x) \\ v(t, x) \\ \omega(t, x) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} L_1^* & 0 & 0 \\ -a(x) & L_2^* & 0 \\ 0 & -b(x) & L_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_1(t, x) \\ g_2(t, x) \\ g_3(t, x) \end{pmatrix} \right) = \\ & = \left(\begin{pmatrix} -e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{1t}(t, x) \\ -e^{-\frac{\kappa C_B^2}{k_B} t} g_{2t}(t, x) \\ -e^{-\frac{\kappa C_C^2}{k_C} t} g_{3t}(t, x) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} L_1^* g_1 \\ -a(x) g_1 + L_2^* g_2 \\ -b(x) g_2 + L_3^* g_3 \end{pmatrix} \right) = \\ & = \left(-e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{1t}(t, x), L_1^* g_1 \right)_{L_2(Q)} + \\ & + \left(-e^{-\frac{\kappa C_C^2}{k_C} t} g_{3t}(t, x), L_3^* g_3 \right)_{L_2(Q)} + \\ & + \left(-e^{-\frac{\kappa C_B^2}{k_B} t} g_{2t}(t, x), L_2^* g_2 \right)_{L_2(Q)} + \\ & + \int_Q a(x) e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{2t}(t, x) g_1(t, x) dQ + \\ & + \int_Q b(x) e^{-\frac{\kappa C_C^2}{k_C} t} g_{3t}(t, x) g_2(t, x) dQ \quad (2.4) \end{aligned}$$

Розглянемо перший доданок:

$$\begin{aligned} & \left(-e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{1t}(t, x), L^* g \right)_{L_2} = I_{1A} + I_{2A} + I_{3A} + I_{4A} \\ & I_{1A} = \int_Q e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{1t}^2 dQ, \\ & I_{2A} = \int_Q e^{-\frac{\kappa C_A^2}{k_A} t} g_{1t} \left(\sum_{i,j=1}^n a_{ij} g_{1x_j} \right)_{x_i} dQ = \end{aligned}$$

$$\int_Q \left(e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} g_1 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} \right) dQ - \\ - \int_Q \sum_{i,j=1}^n e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} dQ$$

Користуючись формулою Остроградського-Гауса, можна довести, що перший справа інтеграл дорівнює нулю ($g_{1i}|_{x \in \partial\Omega} = 0$). До другого інтегралу застосуємо формулу інтегрування по частинам::

$$I_{2A} = - \int_Q \sum_{i,j=1}^n e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} dQ = \\ = - \frac{1}{2} \int_Q \left(\sum_{i,j=1}^n e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} \right) dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \sum_{i,j=1}^n \frac{nC_{A1}^2}{k_A} e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} dQ.$$

Користуючись формулою Остроградського-Гауса, перейдемо в першому справа доданку до інтегралу по поверхні. До другого доданку застосуємо нерівність:

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij} \xi_i \xi_j \geq k_A \sum_{i=1}^n \xi_i^2.$$

маємо:

$$I_{2A} = - \frac{1}{2} \int_Q \left(\sum_{i,j=1}^n e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} \right) dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \sum_{i,j=1}^n \frac{nC_{A1}^2}{k_A} e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} dQ \geq \\ \geq \frac{1}{2} \int_Q \sum_{i,j=1}^n a_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} \Big|_{i=0} d\Omega + \\ + \int_Q \sum_{i,j=1}^n nC_{A1}^2 e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} g_{1x_i}^2 dQ \\ I_{3A} = \int_Q \sum_{i,j=1}^n e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} b_{ij} g_{1x_i} g_{1x_j} dQ \geq - \int_Q \sum_{i,j=1}^n C_{A1} e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} |g_{1i}| |g_{1j}| dQ$$

Окремо розглянемо четвертий інтеграл:

$$I_{4A} = - \int_Q e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a(x) g_{1i} g_{1j} dQ = \\ = - \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a(x) g_{1i}^2 \right) dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_{A1}^2}{k_A} e^{\frac{nC_{A1}^2}{k_A}} a(x) g_{1i}^2 dQ \quad (2.5)$$

Аналогічно випишемо 4 інтеграл з 2 та 3 скалярних добутків рівності (2.4):

$$I_{4B} = - \int_Q e^{\frac{nC_{B1}^2}{k_B}} b(x) g_{2i} g_{2j} dQ = \\ = - \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_{B1}^2}{k_B}} b(x) g_{2i}^2 \right) dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_{B1}^2}{k_B} e^{\frac{nC_{B1}^2}{k_B}} b(x) g_{2i}^2 dQ \quad (2.6)$$

$$I_{4C} = - \int_Q e^{\frac{nC_{C1}^2}{k_C}} c(x) g_{3i} g_{3j} dQ =$$

$$= - \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_{C1}^2}{k_C}} c(x) g_{3i}^2 \right) dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_{C1}^2}{k_C} e^{\frac{nC_{C1}^2}{k_C}} c(x) g_{3i}^2 dQ \quad (2.7)$$

Розпишемо також інтеграли 4 і 5 з рівності (2.4):

$$\int_Q a(x) e^{\frac{nC_{B1}^2}{k_B}} g_{2i}(t, x) g_{1i}(t, x) dQ = \\ = \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_{B1}^2}{k_B}} a(x) g_{2i} g_{1i} \right) dQ - \\ - \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_{B1}^2}{k_B} e^{\frac{nC_{B1}^2}{k_B}} a(x) g_{2i} g_{1i} dQ \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \int_Q b(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} g_{3l}(t, x) g_2(t, x) dQ = \\ \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3 g_2 \right)_l dQ - \\ - \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3 g_2 dQ \end{aligned} \quad (2.9)$$

Скористаємося нерівністю $ab \leq \frac{\varepsilon}{2} a^2 + \frac{1}{2\varepsilon} b^2$:

$$\begin{aligned} \int_Q a(x) e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} g_{2l}(t, x) g_1(t, x) dQ = \\ \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_1^2 \right)_l dQ + \\ + \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_2^2 \right)_l dQ - \\ - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_1^2 dQ - \\ - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_2^2 dQ \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \int_Q b(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} g_{3l}(t, x) g_2(t, x) dQ = \\ \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_2^2 \right)_l dQ + \\ + \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3^2 \right)_l dQ - \\ - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_2^2 dQ - \\ - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3^2 dQ \end{aligned} \quad (2.12)$$

Згрупуємо (2.5) з 1 і 3 інтегралом з (2.10) і скористаємося формулою Остроградського:

$$\begin{aligned} - \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} a(x) g_1^2 \right)_l dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_A^2}{k_A} e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} a(x) g_1^2 dQ + \\ + \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} a(x) g_1^2 \right)_l dQ - \\ - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_1^2 dQ = \\ = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(a(x) g_1^2 \left(e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} - \frac{1}{2} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} \right) \right)_{l=0} d\Omega + \\ + \frac{1}{2} \int_Q a(x) g_1^2 \left(\frac{nC_A^2}{k_A} e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} - \frac{1}{2} \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} \right) dQ \end{aligned}$$

Аналогічно для (2.7) та 2 і 4 інтегралів з (2.11):

$$\begin{aligned} - \frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} c(x) g_3^2 \right)_l dQ + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} c(x) g_3^2 dQ - \\ - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3^2 dQ + \\ + \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3^2 \right)_l dQ = \\ = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(g_3^2 \left(c(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} - \frac{1}{2} b(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} \right) \right)_{l=0} d\Omega + \\ + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} g_3^2 \left(c(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} - \frac{1}{2} b(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} \right) dQ \end{aligned} \quad (2.13)$$

1 для (2.6) та 2 і 4 інтегралів з (2.10) та 1 і 3 з (2.11) маємо:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} \int_Q \left(e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} b(x) g_2^2 \right) dQ + \\
 & + \frac{1}{2} \int_Q \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} b(x) g_2^2 dQ + \\
 & + \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_2^2 \right) dQ - \\
 & - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} a(x) g_2^2 dQ + \\
 & + \frac{1}{4} \int_Q \left(e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3^2 \right) dQ - \\
 & - \frac{1}{4} \int_Q \frac{nC_C^2}{k_C} e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} b(x) g_3^2 dQ = (2.14) \\
 & = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(g_2^2 \left(b(x) e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} - \frac{1}{2} a(x) e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} - \frac{1}{2} b(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} \right) \right)_{t=0} d\Omega + \\
 & + \frac{1}{2} \int_Q \left(g_2^2 \left(b(x) \frac{nC_B^2}{k_B} e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} - \frac{1}{2} \frac{nC_B^2}{k_B} a(x) e^{\frac{nC_B^2}{k_B}} - \frac{1}{2} \frac{nC_C^2}{k_C} b(x) e^{\frac{nC_C^2}{k_C}} \right) \right) dQ
 \end{aligned}$$

З цих рівнянь випливає що при підборі відповідних коефіцієнтів $C_A, C_B, C_C, k_A, k_B, k_C$, та при виконанні нерівностей:

$$\begin{aligned}
 c(x) & \geq \frac{1}{2} b(x) \\
 b(x) & \geq a(x)
 \end{aligned}$$

Сума (2.12), (2.13), (2.14) буде більша за 0.
Таким чином:

$$\begin{aligned}
 & (Lu, g_1)_{L_2} \geq \\
 & \int_Q e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} \left(g_{1t}^2 + \sum_{i=1}^n \frac{nC_A^2}{2} g_{1x_i}^2 - \sum_{i=1}^n C_A |g_{1t}| |g_{1x_i}| \right) dQ = \\
 & = \sum_{i=1}^n \int_Q \frac{1}{n} e^{\frac{nC_A^2}{k_A}} \left[\left(\frac{\sqrt{3}}{2} |g_{1t}| - \frac{nC_A}{\sqrt{3}} |g_{1x_i}| \right)^2 + \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{4} g_{1t}^2 + \frac{n^2 C_A^2}{6} g_{1x_i}^2 \right] dQ \geq \\
 & \geq C \int_Q \left(g_{1t}^2 + \sum_{i=1}^n g_{1x_i}^2 \right) dQ
 \end{aligned}$$

де C — деяка додатня константа.

Аналогічно для другого і третього інтегралів

$$\text{Оскільки } 0 = (LU, G)_{L_2} \geq C \|G\|_{L_2(Q)}, \text{ то } \|G\|_{L_2(Q)} = 0$$

Тобто область значення оператора $L(\cdot)$ замкнена та щільна в $L_2(Q)$, з чого слідує, що область значення оператора $L(\cdot)$ співпадає з $L_2(Q)$ - $R(L) \subseteq L_2(Q)$. А значить існує єдиний розв'язок $U \in H$ операторного рівняння (10) в нормі простору $L_2(Q)$ для будь-якого елемента $f \in L_2(Q)$. Що і доводить нашу теорему.

Теорема 2. Для будь-якого елемента $g \in L_2(Q)$ існує єдиний розв'язок $V \in H$, операторного рівняння (2.2).

Доведення.

Аналогічне доведенню Теорема 1

Теорема 3. Для будь-якого елемента $f \in (H_*)^*$ існує єдиний слабкий розв'язок $U \in L_2(Q)$ задачі (2.1).

Доведення.

Розглянемо $F(v) = \langle F, V \rangle_*$. Очевидно, що:

$$|F(v)| \leq \|F\|_{(H_*)^*} \|V\|_{H_*}$$

З Лема 4:

$$\|V\|_{H_*} \leq C \|L^* V\|_{L_2}$$

де $L^* V \in L_2(Q)$, маємо:

$$|F(v)| \leq \bar{C} \|L^* V\|_{L_2(Q)}$$

В силу цієї нерівності та Теорема 2 $F(v)$ можемо розглядати як лінійний неперервний функціонал визначений на $L_2(Q)$. За теоремою Рісса про представлення лінійного неперервного функціонала в гільбертовому просторі, існує і єдиний елемент:

$$U \in L_2(Q): (U, L^*V)_{L_2(Q)} = (F, V)_+, \quad \forall V \in H_+$$

Що і доводить нашу теорему.

Теорема 4. Для будь-якого елемента $G \in (H)^*$ існує єдиний слабкий розв'язок $V \in L_2(Q)$ задачі (2.2).

Доведення.

Аналогічне доведенню Теорема 3

Висновок

В даній роботі було розглянуто відповідну фізичну постановку задачі і були використані апріорні нерівності, що були отримані автором в роботі [1] і наведені в даній статті без доведення. За допомогою даних нерівностей було доведено існування єдиного розв'язку задачі конвекції-дифузії суміші ізотопів в пористому середовищі із урахуванням філіації.

Список використаних джерел

1. Стещенко Г.М., Дослідження існування і єдності розв'язку для параболічних систем з сингулярними правими частинами // Вісник Київського університету .Серія: фіз.-мат. науки. – вип.. 1.-2010.-С. 144-151.
2. Choquet C. Radionuclide transport model with wells // Asymptotic Analysis. — 2004. — 37. — P. 57-78.
3. Choquet C. Existence result for a radionuclide transport model with unbounded viscosity // Journal of Mathematics and Fluid Mechanics. — 6. — P. 365–388.
4. Choquet C. , Zimmermann S. Study of a finite volume-finite element scheme for a nuclear transport model. Online. Available HTTP: <http://arxiv.org/abs/0704.1286> (accessed August 30, 2009).
5. Douglas, J, Jr., Spagnuolo A. The transport of nuclear contamination in fractured porous media // Journal of Korean Mathematical Society. — 38. —P. 723-761.
6. Марчук Г.И. Методы расщепления. — М.: Наука, 1988.
7. Ляшко С.И. Обобщенное управление линейными системами. — К. Наукова думка, 1998. — 472 с.

8. Ляшко С.І, Ключин Д.А. Семенов В.В., Шевченко К.В. Лагранжово-ейлеровий підхід до розв'язання оберненої задачі конвективної дифузії // Доповіді НАН України. — 2007. — № 10. — С. 38–43.
9. Ляшко С.И. Моделирование и оптимизация подземного массопереноса. — К.: Наукова думка, 1998. — 240 с.
10. Ключин Д.А., Кушан А.А., Ляшко С.И., Номировский Д.А., Петунин Ю.И., Обобщенное решение некоторых операторных уравнений в банаховых пространствах // Журнал обчислювальної та прикладної математики. – №1(81). – 1997.-С.93-99.
11. Ляшко С.І, Ключин Д.А. Семенов В.В., Шевченко К.В. Лагранжово-ейлеровий підхід до розв'язання оберненої задачі конвективної дифузії // Доповіді НАН України. — 2007. — № 10. — С. 38–43.

Надійшла до редколегії 29.04.2010

УДК 519.21

Шарапов М.М., к.ф.-м. н., доцент.

Рекурентний розв'язок задачі Еддінгтона

В статті розглядається новий підхід до розв'язку задачі Еддінгтона. Будується ймовірнісна рекурсія. Дається логічна інтерпретація алгоритму та отриманого результату.

Ключові слова: задача Еддінгтона, логіко-ймовірнісний підхід, рекурсія.

*E-mail: sharapov@unicyb.kiev.ua,

Статтю представив д. т. н., професор Гаращенко Ф.Г.

In this article we shall consider one well-known problem ([1], p. 121) that first was formulated the next way: "If A, B, C, D each speak the truth once in three times (independently), and A affirms that B denies that C declares that D is a liar, what is the probability that D was telling the truth?". This problem is very important for its different generalizations are applied in many spheres. One can find solutions of this problem ([2], [3], [4]) and its generalizations ([2]), though we are going to introduce, *first*, one more solution, *second*, one more way of the problem interpretation, *third*, solution for the new interpretation and at last we shall compare interpretations and corresponding solutions.

Eddington gave the solution as 25 / 71 and later he stated that ([5], p.118) "when I rashly gave my solution, I did not foresee a considerable increase in my correspondence". Chandrasekhar says that "Many, including Dingle, argued that the problem, as formulated, was ambiguous and that Eddington's

M.M. Sharapov*, Candd.Sci.(Phys.-Math.).

A recurrent solution to Eddington problem

Here we consider a new approach on Eddington problem. The probabilistic recursion is built. The logical interpretation of, first, algorithm and, second, main results is given.

Key Words: Eddington problem, logical-and-probabilistic approach, recursion.

solution was not, by any means, the most obvious one". Few years later mathematicians obtained another solution (see, e.g., [6], p. 407) using the alternative approach to understanding the problem. And the new answer was 13 / 41. We are going to demonstrate one more approach to understanding this problem. So, let's start in accordance to the mentioned plan.

First. Each speaks the truth with probability $p \in [0,1]$ ($p = 1/3$ in our problem) or lies with probability $q = 1 - p$. We shall code participants' statements by binary vectors. For example, if "A affirms (1) that B denies (0) that C declares (1) that D is a liar (0)" then we shall use vector (1, 0, 1, 0). Formula of total probability gives probabilities for any binary vector $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$:

$$P(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \begin{cases} pP(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + qP(1 - \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n \geq 1 \\ pP(1 - \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + qP(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n \geq 1 \\ p & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n = 0 \\ q & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n = 0 \end{cases}$$

It is easy to see that conditional probabilities $P(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n | D) = P_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ (under

condition "D is telling the truth") could be written in the same way:

$$P_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \begin{cases} pP_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + qP_D(1 - \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n \geq 1 \\ pP_D(1 - \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + qP_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n \geq 1 \\ 1 & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n = 0 \\ 0 & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n = 0 \end{cases}$$

Now it is really easy to show that

$$P(D|(1,0,1,0)) = \frac{P_D(1,0,1,0)P(D)}{P(1,0,1,0)} = \frac{\frac{13}{27} \cdot \frac{1}{3}}{41/81} = \frac{13}{41}.$$

Thomas L. Saaty ([6], p. 407, #69) says that 13/41 is also the probability that A, B and C each told truth. Well, we can easily show it too:

$$\begin{aligned} \text{a) } P(A|(1,0,1,0)) &= \frac{P((1,0,1,0)|A)P(A)}{P((1,0,1,0))} = \\ &= \frac{P((0,1,0))p}{P((1,0,1,0))} = \frac{(13/27) \cdot (1/3)}{41/81} = \frac{13}{41}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{b) } P(B|(1,0,1,0)) &= \frac{P((1,0,1,0)|B)P(B)}{P((1,0,1,0))} = \\ &= \frac{P((0,1,0))p}{P((1,0,1,0))} = \frac{(13/27) \cdot (1/3)}{41/81} = \frac{13}{41}. \end{aligned}$$

In the last statement one should understand the logic of equality

$$P((1,0,1,0)|B) = P((0,1,0)).$$

Really, if B tells the truth while A is blaming him as a liar then A is a liar. What does A lie about? A lies about B's (truthful) statement "C says that D is a liar" – in other word A lies (0) that C says (1) that D is a liar (0), so, $P((1,0,1,0)|B) = P((0,1,0))$.

And at last

$$\tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \begin{cases} p\tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + q[1 - \tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n > 1 \\ p[1 - \tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] + q\tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n > 1 \\ p^2 + q^2 & \text{if } \alpha_0 = \alpha_1 \text{ and } n = 1 \\ 2pq & \text{if } \alpha_0 \neq \alpha_1 \text{ and } n = 1 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} p\tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + q[1 - \tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n \geq 1 \\ p[1 - \tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] + q\tilde{P}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n \geq 1 \\ p & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n = 0 \\ q & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \text{c) } P(C|(1,0,1,0)) &= \frac{P((1,0,1,0)|C)P(C)}{P((1,0,1,0))} = \\ &= \frac{P((1,0,0))p}{P((1,0,1,0))} = \frac{(13/27) \cdot (1/3)}{41/81} = \frac{13}{41}, \end{aligned}$$

where

$$P((1,0,1,0)|C) = P((1,0,0))$$

has the same sense as the mentioned equality

$$P((1,0,1,0)|B) = P((0,1,0)).$$

In other words we used in these simple examples two very useful equalities

$$\begin{aligned} P(a_0, \dots, a_{i-1}, \text{truth}, a_{i+1}, \dots, a_n) &= \\ &= P(a_0, \dots, a_{i-1}, a_{i+1}, \dots, a_n) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} P(a_0, \dots, a_{i-1}, \text{false}, a_{i+1}, \dots, a_n) &= \\ &= P(a_0, \dots, a_{i-1}, 1 - a_{i+1}, \dots, 1 - a_n). \end{aligned}$$

Second. Whenever this problem was considered it always was assumed that its condition is equivalent to "A affirms that B says that C declares that D is telling the truth", in other words, if (1, 0, 1, 0) and A is a liar then (1, 1, 0). The question is: why (1, 1, 0)? Why, say, not (1, 1, 1) or, say, not (1, 0, 0)? Well, it is really good question! Why not. In terms of our approach it means the following recurrent probabilities for any binary vector $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$:

while conditional probabilities

$$\tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n | D) = \tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$$

(under condition "D is telling the truth") are

$$\tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \begin{cases} p\tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + q[1 - \tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n > 1 \\ p[1 - \tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] + q\tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n > 1 \\ p & \text{if } \alpha_0 = \alpha_1 \text{ and } n = 1 \\ q & \text{if } \alpha_0 \neq \alpha_1 \text{ and } n = 1 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} p\tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + q[1 - \tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n \geq 1 \\ p[1 - \tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)] + q\tilde{P}_D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n \geq 1 \\ 1 & \text{if } \alpha_0 = 1 \text{ and } n = 0 \\ 0 & \text{if } \alpha_0 = 0 \text{ and } n = 0 \end{cases}$$

Third. The solution of the problem new interpretation is obvious:

$$\tilde{P}(1, 0, 1, 0 | D) = \frac{\tilde{P}_D(1, 0, 1, 0) \tilde{P}(D)}{\tilde{P}(1, 0, 1, 0)} = \frac{\frac{13}{27} \cdot \frac{1}{3}}{\frac{41}{81}} = \frac{13}{41}.$$

So, the answers are equal in terms of two different approaches. Let's try to explain it. The fact is that every participant has only two ways of information transmission, so these two ways are "to agree or disagree to a previous teller" that is "to tell lies or to tell the truth" that is "to agree or disagree to (say) the first teller". In other words "not to say something" is nothing else but "to deny something". So, $P(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ and $P_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ for any $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$.

Let's now introduce four simple lemmas.

Lemma 1. For $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n), (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n)$,

$\alpha_i, \beta_i \in \{0, 1\}, \sum_{i=0}^n \alpha_i = \sum_{i=0}^n \beta_i$ we have

$$\tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n)$$

and

$$\tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}_D(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n).$$

Lemma 2. For $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n), \alpha_i \in \{0, 1\}$ we have

$$\tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}(0, 1, \dots, 1)$$

or

$$\tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}(1, 1, \dots, 1)$$

and

$$\tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}_D(0, 1, \dots, 1)$$

or

$$\tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \tilde{P}_D(1, 1, \dots, 1).$$

Lemma 3. For $V_n = \tilde{P}(1, 1, \dots, 1)$ we have

$$V_1 = p \text{ and } V_n = pV_{n-1} + q(1 - V_{n-1})$$

that is

$$V_n = \frac{1 + (p - q)^n}{2}.$$

Obviously,

$$\tilde{P}(0, 1, \dots, 1) = 1 - V_n.$$

Really, due to lemma 3 we have

$$\begin{aligned} \tilde{P}(0, 1, \dots, 1) &= p[1 - \tilde{P}(1, \dots, 1)] + q\tilde{P}(1, \dots, 1) = \\ &= p(1 - V_{n-1}) + qV_{n-1} = p + V_{n-1}(q - p) = \\ &= p + \frac{1 + (p - q)^{n-1}}{2}(q - p) = \frac{1 - (p - q)^n}{2} = 1 - V_n. \end{aligned}$$

Lemma 4. For $W_n = \tilde{P}_D(1, 1, \dots, 1)$ we have

$$W_1 = 1 \text{ and } W_n = pW_{n-1} + q(1 - W_{n-1})$$

that is

$$W_n = \frac{1 + (p - q)^{n-1}}{2} = V_{n-1}.$$

These lemmas give an obvious way to find $\tilde{P}(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ and $\tilde{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ for any $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Say, our problem now can be solved the next way:

$$\begin{aligned}\bar{P}(1,0,1,0|D) &= \frac{\bar{P}_D(1,0,1,0)\bar{P}(D)}{\bar{P}(1,0,1,0)} = \frac{\bar{P}_D(1,1,1,1)p}{\bar{P}(1,1,1,1)} = \\ &= \frac{W_4p}{V_4} = \frac{V_3p}{V_4} = \frac{(1+(p-q)^3)p}{1+(p-q)^4} = \frac{13}{41}.\end{aligned}$$

It is easy to see that $\bar{P}(\alpha_1, \dots, \alpha_n | D)$ can take only two different values:

$$\bar{P}(\alpha_1, \dots, \alpha_n | D) = \begin{cases} \frac{V_{n-1}p}{V_n} & \left[\frac{(1+(p-q)^{n-1})p}{1+(p-q)^n} \right] \\ \frac{(1-V_{n-1})p}{1-V_n} & \left[\frac{(1-(p-q)^{n-1})p}{1-(p-q)^n} \right] \end{cases}$$

according to lemmas 2 and 4.

It is interesting to mark that [2] contains only one of these two variants (taking into account that n, α_1, p_1 in [2] are nothing else but $n+1, p, p$ in our terms). The explanation can be found at [2] (page 39, footnote 1): author assumes that A affirms to D, that is in our terms (see lemma 2) it means $\bar{P}_D(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \bar{P}_D(1, 1, \dots, 1)$. So, our statements give a sweeping generalization of Yaglom's result.

In conclusion we'll point to some notes for this problem. Let consider four states:

$S_1 = \{\text{the current teller affirms to a previous one while telling the truth}\},$

$S_2 = \{\text{the current teller affirms to a previous one while telling lies}\},$

$S_3 = \{\text{the current teller denies a previous one while telling the truth}\},$

$S_4 = \{\text{the current teller denies a previous one while telling lies}\}.$

So we consider the Markov chain with matrix

$$P = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & q \\ 0 & q & p & 0 \\ p & 0 & 0 & q \\ 0 & q & p & 0 \end{pmatrix}$$

and vector of initial probabilities $r = (p, q, 0, 0)$. It is easy to show that for any step $n \geq 1$ of the chain $\{\xi_n | n \geq 1\}$ we have the same probabilities

$$(p^2, q^2, qp, qp)$$

of the states. It means that, first, each teller (in accordance with terms) is telling the truth with probability $p^2 + qp = p(p+q) = p$ (and is telling lies with probability q), second, each teller affirms to a previous one with probability $p^2 + q^2$ (and denies a previous one with probability $2qp$).

References

1. A.S. Addington, *New pathways in Science*, Cambridge, 1935, p.121.
2. Яглом А.М., Яглом И.М., *Неэлементарные задачи в элементарном изложении*, М. 1954, стр. 39, 239-244.
3. J. W. Campbell, Bart Park, G. N. Garrison and Theodore Hailperin, *The four liars*, *The American Mathematical Monthly*, Vol. 57, No. 1 (Jan., 1950), pp. 43-45.
4. *The Otto Dunkel Memorial Problem Book*, New York, 1957, pp. 76, 399.
5. S. Chandrasekhar, *Truth and Beauty: Aesthetics and Motivations in Science*, The University of Chicago, 1987.
6. Saaty, Thomas L. *Mathematical methods of operations research*, New York, McGraw-Hill, 1959.
7. Subrahmanyan Chandrasekhar, *Eddington: the most distinguished astrophysicist of his time*, Cambridge University, 1983.

Надійшла до редколегії 26.02.2010

УДК 519.71

В.В. Ямборак

Типова структура довгострокової пам'яті

Введені основні поняття моделі сенсоріуму, що базуються на біологічних даних. Описані два типи основних задач мислення – задачі на розпізнавання та задачі на навчання.

Ключові слова: синапс, нейрон, сенсоріум, модель, синаптичний рівень.

E-mail: Vitaly.Yamborak@gmail.com

V.V. Yamborak

The typical structure of long term memory

In the article defined main conceptions of the sensorium's model, which are based on biological data. Described two main types of the thinking problems – identification problem and learning problem.

Key Words: synapse, neuron, sensorium, model, synaptic layer.

Статтю представив: доктор фіз.-мат. наук проф. Хусаїнов Д.Я.

Найбільш великими структурними одиницями головного мозку, для яких існують досить точні математичні моделі, є нейрони, синапси, біомембрани.

Під нейронною моделлю сенсоріуму будемо розуміти модель, складену з нейронів і синапсів. Синапс – контакт двох нейронів. У нашому викладі нейрони і синапси будуть вважатися атомарними, більш детальне моделювання цих елементів досить добре вивчено [1-3].

Нейрон пов'язаний з іншими нейронами через синапси. Синапси і нейрони з'єднані пре- і постсинаптичними мембранами. Якщо напрямок передачі сигналу є напрямком від нейрона до синапсу, то мембрана називається пресинаптичною, якщо напрямок зворотній, то мембрана називається постсинаптичною [4].

Нейрон

Розглянемо детальніше структуру нейрона та його основні властивості. У нашому випадку будемо розглядати простий нейрон, тобто нейрон, що має сому, багато дендритів та один аксон. Дендрити і сома містять частини постсинаптичних мембран. Кінець аксона розгалужується на безліч коллатералей. На терміналях яких знаходяться пресинаптичні мембрани.

Синапси бувають двох видів – електричні та хімічні. Електричні синапси характеризуються часом проходження сигналів. Потенціал передається без змін. Хімічні синапси характеризуються часом проведення сигналу, середньою кількістю квантів нейромедіатора m , зміною різниці потенціалів на постсинаптичній мембрані від одного кванта нейромедіатора. Число випадків, у яких звільняється x порцій

нейромедіатора можна виразити законом Пуассона [2, с. 209]:

$$P_x = \frac{m^x}{x!} \exp(-m), \quad (1)$$

Нехай у простого нейрона N_s синапсів. Будемо задавати відстані від синапсів до аксонного горбка [4] s_i ($i = \overline{1; N_s}$), довжину аксона l та швидкість проведення потенціалу дії v . А також необхідно задати кількість коллатералей на аксоні N_k та їхні довжини k_j ($j = \overline{1; N_k}$). Також будемо задавати коефіцієнт d нейрона – мінімально можливий час між виникненням двох потенціалів дії в аксонному горбку, так званий рефракторний період.

Однієї з найбільш простих моделей, що описують умову появи потенціалу дії можна вважати наступному. Нехай U_{cr} – критичний рівень деполяризації і K_p – деяка характеристика нейрона. Будемо підраховувати різницю потенціалів мембрани аксонного горбка по наступній формулі:

$$U = \sum_{i=1}^{N_s} st_i \cdot \exp(-K_p(t-t_i)k_i), \quad (2)$$

де t – поточний час, t_i – час виникнення останнього сигналу на постсинаптичній мембрані i -ого синапсу. Відзначимо, що попередніми сигналами можна знехтувати, оскільки їхній внесок дуже маленький. $st_i = 1$, якщо синапс збудливий та -1 , якщо гальмівний [2, с. 190]. При $U > U_{cr}$ виникає потенціал дії.

Неформально під сигналом будемо розуміти деяку особливу подію, що виникла в нейронній

мережі і несе, як наслідок, певні зміни в стани навколишніх елементів. Для синапсу сигналом є досягнення потенціалу дії пресинаптичної мембрани, для нейрона – досягнення потенціалу дії постсинаптичної мембрани деякого синапсу та виникнення потенціалу дії. Таким чином поняття сигналу в нашому розумінні має важливе значення, оскільки результатом роботи мережі буде той чи інший її стан. Для моделювання самого ж потенціалу дії можна використати, наприклад, модель Ходжкіна-Хакслі [2, 3].

Сенсорне середовище, що моделюється мозком

Найбільш загальноприйнято вважати, що в мозку існує модель зовнішнього світу (енграма), природа якої залишається поки неясною, причому інформація про сенсорне середовище надходить у мозок у кодованому вигляді за посередництвом сенсорних систем, мозковий же код залишається поки нез'ясованим.

Існує також інша позиція, для якої моделює сенсорного середовища є самі сенсорні системи з їхнім надмодальним рівнем (в сукупності – нейронна модель), кодами яких є основні одиниці нервової системи – нейрони. Знайоме середовище – це змодельоване середовище, те середовище, в якому відбувалося формування мозку в онтогенезі, а також формування дорослого мозку при навчанні. Інша частина адекватного середовища – нове середовище, що може бути відображене і потім змодельоване мозком. Неадекватне середовище, навпаки, для мозку ніби не існує [5].

Будемо дотримуватися позиції, що сенсорна частина мозку є нейронною моделлю знайомого середовища. Нейронна модель є, таким чином, довгостроковою пам'яттю про це середовище. Нові об'єкти роблять своїми впливами відповідні зміни в нейронній моделі, які фіксуються механізмами короточасної пам'яті, потім моделюються в довгостроковій пам'яті. Цю нейронну модель складають основні нейрони сенсорних систем та їхніх надмодальних рівнів – у сукупності "сенсоріум" [5].

Синаптичні рівні

Модель сенсорного середовища складається із синаптичних рівнів (СР). На кожному синаптичному рівні перебувають символні і квазісимвольні нейрони (СН і КСН). Основна відмінність цих двох типів нейронів полягає в тому, які функції вони виконують, хоча по своїй структурі вони однакові. Символьні нейрони відповідають деякому об'єкту як єдиному цілому. Ті квазісимвольні нейрони, які зв'язані

позитивними зворотними зв'язками з деяким символним нейроном, представляють окремі властивості об'єкта, якому відповідає відповідний символний нейрон. Чим вищий рівень на якому перебувають зазначені нейрони, тим більш складний об'єкт і більш складні його властивості вони представляють [6].

Із цього правила є тільки виключенням СР-0 – рівень рецепторних нейронів, у тому розумінні, що на ньому немає квазісимвольних нейронів, а самі рецепторні нейрони відповідають елементарним неподільним об'єктам – властивостям більш складних об'єктів, вони виступають у ролі символних нейронів.

Розглянемо i -ий синаптичний рівень. Кожному символному нейронові відповідає символна група. Визначимо символну групу деякого символного нейрона i -го синаптичного рівня. Вона складається із квазісимвольних нейронів, синапсів, вставних нейронів і т.д. які належать i -му синаптичному рівню та опосередковують зв'язку між символним нейроном і відповідними йому квазісимвольними нейронами. Слід зазначити, що зв'язки символного нейрона з іншими символними нейронами цього ж синаптичного рівня сюди не входять. На Рис. 1 зазначений найпростіший варіант організації символної групи.

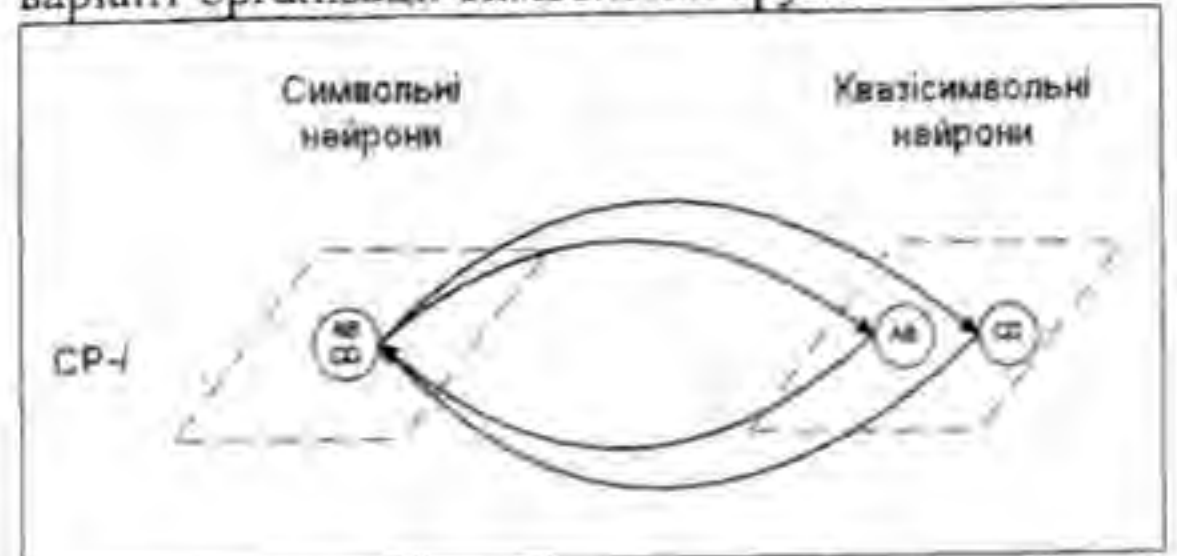


Рис. 1 Символьна група. Найпростіший випадок

Типова структура

Нейрони в моделі організовані в типові структури (ТС), що визначаються символними нейронами. Типова структура, що визначена деяким символним нейроном СР- i , складається із самого символного нейрона N , квазісимвольних нейронів K , на СР- i , які мають позитивні двосторонні зв'язки із символним нейроном N , символних нейронів СР- $i-1$ S_{i-1} , аксони яких конвергують у символний нейрон, що визначає типову структуру. Також до типової структури відносяться всі синапси та вставні нейрони, які опосередковують зв'язку між N і K , N і S_{i-1} , K і S_{i-1} . На Рис. 2 зображена найпростіша типова структура.

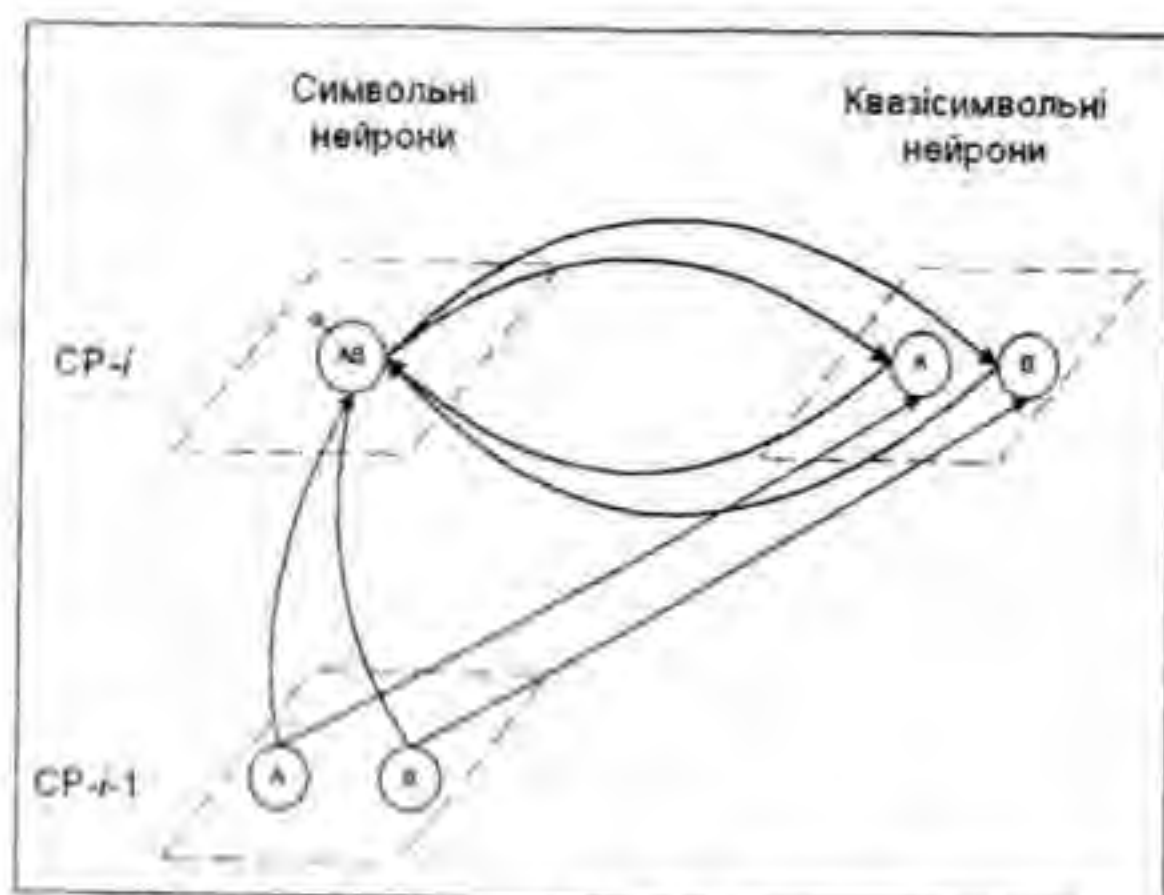


Рис. 2 Типова структура. Кругами позначені нейрони, стрілками – синапси

Така організація типової структури дозволяє вирішити проблему подання інформації про середовище одночасно як у згорнутому виді, так і у деталях, причому символні нейрони відповідають або складним об'єктам, або класам об'єктів (залежно від організації їхніх входів – по типу кон'юнкції або диз'юнкції відповідно); квазісимвольні нейрони відповідають окремим компонентам (властивостям) складних об'єктів. У функціональному плані, позитивний взаємозв'язок символних і квазісимвольних нейронів забезпечує стійке виділення активності цих вибірково активованих нейронів з «шуму», а також короточасне запам'ятовування (циркуляція активності) і квантування нейронної активності шляхом її ритмізації [5].

У сенсоріумі ж складний знайомий потенційний об'єкт представлений як єдине ціле символним нейроном на самому верхньому синаптичному рівні, тут же представлені різномодальні ключові властивості цього об'єкта. На більш низьких рівнях представлені його комплексні підвластивості і властивості цих підвластивостей. Самі елементарні нерозкладні властивості представлені в найперших типових структурах сенсорних систем сенсоріуму [6].

Характеристики, специфічні тільки для актуального об'єкта (сила, тривалість, значимість), представлені функціональними параметрами нейронів (сила та тривалість збудження), пам'ять про них зберігається на деякий час у вигляді зміненої збудливості та зміненої провідності, іншими словами – у змінній фазі синапсів. Це є характеристика короткострокової пам'яті [6].

Пред'явлення незнайомого об'єкта активує нейрони низьких синаптичних рівнів, і тільки ті з них, які відповідають знайомим властивостям і підвластивостям цього незнайомого об'єкта. Вони запам'ятовуються на деякий час у

короткостроковій пам'яті вище описаним способом. Як можна бачити, запам'ятовування у короткостроковій пам'яті не супроводжується утворенням нових зв'язків. Запам'ятовування ж у довгостроковій пам'яті є постановка у відповідність новому об'єкту (як цілому) нового символного нейрона та формування його ТС-зв'язків. Взаємні позитивні зв'язки всередині ТС (між символними і квазісимвольними нейронами) забезпечують ритмізацію активності, її квантування, посилення і контрастування. Останнє забезпечується латеральним гальмуванням, характерним для біологічних нейромереж. Ритмічний процес в окремій ТС розвивається, триває деякий час і згасає. Згасання відбувається за рахунок зворотного гальмування, що накопичується. Низхідні зв'язки в елементарному сенсоріумі забезпечують синхронізацію ритмічної активності відповідних ТС. Активність верхньої ТС грає в цьому провідну роль [6].

Структура символного нейрона

Зв'язки символного нейрона фактично реалізують семантичний трикутник Фреге, що відображає структуру слова: сам символний нейрон виступає в ролі імені, його проекції на квазісимвольні нейрони – у ролі денотата, гілочка асоціативних зв'язків (вона схематично зображена на Рис.2 у вигляді невеликого відгалуження від нейрона) із символними нейронами інших ТС – у ролі сигніфіката. Активування асоціативного зв'язку дозволяє представляти актуальний об'єкт в зв'язку його з потенційними об'єктами. Останнє відповідає таким традиційним поняттям як контекст, зміст, семантична інформація [5].

Символьні нейрони представляють тільки знайомі об'єкти адекватного середовища, тобто лише обмежене число з величезної кількості можливих сполучень і комбінацій із квазісимвольних нейронів, що представляють елементарні об'єкти. Таким чином, "побаченням" може бути кожне із цих сполучень (комбінацій) – будь-який новий об'єкт адекватного середовища, складений, як у калейдоскопі, з більш простих знайомих об'єктів. Розпізнаними ж можуть бути тільки знайомі об'єкти. Об'єкт "стає знайомим" тільки після повного формування відповідної ТС [5].

Основні типи задач мислення

Розглянемо механізми утворення нової ТС і порядок збудження нейронів при вирішенні задачі на розпізнавання, що разом із задачею на

навчання, являють основною складовою мислення.

Під задачею ми розуміємо складний об'єкт (ситуацію, картину, явище) сенсорного середовища, що подається на вхід елементарному сенсоріуму для розпізнавання; під розв'язком задачі на розпізнавання – ідентифікація (впізнання) цього об'єкта. Вважаємо також, що будь-яке пред'явлення (актуалізація) середовища є "пред'явлення з метою розпізнавання" – оскільки розпізнавання є основною функцією всіх сенсорних систем. Ініціює процес розпізнавання вплив адекватного стимулу на рецептори, далі хід процесу визначається архітектурою мережі, зв'язками нейронів, їхніми поточними станами збудливості. Пропонований незнайомий (новий) об'єкт не може бути розпізнаний в принципі, тому що він не представлений у сенсоріумі. Розпізнавання такого об'єкта в сенсоріумі можливо тільки після формування його нейронної моделі [6].

"Задачі" і "розв'язки задач" варто розбити на два класи. 1-й – задачі, для розв'язку яких досить механізмів розпізнавання. Це клас "задач на розпізнавання". 2-й клас – задачі, для розв'язку яких, крім механізмів розпізнавання, необхідні механізми, що реалізують формування нових "понять". Це клас "задач на навчання" [6].

Розв'язку задач на розпізнавання відповідає кінцева ситуація (стан впізнання). Вона являє собою стійкий на деякий час особливий динамічний стан активності нейронів, що відповідають тільки об'єкту задачі. Ці активовані нейрони представляють одночасно і об'єкт задачі як ціле і його основні властивості. Особливість динамічного стану полягає в тому, що активність цих нейронів є посиленою і ритмічною, а їхні ритми синхронізованими. У період, коли має місце кінцева ситуація, активність охоплених ритмікою нейронів домінує над активністю інших нейронів елементарного сенсоріуму.

У випадку задачі на навчання кінцева ситуація не може бути досягнута за допомогою тільки механізмів розпізнавання в принципі – відсутність завершальної ТС та інших ТС, які потенційно представляли б об'єкт (і його властивості) задачі, не дозволяє досягнути стану розпізнавання. Для розв'язку такої задачі необхідно доповнити вихідну модель відсутніми ТС. Це можна здійснити тільки шляхом формування нових ТС. Ініціює процес формування нової ТС на першому синаптичному рівні вплив нового стимулу на рецептори (сенсорне навчання). Щоб ініціювати формування ТС на високому рівні необхідно

активувати символічні нейрони попереднього рівня.

Висновки

В даній роботі введені основні поняття моделі сенсоріуму, що базуються на біологічних даних. Зазначені формальні поняття використані в комп'ютерній реалізації моделі, що надає великі можливості при використанні імітаційного моделювання для вирішення основних задач – сенсорного розпізнавання та навчання, що є невід'ємними складовими мислення.

Таким чином модель сенсоріуму можна розкласти на безліч, визначених вище, груп, а кожна із груп може бути представлена як взаємодія між собою нейронів та синапсів. Слід зазначити, що нейрони і синапси хоча і визначені, проте необхідне їхнє подальше уточнення, щоб формально певні поняття нейрона і синапсу були більш адекватні їхнім біологічним аналогам з однієї сторони та досить прості, що дозволяло б організувати більш детальне комп'ютерне моделювання.

Список використаних джерел

1. Воронков Г.С., Изотов В.А. Компьютерное моделирование механизмов обработки информации в обонятельной системе. I. Модель структурно-функциональной организации нейронных элементов обонятельной луковицы и рецепторного эпителия. // Биофизика. 2001, том 46, вып.4, С.696-703.
2. Волькенштейн М.В. Общая биофизика. – М. Наука, 1978.
3. Ходжкин А. Нервный импульс. – М. Мир, 1965.
4. Физиология человека: в 3-х томах. Т.1. Пер. с англ./Под Ф50 ред. Р.Шмидта и Г.Тевса. – М. Мир, 1996.-323с.,ил.
5. Воронков Г.С. Информация и мозг: взгляд нейрофизиолога // Нейрокомпьютеры: разработка и применение, – 2002, – № 1-2, – С. 79-88.
6. Воронков Г.С. Механизмы решения задач в элементарном сенсоріумі: нейронные механизмы опознания и сенсорного обучения. // Нейрокомпьютеры: разработка, применение, – 2004, – №2-3, – С. 92-100.

Надійшла до редакції 20.04.2010

РАДІОФІЗИКА

УДК 535.016

Голобородько Н.С., інженер I категорії,
Голобородько А.О., к.ф.-м.н., асистент,
Кузьменко К.М., студент

Фазові зміни оптичної хвилі при відбиванні від локальних неоднорідностей поверхні

У роботі теоретично розглянуто перетворення хвильового фронту сфокусованого оптичного випромінювання, відбитого локальною сферичною неоднорідністю поверхні. Проведено числове моделювання розсіювання когерентного випромінювання на рельєфних неоднорідностях поверхні. Запропоновано використовувати дисперсію фази хвильового фронту як інтегральний параметр для визначення ефективного радіусу окремого дефекту.

Ключові слова: дефект поверхні, дисперсія фази, хвильовий фронт.

E-mail: sunata@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Данілов В.В.

Вступ

З розвитком мікро- та наноелектроніки проблема безконтактної діагностики поверхні та виявлення дефектів стала досить актуальною. Оптичні методи діагностики поверхні обмежені довжиною хвилі скануючого випромінювання, але це не означає, що вони взагалі не можуть бути застосовані для таких цілей [3]. Найбільш відомий серед них є інтерферометричний метод. До недоліків цього методу слід віднести громіздку процедуру розшифровки інтерферограм [1]. Одним з методів розв'язку такої проблеми є прямий вимір хвильового фронту за допомогою сенсорів, що застосовуються в адаптивній оптиці. Дана методика використовується і при тестуванні лінз і дзеркал, у задачах неруйнівного контролю, в офтальмології. Оскільки при цьому безпосередньо визначається фазова інформація, можна чекати підвищення чутливості методу у порівнянні з вимірюваннями спектрів інтенсивності [4]. Тому метою даної роботи було дослідження можливості визначення топології поверхні за даними вимірів форми хвильового фронту. Для вирішення цієї проблеми пропонується скористатися сфокусованим лазерним пучком, що після відбиття від поверхні

Goloborodko N.S., 1 category engineer,
Goloborodko A.O., Ph. D., assistant,
Kuzmenko K.M., student

Phase changes of the optical wave scattered by the surface local inhomogeneities

The transformation of focused optical illumination wave front reflected from the spherical local inhomogeneity of the surface is theoretically considered in the current paper. The numerical simulation of coherent illumination scattering from the relief inhomogeneities of the surface is carried out. It is proposed to use the wavefront phase dispersion as the integrated parameter for determination of the effective radius of separate defect.

Key Words: surface defect, phase dispersion, wavefront.

проходить ту саму оптичну систему і потрапляє на сенсор [6]. У такому випадку сигнал, що потрапляє на сенсор може розглядатися як фазовий портрет дефекту, і просторова роздільна здатність методу буде залежати лише від апертури сенсора.

1. Теоретичні розрахунки

На рис. 1 зображено процес формування відбитого від неоднорідності поля. Скануючий пучок, який формується за допомогою лінзи, відбивається від досліджуваної поверхні, і, проходячи той самий шлях назад, виходить з даної оптичної системи.

Математично амплітудний розподіл зондуємого пучка можна представити наступним чином [2]:

$$E_1(\rho, \varphi_\rho) = \iint E_0(r, \varphi_r) \frac{e^{ikf}}{j\lambda f} r dr d\varphi_r, \quad (1)$$

де k – хвильовий вектор падаючої хвилі, $E_0(r, \varphi_r)$ – комплексний розподіл амплітуди в площині формуючої лінзи, r – радіус вектор від лінзи до площини зондування, f – фокусна відстань, λ – довжина хвилі зондуємого випромінювання.

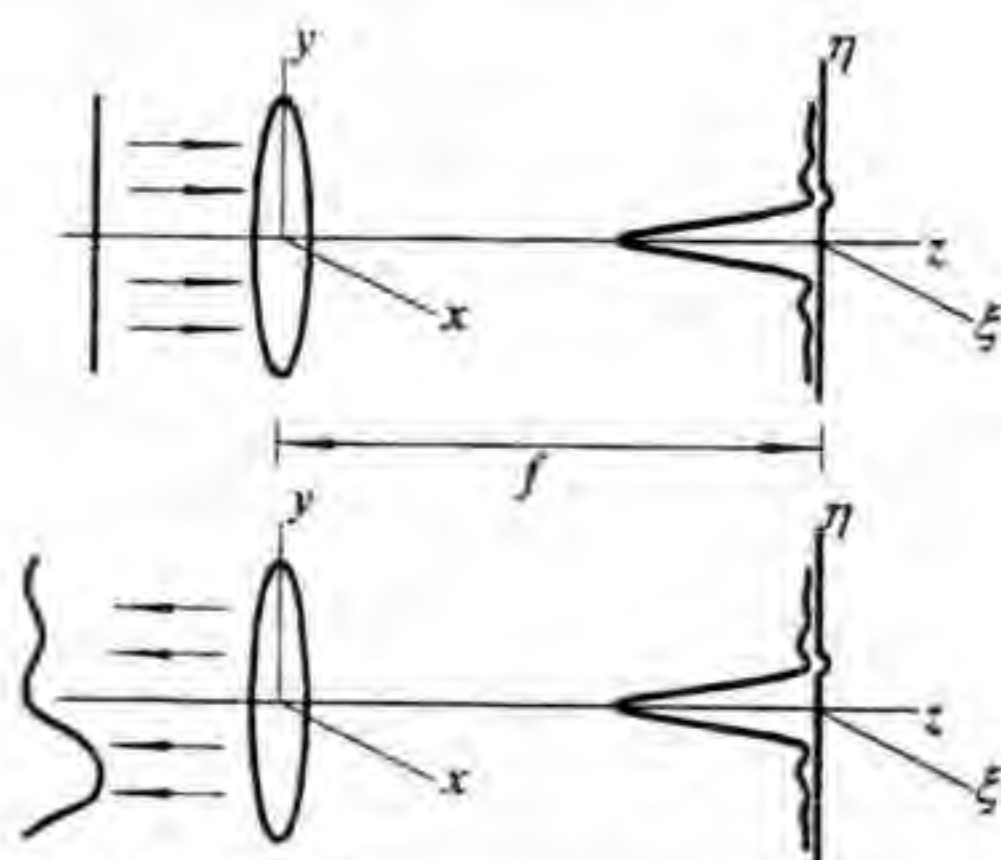


Рис.1 Процес формування вторинного поля.
 $\rho = \{\xi, \eta\}$ – координати у площині зондування;
 $r = \{x, y\}$ – координати на входній апертурі; f – фокусна відстань формуючої лінзи.

Вхідний хвильовий фронт будемо вважати плоским, $E_0(r, \varphi_r) = E_0 \sin(a)$, (таке припущення відповідає практиці метрологічних вимірювань), при цьому розподіл у площині зондування може бути записаний наступним чином:

$$E_1(\rho, \varphi) = E_0 \exp(jkf) \times \exp\left(j \frac{k\rho^2}{2f}\right) \frac{kl^2}{j8f} \left[2 \frac{J_2(kl\rho/2f)}{kl\rho/2f} \right], \quad (2)$$

Зрозуміло, що при відбиванні хвилі від плоскої поверхні розподіл у вихідній хвилі буде відповідати амплітудному розподілу вхідної хвилі внаслідок еквівалентного прямого і зворотного розповсюдження хвилі. У випадку, коли у площині зондування буде міститись неоднорідність, то при відбиванні потрібно враховувати фазові набіги хвилі від такої неоднорідності. Для сферичного дефекту цей фазовий набіг можна записати наступним чином:

$$\theta(\rho, \varphi) = \frac{k}{2R} \rho^2, \quad (3)$$

А коефіцієнт відбивання матиме вигляд:

$$\mathcal{R}(\rho, \varphi_r) = r(\rho, \varphi_r) \mathcal{R}_0(\rho, \varphi_r), \quad (4)$$

де $r(\rho, \varphi_r)$ – коефіцієнт відбивання від поверхні.

Потрібно відзначити, що в загальному вигляді цей коефіцієнт відбивання буде залежати від показника заломлення відбиваючої поверхні та від кута між нормаллю до поверхні та напрямком розповсюдження, але у випадку невеликих неоднорідностей такою залежністю можна знехтувати. З урахуванням вищесказаного повний коефіцієнт відбивання буде визначатись наступним чином [5]:

$$\mathcal{R}(\rho, \varphi) \approx \mathcal{R}_0 \begin{cases} e^{-j \frac{k}{R} \rho^2}, & \rho^2 \leq 2Rh - h^2; \\ 1, & \rho^2 > 2Rh - h^2. \end{cases} \quad (5)$$

де h – характерний розмір неоднорідності у напрямку поширення хвилі, $\mathcal{R}_0$ – ефективний коефіцієнт відбивання. Таким чином вторинне зображення $E_2(r, \varphi)$ (з урахуванням інверсії неоднорідності при відбиванні) може бути записане:

$$E_2(r, \varphi_r) = \iint E_1(\rho, \varphi_r) \mathcal{R}(-\rho, \varphi_r) \frac{e^{jkf}}{j\lambda f} \rho d\rho d\varphi_r, \quad (6)$$

Для спрощення розрахунків неоднорідність вважається сферичною та розташованою у центрі сфокусованої плями. При цьому коефіцієнт відбивання вважається постійним по площині зондування. Таким чином при врахуванні лише фазових набігів відбитої хвилі вираз (6) переписеться у вигляді:

$$E_2(r, \varphi_r) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\eta} \frac{E_1(-\rho, \varphi_r) \mathcal{R}_0}{j\lambda f} e^{-j \frac{2\pi}{\lambda R} \rho^2} \rho \times \times e^{j \frac{2\pi}{\lambda} \left(f + \frac{1}{2f} (r^2 + \rho^2 - 2r\rho) \right)} d\rho d\varphi_r + \int_{\eta}^{\infty} \frac{E_1(-\rho, \varphi_r)}{j\lambda f} \times \times e^{j \frac{2\pi}{\lambda} \left(f + \frac{1}{2f} (r^2 + \rho^2 - 2r\rho) \right)} \rho d\rho d\varphi_r = \quad (7)$$

$$= E_2^1(r, \varphi_r) + E_2^2(r, \varphi_r)$$

де r_1 – ефективний радіус неоднорідності ($r_1 = \sqrt{2Rh - h^2}$). Видно, що хвиля на виході формуючої лінзи буде сумою двох парціальних компонент: $E_2^1(r, \varphi_r)$ – парціальна хвиля, відбита від неоднорідності; $E_2^2(r, \varphi_r)$ – парціальна хвиля, відбита від бездефектної області поверхні. Потрібно відмітити, що у випадку $R/r_1 > \|n\|$ (n – показник заломлення відбиваючої поверхні) достатньо враховувати лише фазові набіги. З іншої сторони врахування впливу локальних змін коефіцієнта відбиття дозволив би не тільки уточнити результат, але і дещо розширити рамки його застосування.

Таким чином зрозуміло, що зміна форми хвильового фронту пов'язана з наявністю неоднорідності, але при скануванні поверхні доцільно використовувати деякий інтегральний параметр, що міг би характеризувати поверхню. В якості такого параметру можна використати дисперсію фази хвильового фронту:

$$\Delta\theta = \left(\left\langle \arctg^2 \frac{\operatorname{Re} E_2}{\operatorname{Im} E_2} \right\rangle - \left\langle \arctg \frac{\operatorname{Re} E_2}{\operatorname{Im} E_2} \right\rangle^2 \right), \quad (8)$$

де усереднення ведеться по апертурі вимірювання. Таким чином використовуючи рівняння (6) та (7) можна визначити амплітудний розподіл у площині спостереження та центр неоднорідності, потім можна розв'язати обернену задачу знаходження форми поверхні за даними таких вимірів.

2. Результати і обговорення

Розглядаючи відбивання світла від точкової неоднорідності потрібно пам'ятати, що відбита компонента вже буде сумою двох хвиль, а, отже, у амплітудному розподілі доцільно очікувати появи деякої інтерференційної картини. У випадку, коли у сфокусовану пляму потрапляє не одна, а декілька неоднорідностей інтерференційна картина буде ускладнюватись у зв'язку зі збільшенням кількості парціальних компонент поля. Таке збільшення парціальних компонент може призвести до виникнення фазового спеклу поряд з амплітудним. Для моделювання процесів взаємодії когерентного випромінювання з локальними неоднорідностями поверхні були вибрані наступні фіксовані параметри: довжина хвилі: $\lambda=633$ нм; фокусна відстань: $f=22.1$ мм.

На рис. 2 зображений амплітудний та фазовий розподіли вихідної хвилі, відбитої від поверхні з локальною сферичною неоднорідністю.

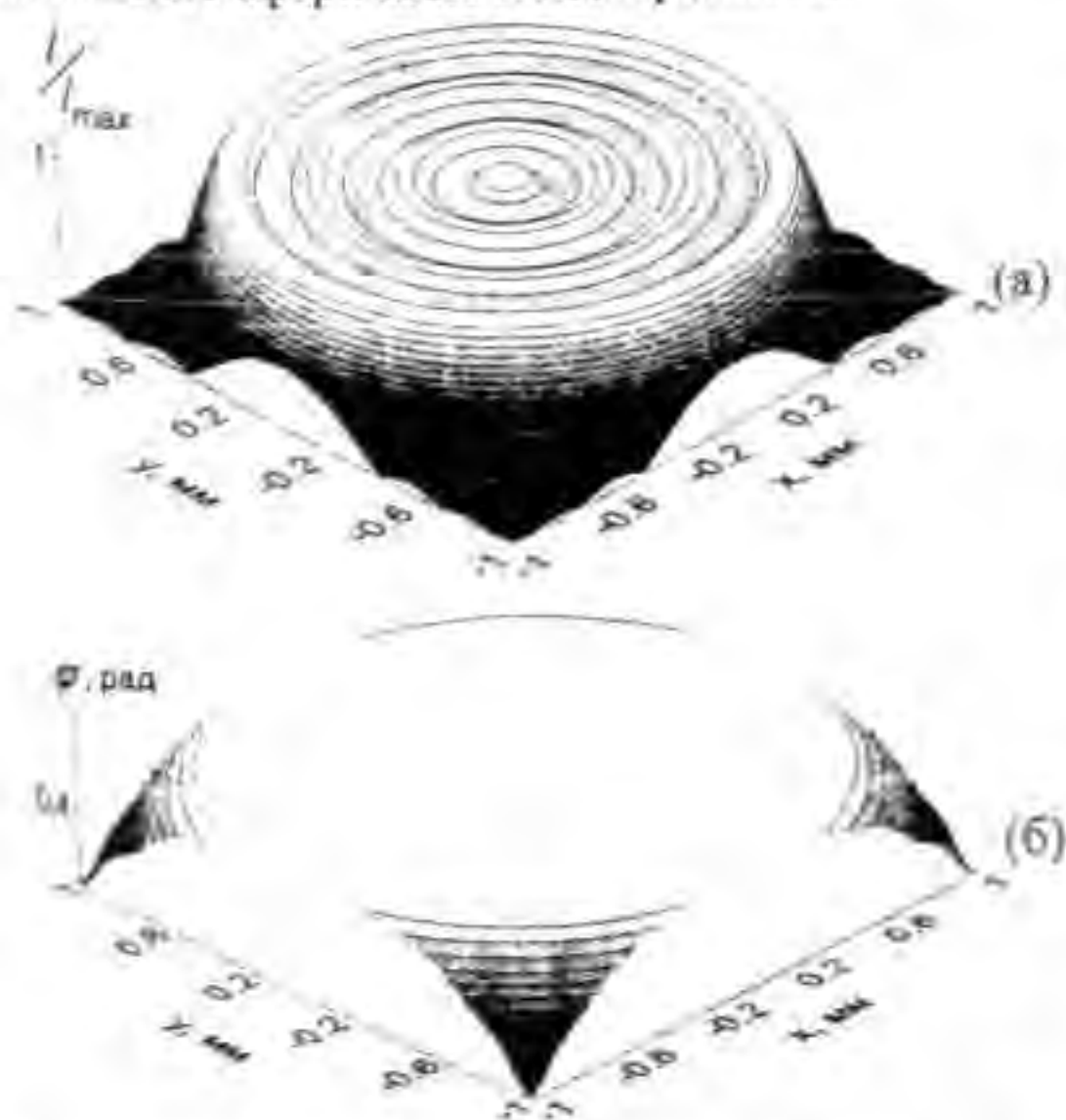


Рис. 2. Амплітудний (а) та фазовий (б) розподіли на виході формуючої лінзи за умови врахування фазових набігів від неоднорідності.

Видно, що врахування фазових набігів від неоднорідності змінює не лише амплітудний розподіл (тепер видно інтерференцію двох парціальних компонент (7), відбитих бездефектною частиною поверхні та неоднорідністю), а і форму хвильового фронту. Потрібно відмітити, що на фоні основної сферичності форми хвильового фронту можна побачити деяку тонку структуру, інтенсивність якої буде залежати від співвідношення між ефективним радіусом неоднорідності (r_i) та розміром сфокусованої плями (d). При цьому для різного співвідношення між діаметром сфокусованої точки та розміром неоднорідності спостерігається відмінність у дисперсії фази вихідного хвильового фронту (8). Результати моделювання зображені на рис.3.

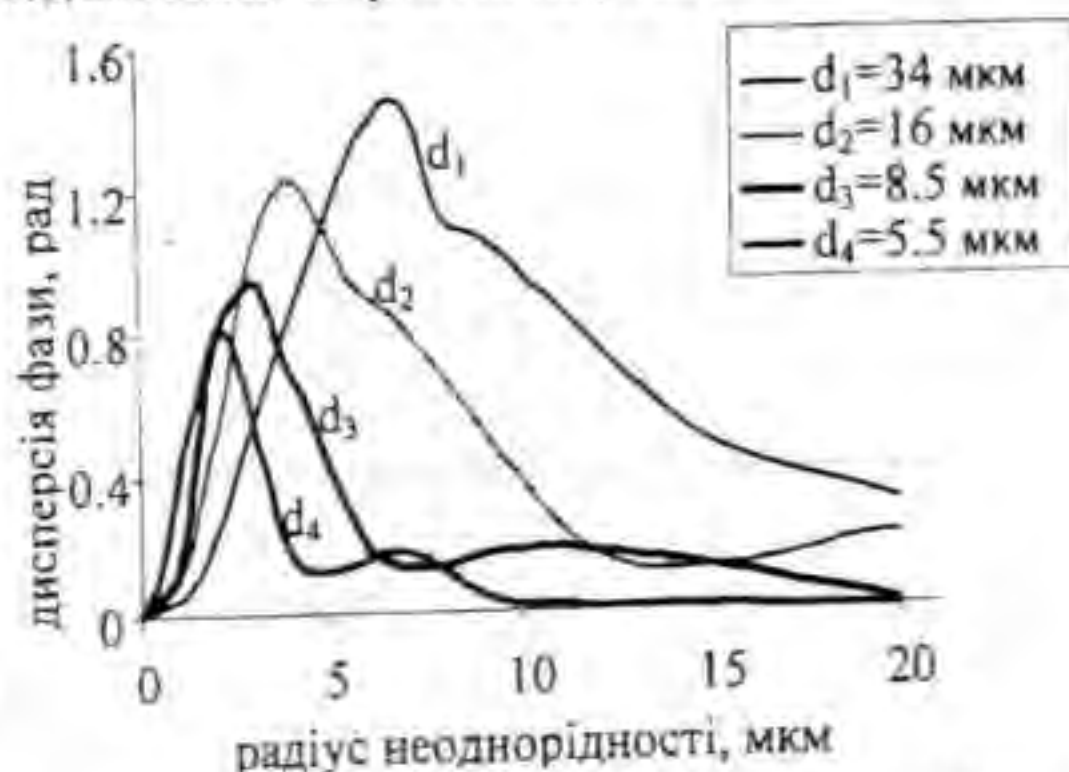


Рис.3. Залежності дисперсії фази вихідного хвильового фронту від радіусу неоднорідності.

Дані розподіли містять характерні максимуми та мінімуми, які мають місце для усіх чотирьох залежностей, кожен з яких відповідає певній пропорції між розмірами сфокусованої плями та дефекту. На рис.4. наведено один з графіків з рис.2 ($d_3=8.5$ мкм) та відповідний розподіл інтенсивності сфокусованої плями.

З графіків видно, що максимум дисперсії фази буде у випадку, коли радіус дефекту приблизно рівний половині розміру сфокусованої плями, а наступний мінімум дисперсії відповідає ситуації, коли в дефект потрапляє нульовий та перший максимуми сфокусованої плями. Таким чином зрозуміло що найкраща чутливість по фазі буде у точці максимуму дисперсії. Також спостерігається деяка особливість – перегин між першими максимумом та мінімумом на графіку дисперсії фази, який відповідає випадку, коли діаметр дефекту співрозмірний з розміром сфокусованої плями.

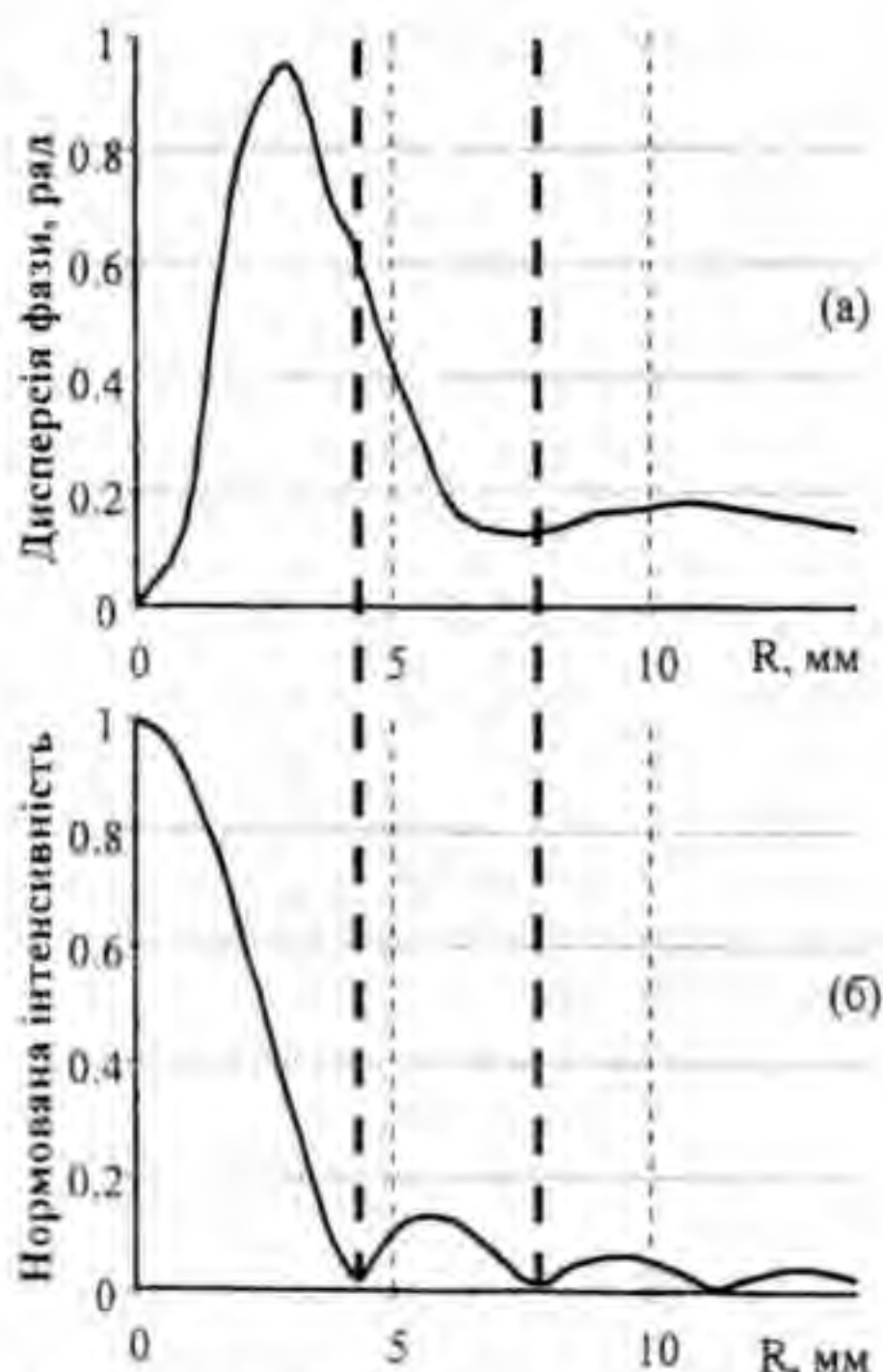


Рис.4. Залежність дисперсії фази вихідного хвильового фронту від радіусу неоднорідності (а) та відповідний розподіл інтенсивності сфокусованої плями (б)

Висновки

Побудована дифракційна модель відбивання сфокусованої оптичної хвилі від локальної рельєфної неоднорідності, яка враховує фазові запізнення при відбиванні від шорсткої поверхні. Показано, що при відбиванні світла від сферичної неоднорідності відбуваються зміни форми хвильового фронту, які визначаються співвідношенням між розмірами сфокусованої точки та окремого дефекту поверхні.

Запропоновано використовувати дисперсію фази вихідного хвильового фронту як інтегральний параметр для визначення ефективного радіусу неоднорідності.

Список використаних джерел

1. *Mishchenko M. I., Travis L. D., Lacis A. A.* Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles. – Cambridge University Press, Cambridge, 2006. – 470 p.
2. *Гудмен Дж.* Введение в Фурье-оптику – М.: Мир, 1970. – 364 с.
3. *Angelsky O.V., Hanson S.G., Maksimyak A.P., Maksimyak P.P.* Feasibilities of interferometric and chromoscopic technics in study of phase singularities // *Appl. Opt.* – 2005 – **44**, №. 24 – P. 5091-5100.
4. *Angelsky O.V., Hanson S.G., Maksimyak A.P., Maksimyak P.P.* Optical correlation diagnostics of rough surfaces with large surface inhomogeneities // *Opt. Express* – 2006 – **14** – P. 7299-7311.
5. *Goloborodko N.S., Grygoruk V.I., Kurashov V.N., Podanchuk D.V., Goloborodko A.A., Kotov M.M.* Surface defects determining by the wave-front scanner // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics And Optoelectronics* – 2010 – **13**, № 1 – P. 65–69.
6. *Голобородько А.О., Григоруку В.І., Котов М.М., Курашов В.Н., Поданчук Д.В., Сутягіна Н.С.* Визначення локальних дефектів поверхні сенсором хвильового фронту Шека–Хартмана // *Український фізичний журнал* – 2008. – **53**, № 10 – С. 946-951.

Надійшла до редколегії 29.04.10

УДК 539.2.01

¹Ільченко Л.Г., к.ф.-м.н., с.н.с., ²Ільченко В.В.,
д.ф.-м.н., проф., ¹Лобанов В.В., д.х.н., п.н.с.

¹Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН
України, вул.Генерала Наумова 17, Київ, 03164

²Київський університет імені Тараса Шевченка,
Радіофізичний ф-т, вул.Володимирська 64, Київ,
02033

Електростатичний потенціал у системі напівпровідник - вакуум - метал до та після контакту

В рамках нелокальної електростатики
теоретично розраховано сумарний
електростатичний потенціал $V_j(x, \Delta\Phi)$ в
системі напівпровідник - вакуум - метал (НВМ),
яка знаходиться в контакті.

Показано, що основним чинником утворення
подвійного електричного шару (ПЕШ) при
формуванні випростуючого НВМ контакту є
сильний вплив близько розташованого металу і
зарядового стану його поверхні на формування
області просторового заряду в напівпровіднику в
НВМ системі до контакту. При переході НВМ
структури у випростуючий контакт
стабільність висоти заперного шару $h(\Delta\Phi)$ на
межі напівпровідник-вакуум у площині їх
контакту обумовлена незалежністю розподілу
зарядового потенціалу в напівпровіднику від
товщини L ПЕШ, тоді як висота
потенціального бар'єра всередині вакуумної
цілини збільшується зі збільшенням L
відповідно до розподілу потенціалу сил
зображення в ній.

Ключові слова: потенціальний бар'єр,
нелокальна електростатика, випростуючий
контакт

E-mail: vai@rpd.univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Анісімов І.О.

Вступ

Задача про визначення потенціального
бар'єра, який виникає між розділеними вузьким
вакуумним проміжком напівпровідником та
металом, вважається однією з найбільш
актуальних задач [1-3].

Відомо, що виникнення області
просторового заряду (ОПЗ) в напівпровіднику
пов'язане з присутністю на його поверхні ($x=0$)

L.G.Il'chenko¹, Dr.Ph., V.V.Il'chenko², Dr.Sci.,
Prof., V.V.Lobanov¹, Dr.Sci.

¹Chuiko Institute of Surface Chemistry NAS of
Ukraine, No17 General Naumov St., Kiev, 03164

²Radio Physics Faculty, Taras Shevchenko National
University of Kiev, No64 Volodimirska st., Kiev,
01033, Ukraine

The electrostatic potential in the semiconductor - vacuum - metal system before and after contact

In the framework of non-local electrostatics the
electrostatic potential $V_j(x, \Delta\Phi)$ is calculated
theoretically for the semiconductor-vacuum-metal
(SVM) system, which is in the contact.

It is shown that the basic factor of the double
electric layer (DEL) formation in the case of the
rectifying contact is the strong influence of the close
located metal and the charge state of its surface on
the space charge region formation in the
semiconductor in SVM system before contact. The
stability of the depletion layer height $h(\Delta\Phi)$ on the
semiconductor/vacuum interface is caused by
independence of the charge potential distribution in
the semiconductor on the thickness L of the DEL,
when the SVM structure forms the rectifying contact.
At the same time the potential barrier height in the
vacuum gap increases with the increase of L accord
in to the image potential distribution in a
semiconductor/metal vacuum interval.

Key words: potential barrier, non-local
electrostatics, rectifying contact

заряду з густиною σ_1 . Параметри ОПЗ (товщина
ОПЗ $L_{ОПЗ}$ і значення потенціалу $\Delta V_j^\sigma(0)$ на
його поверхні - вигін зони) визначаються як
величиною і знаком заряду на поверхні
напівпровідника, так і його об'ємними
характеристиками: діелектричною сталою ϵ_1 ,
типом та концентрацією n_1 вільних носіїв
(ступенем об'ємного легування), температурою

Т тощо, і є характеристиками вільної поверхні напівпровідника [1-3].

В роботі [4] в рамках нелокальної електростатики [5-7] було показано, що присутність металу на відстані $L < L_{OPZ}$ призводить до зміни основних параметрів ОПЗ. За відсутності контакту напівпровідник-метал та зовнішньої напруги $U=0$ для несиметричної за об'ємними та поверхневими характеристиками НВМ системи було теоретично розраховано зарядовий потенціал $\Delta V_j^\sigma(x)$, пов'язаний з наявністю на поверхнях напівпровідника та металу заряду з густиною відповідно σ_1^0 та σ_2^0 . Було показано, що при зменшенні відстані L між напівпровідником та металом, коли $L < L_{OPZ} \sim 100\text{нм}$, суттєво посилюється екранування поверхневого заряду напівпровідника з густиною σ_1^0 вільними електронами металу та вплив заряду з густиною σ_2^0 на його поверхні. При подальшому зменшенні вакуумного інтервалу $L < 10\text{нм}$ між напівпровідником та металом утворюється потенціальний бар'єр, який зумовлений різницею в об'ємних властивостях кожного з трьох середовищ ($j=1,2,3$) і визначається розподілом потенціалу сил зображення $V_j^0(x)$ [5,6]. Неперервність $V_j^0(x)$ та сумарного потенціалу $V_j(x)$ на межах поділу обумовлена коректним врахуванням ефектів просторової дисперсії у функціях діелектричної проникності напівпровідника та металу [4-7].

В даній роботі розглянуто задачу про формування потенціального бар'єра в НВМ системі, яка знаходиться в контакті.

За рахунок різниці в роботах виходу металу φ_3 та напівпровідника φ_1 приведення НВМ системи в контакт (встановлення спільного рівня Фермі) спричиняє скінчений стрибок потенціалу, який дорівнює контактній різниці потенціалів $\Delta\Phi = \varphi_3 - \varphi_1$. Неперервність сумарного потенціалу $V_j(x)$ в НВМ системі до контакту може бути збережена після її приведення в контакт за рахунок зміни зарядового потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$ завдяки виникненню подвійного електричного шару (ПЕШ) при перерозподілі сумарних густин зарядів на поверхні

напівпровідника $\sigma_1^0 \rightarrow \sigma_1(\Delta\Phi)$ та металу $\sigma_2^0 \rightarrow \sigma_2(\Delta\Phi)$.

Базуючись на одержаному в роботі [4] розподілі зарядового потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$ та умові $L < L_{OPZ}$ виникнення сильного взаємозв'язку між розділеними вакуумним проміжком L напівпровідником та металом, що і зумовлює виникнення ПЕШ, у даній роботі в рамках нелокальної електростатики теоретично розраховано сумарний електростатичний потенціал $V_j(x, \Delta\Phi)$ в НВМ системі в контакті.

На прикладі системи $n\text{-Si}$ - вакуум - Al одержані в даній роботі результати порівнюються з розподілом електростатичного потенціалу в НВМ системі до контакту [1,2] та з відомим квадратичним законом утворення запірного шару Шотткі.

Теорія

Розглянемо несиметричну тришарову структуру, що складається з напівобмеженого напівпровідника з діелектричною функцією $\epsilon_1(\bar{k})$ в області $x \leq 0$ та з густиною заряду σ_1^0 на його поверхні і з напівобмеженого металу з діелектричною функцією $\epsilon_3(\bar{k})$ в області $x \geq L$ та з густиною заряду σ_2^0 на поверхні, які розділені вакуумним проміжком $0 \leq x \leq L$ ($\epsilon_2(\bar{k}) = 1$) [5-7].

Діелектричну функцію $\epsilon_1(\bar{k})$ легованого напівпровідника задамо у вигляді [6,7]

$$\epsilon_1(\bar{k}) = 1 + \frac{\epsilon_1 - 1}{1 + \left(\frac{\bar{k}^2}{\lambda_1^2} \right) (\epsilon_1 - 1)} + \frac{\kappa_1^2}{\bar{k}^2},$$

$$\bar{k}^2 = k_{\perp}^2 + q^2, \quad (1)$$

де ϵ_1 – діелектрична стала кристалічної ґратки (при $\bar{k} \rightarrow 0$), λ_1^{-1} – ефективний радіус екранування зв'язаними (валентними) електронами іонних остовів кристалічної ґратки, який за порядком величини дорівнює розміру атома (іона) і який розраховується з урахуванням зонної структури напівпровідника [6,7], $\kappa_1^2 = 4\pi e^2 n_1 / \epsilon \cdot k_B T$ в наближенні Дебая-Хюккеля у випадку невідродженого електронного газу, k_B – стала Больцмана; n_1 – концентрація невідродженого газу вільних електронів (дірок) (y

роботі розглянуто випадок напівпровідників n -типу).

Діелектрична функція металу $\varepsilon_3(\vec{k})$ в загальновідомому довгохвильовому наближенні Томаса-Фермі [5-9] має вигляд

$$\varepsilon_3(\vec{k}) = 1 + \frac{\kappa_3^2}{k^2}, \quad k = \{k_\perp, q\}, \quad (2)$$

де $\kappa_3^2 = 6\pi e^2 n_3 / E_F^3$, $E_F^3 = \hbar^2 (3\pi^2 n_3)^{2/3} / 2m_3$ - енергія Фермі, n_3 та m_3 - відповідно концентрація та ефективна маса вільних електронів у металі.

В результаті розв'язку нелокального рівняння Пуассона для системи трьох середовищ із просторовою дисперсією [4-7] за умови неперервності потенціалу та скінченного стрибка $4\pi\sigma_{1,2}$ його першої похідної на межах поділу, обумовленого однорідною густиною поверхневого заряду σ_1^0 на напівпровідниковій та σ_2^0 на металевій поверхнях, для визначення електростатичного потенціалу $V_j(x)$ маємо рівняння

$$V_j(x) = V_j^0(x) + \Delta V_j^\sigma(x). \quad (3)$$

Тут $V_j^0(x)$ - поляризаційна компонента повного потенціалу, пов'язана з відмінністю об'ємних властивостей трьох середовищ (потенціал сил зображення) [5-7], а $\Delta V_j^\sigma(x)$ - зарядовий потенціал [2,3], пов'язаний із наявністю заряду на поверхнях напівпровідника σ_1^0 ($x=0$) та металу σ_2^0 ($x=L$), для розподілу якого в НВМ системі до контакту одержуємо такі рівняння [4]:

$$\Delta V_1^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \cdot a_1(0;|x|)}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot \left\{ \sigma_1^0 \cdot (1 + \kappa_3 L) + \sigma_2^0 \right\} \quad (x \leq 0), \quad (4)$$

$$\Delta V_2^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot \left\{ \sigma_1^0 - a_1(0;0) \cdot [1 + \kappa_3(L-x)] + \sigma_2^0 \cdot [a_1(0;0) + x] \right\} \quad (0 \leq x \leq L), \quad (5)$$

$$\Delta V_3^\sigma(x) = \frac{\pm 4\pi e \cdot e^{-\kappa_3(x-L)}}{1 + \kappa_3 \cdot [L + a_1(0;0)]} \cdot \left\{ \sigma_1^0 - a_1(0;0) + \sigma_2^0 - [a_1(0;0) + L] \right\}, \quad (x \geq L), \quad (6)$$

тут

$$a_1(0;|x|) = \frac{1}{\beta_+^2 - \beta_-^2} \cdot \left[\frac{e^{-|x|\beta_+}}{\beta_+} \left(\beta_+^2 - \frac{\kappa_1^2 \cdot \Lambda^2}{\varepsilon_1} \right) - \frac{e^{-|x|\beta_-}}{\beta_-} \left(\beta_-^2 - \frac{\kappa_1^2 \cdot \Lambda^2}{\varepsilon_1} \right) \right], \quad (7)$$

де

$$\beta_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[\kappa_1^2 (1 + \Lambda^2) \right] \pm \frac{\kappa_1^2}{2} \sqrt{(1 + \Lambda^2)^2 - \frac{4\Lambda^2}{\varepsilon_1}},$$

$$\Lambda = \frac{\lambda_1}{\kappa_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - 1}}. \quad (8)$$

Приведення НВМ системи в контакт зумовлює перехід середовищ з різними роботами виходу φ_1 та φ_3 від спільного (вакуумного) рівня відліку енергії до спільного рівня Фермі, що викликає скінчений стрибок потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$ на межах поділу, який дорівнює контактній різниці потенціалів $\Delta\Phi = \varphi_3 - \varphi_1$, так що

$$\Delta V_2^\sigma(L) - \Delta V_2^\sigma(0) = \Delta V_3^\sigma(L) - \Delta V_1^\sigma(0) = \Delta\Phi. \quad (9)$$

Як було показано в ряді робіт [4-6], неперервність потенціалу сил зображення $V_j^0(x)$ та сумарного потенціалу $V_j(x)$ (3) в НВМ системі до контакту забезпечується коректним врахуванням ефектів просторової дисперсії у функціях діелектричної проникності напівпровідника $\varepsilon_1(\vec{k})$ і металу $\varepsilon_3(\vec{k})$.

Неперервність сумарного потенціалу $V_j(x)$ при переході НВМ системи в контакт може бути збережена за рахунок зміни зарядового потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$ завдяки виникненню ПЕШ при перерозподілі сумарних густин зарядів на поверхнях напівпровідника та металу:

$$\sigma_1^0 \rightarrow \sigma_1(\Delta\Phi) = \sum_{i=1}^{v_1} \sigma_i,$$

$$\sigma_2^0 \rightarrow \sigma_2(\Delta\Phi) = \sum_{k=1}^{v_2} \sigma_k, \quad (10)$$

де v_1 та v_2 - кількість типів поверхневих станів на напівпровідниковій та металевій поверхнях.

Використовуючи умову (9) з урахуванням (4) - (8), для визначення сумарних густин заряду на поверхнях напівпровідника $\sigma_1(\Delta\Phi)$ та металу $\sigma_2(\Delta\Phi)$ після контакту одержуємо

$$\sigma_1(\Delta\Phi) = \frac{-\Delta\Phi}{4\pi e \cdot L} \cdot \left(1 + \frac{\kappa_3 \cdot L}{1 + \kappa_3 \cdot a_1(0,0)}\right),$$

$$\sigma_2(\Delta\Phi) = -\sigma_1(\Delta\Phi). \quad (11)$$

Підставляючи (11) до (4)-(6) та враховуючи (7)-(8), для визначення розподілу сумарного потенціалу $V_j(x, \Delta\Phi)$ (3) в НВМ системі після контакту для від'ємних зарядів $-e$ (електронів) одержуємо рівняння

$$V(x, \Delta\Phi) = V(x) - \Delta\Phi \cdot \left(1 - \frac{\kappa \cdot a(0, |x|)}{1 + \kappa \cdot a(0,0)}\right),$$

$$(x \leq 0), \quad (12)$$

$$V_2(x, \Delta\Phi) = V_2^0(x) - \Delta\Phi \cdot \left[\left(1 - \frac{\kappa_3 \cdot a_1(0,0)}{1 + \kappa_3 \cdot a_1(0,0)}\right) \cdot \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{1}{1 + \kappa_3 \cdot a_1(0,0)} \cdot \frac{x}{L}\right], \quad (0 \leq x \leq L),$$

(13)

$$V_3(x, \Delta\Phi) = V_3^0(x) - \Delta\Phi \cdot \frac{e^{-\kappa_3 \cdot (x-L)}}{1 + \kappa_3 \cdot a_1(0,0)},$$

$$(x \geq L). \quad (14)$$

Як бачимо, розподіл зарядової компоненти $\Delta V_j^\sigma(x)$ сумарного потенціалу $V_j(x, \Delta\Phi)$ в напівпровіднику (другий доданок у (12)), який визначає формування запірного шару НВМ системи в контакті, не залежить від товщини L ПЕШ, але залежить від параметрів металу.

Сильний вплив металу та зарядового стану його поверхні на розподіл потенціалу в напівпровіднику до контакту є основним фактором утворення ПЕШ при вирівнюванні рівней Фермі і, як наслідок, формування випростуючого контакту, що справедливо за умови $L < L_{опз}$.

Результати

Розрахунки електростатичного потенціалу в системі НВМ до та після контакту проведемо на прикладі системи $n-Si$ - вакуум - Au , яка широко використовується в напівпровідниковій мікроелектроніці і об'ємні параметри якої добре відомі [4,6,7]: для невідродженого напівпровідника n -типу ($n-Si$): діелектрична константа - $\epsilon_1 = 11.9$, температура - $T = 293^\circ K$, концентрація $n_1 = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, поперечна $m_\perp = 0.98m_0$ та поздовжня $m_\parallel = 0.19m_0$ ефективна маса електронів, де m_0 - маса вільного електрона, $\lambda_1 = 5.908 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$ і

$\chi_1 = -E_c = 4.05 \text{ eV}$ - положення дна зони провідності в об'ємі напівпровідника. Для металу (Au): $\varphi_3 = 5.1 \text{ eV}$, $n_3 = 5.9 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ і $m_3 = 0.87325m_0$

Визначимо розподіл потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$ в $n-Si$ - вакуум - Au системі за відсутності контакту, коли поверхня золота з однорідною густиною заряду $\sigma_2^0 = -1 \cdot 10^{14} \text{ e/cm}^2$ знаходиться на відстанях $L = 1 \text{ нм}, 2 \text{ нм}, 3 \text{ нм}$ від поверхні $n-Si$ з однорідною густиною заряду $\sigma_1^0 = 3.4 \cdot 10^{12} \text{ e/cm}^2$. Відповідні залежності згідно рівнянь (4) - (8) наведені на рис.1 пунктирними кривими 1'-3'. При приведенні системи $n-Si$ - вакуум - Au в контакт (при заданих параметрах та $\Delta\Phi = 0.824 \text{ eV}$) розподіл зарядового потенціалу $\Delta V_j^\sigma(x)$ також визначається рівняннями (4) - (8) з врахуванням (11). Відповідні розрахунки теж показані на рис.1 (суцільні криві 1-3).

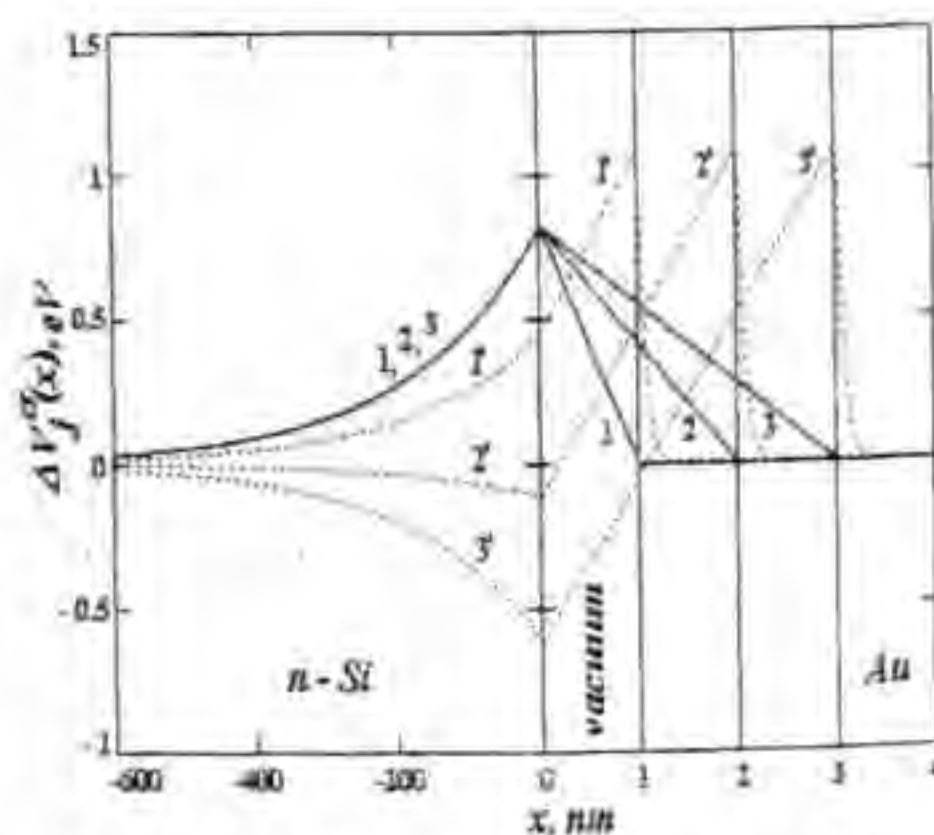


Рис.1. Розподіл $\Delta V_j^\sigma(x)$ в системі $n-Si$ - вакуум - Au до (пунктирні криві 1'-3') та після (суцільні криві 1-3) контакту.

Як видно з рис.1, зі зменшенням відстані L між напівпровідником та металом, коли $L < L_{опз}$, внесок екранування поверхневого заряду напівпровідника σ_1^0 вільними електронами та поверхневим зарядом σ_2^0 металу суттєво збільшується. Причому для від'ємної густини заряду σ_2^0 на поверхні металу при зменшенні відстані L відбувається зміна вигину зони, тобто в напівпровіднику n -типу з додатньо зарядженою поверхнею ОПЗ має характер потенціального бар'єру, параметри

якого не пов'язані з контактною різницею потенціалів $\Delta\Phi$ [1-3], а визначаються електронною структурою металу, величиною від'ємного заряду на його поверхні та відстанню L між напівпровідником та металом.

З рис. 1 видно також, що приведення системи n -Si - вакуум - Au в контакт зумовлює виникнення запірного шару (з висотою $h(\Delta\Phi) = 0.821 \text{ eV}$ на поверхні напівпровідника), розподіл потенціалу в якому не залежить від товщини L вакуумного проміжку між напівпровідником та металом (суцільні криві 1-3), тоді як густини заряду $\sigma_1(\Delta\Phi)$ та $\sigma_2(\Delta\Phi)$ на поверхнях напівпровідника та металу змінюються в залежності від товщини L вакуумної щілини відповідно до рівнянь (11), що показано на рис. 2. На рис. 3 та 4 - положення нижнього краю зони провідності та енергії Фермі в n -Si: E_c^b і E_F^b до контакту та E_c^a і E_F^a після контакту.

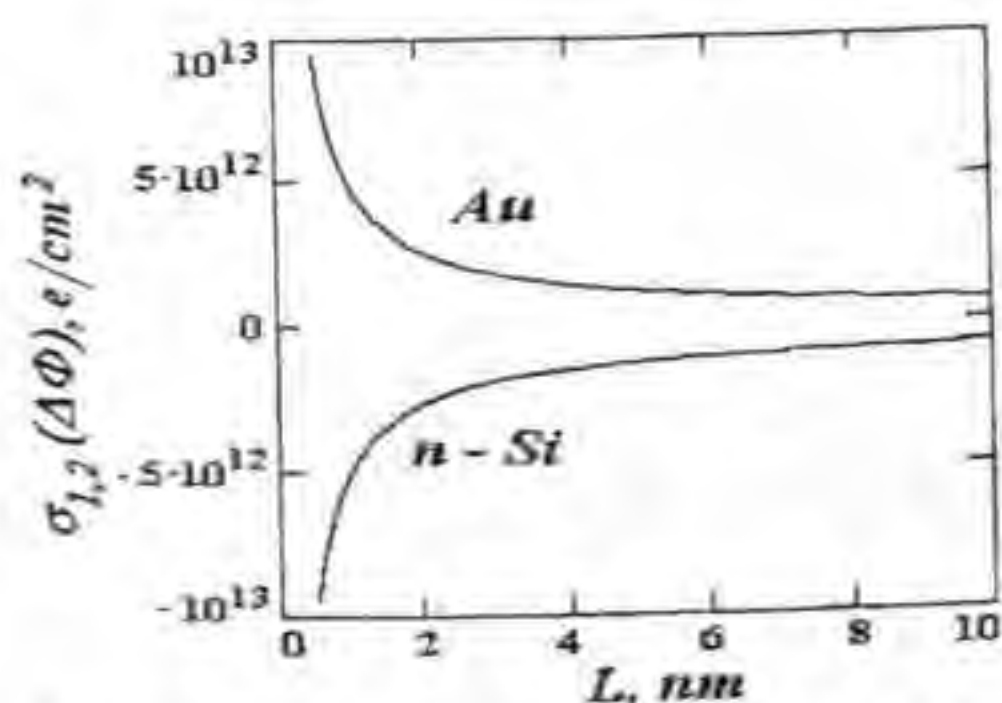


Рис. 2. Залежність $\sigma_1(\Delta\Phi)$ та $\sigma_2(\Delta\Phi)$ від товщини L на поверхнях напівпровідника та металу в системі n -Si - вакуум - Au в контакті.

На рис. 3 та рис. 4 показано розрахований згідно рівнянь (4) - (8) та роботи [6] хід потенціалу $V_j(x)$ (3) для від'ємного заряду e в системі n -Si - вакуум - Au за відсутності контакту (пунктирні криві 1'-3') та сумарний потенціал $V_j(x, \Delta\Phi)$ згідно рівнянь (12)-(14) в тій самій системі, яка знаходиться в контакті (суцільні криві 1-3).

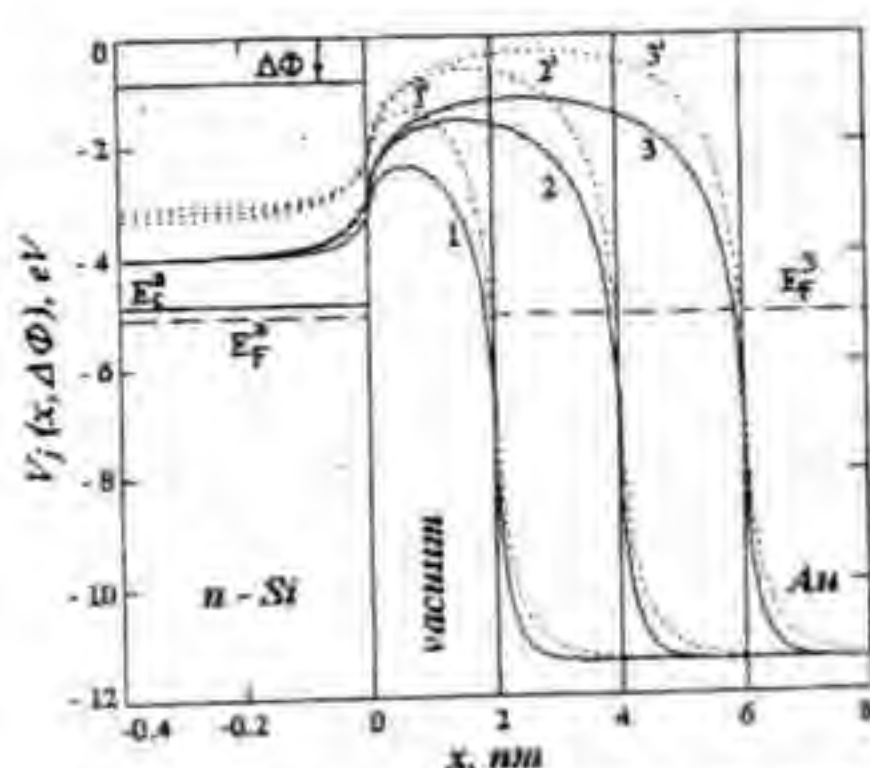


Рис. 3. Енергетична діаграма та порівняння розподілу сумарного потенціалу $V_j(x)$ в системі n -Si - вакуум - Au до контакту при $\sigma_1^0 = 3.4 \cdot 10^{12} \text{ e/cm}^2$ і $\sigma_2^0 = -10^{14} \text{ e/cm}^2$ (пунктирні криві 1'-3') та після контакту (суцільні криві 1-3), для різної товщини вакуумної щілини $L = 0.2 \text{ нм}; 0.4 \text{ нм}; 0.6 \text{ нм}$.

На рис. 4 штрих-пунктирною кривою для порівняння показано розподіл потенціалу $V_{cl}(x, \Delta\Phi)$ в напівпровіднику, який визначає квадратичний закон формування запірного шару Шотткі, розрахунки якого проведені при наведених вище параметрах для n -Si / Au контакту відповідно до рівняння [2]

$$V_{cl}(x, \Delta\Phi) = -E_c - \Delta\Phi \cdot \left[1 - \left(1 - |x|/D_{cl} \right)^2 \right],$$

$$D_{cl} \approx 8\kappa_1^{-1}. \quad (16)$$

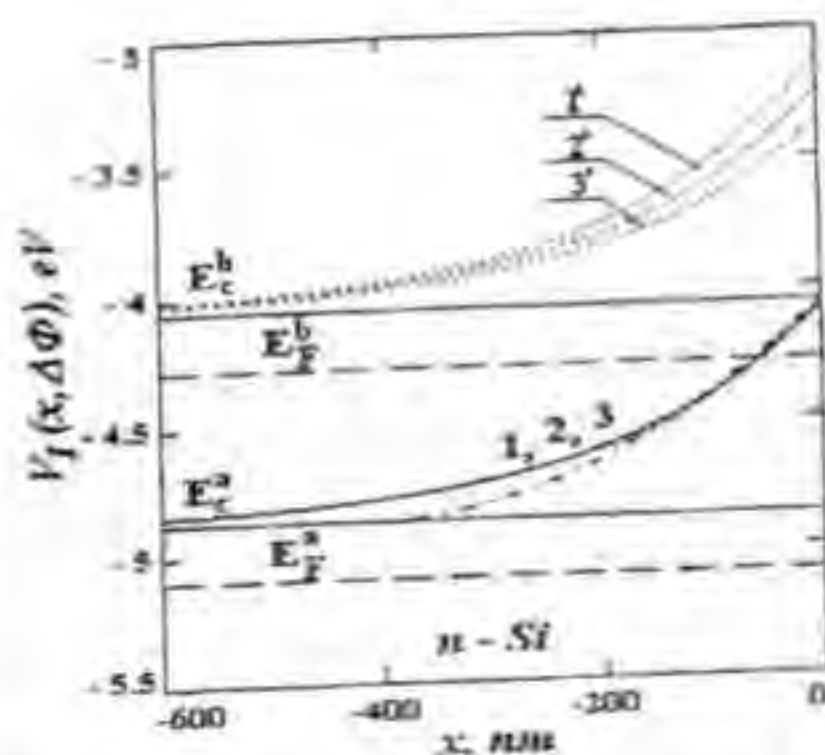


Рис. 4. Розподіл сумарного потенціалу $V_j(x)$ (до контакту) - пунктирні криві 1', 2', 3' - та $V_j(x, \Delta\Phi)$ (після контакту) - суцільна крива 1, 2, 3 - в системі n -Si - вакуум - Au для відстаней $L = 0.2 \text{ нм}; 0.4 \text{ нм}; 0.6 \text{ нм}$ та $\sigma_1^0 = 3.4 \cdot 10^{12} \text{ e/cm}^2$ і $\sigma_2^0 = -10^{14} \text{ e/cm}^2$.

Висновки

В даній роботі в рамках нелокальної електростатики теоретично розраховано електростатичний потенціал $V_j(x)$ в НВМ системі, яка знаходиться в контакті, і показано, що необхідною умовою виникнення ПЕШ і, як наслідок, утворення випростуючого контакту є виникнення сильного зв'язку між напівпровідником та близько розміщеним $L < L_{OPZ}$ металом до контакту.

Показано, що при переході НВМ структури у випростуючий контакт

- неперервність сумарного потенціалу $V_j(x, \Delta\Phi)$ зберігається завдяки коректному врахуванню ефектів просторової дисперсії у функціях діелектричної проникності напівпровідника $\epsilon_1(\vec{k})$ і металу $\epsilon_3(\vec{k})$ та перерозподілу сумарного заряду на їх поверхнях відповідно до контактної різниці потенціалу $\Delta\Phi$ та товщини вакуумної щілини L ;
- отриманий розподіл зарядової компоненти $\Delta V_j^\sigma(x, \Delta\Phi)$ сумарного електростатичного потенціалу $V_j(x, \Delta\Phi)$ в напівпровіднику (12), не залежить від товщини L ПЕШ, але зберігає слабку залежність від екрануючих властивостей близько розміщеного металу;
- незалежність розподілу зарядового потенціалу $\Delta V_1^\sigma(x, \Delta\Phi)$ в напівпровіднику (а також і $\Delta V_3^\sigma(x, \Delta\Phi)$ в металі) від L (товщини ПЕШ) вимагає накладання умови $L < L_{OPZ}$ при розгляді НВМ системи до контакту, що і є необхідною умовою виникнення ПЕШ і, як наслідок, випростуючого контакту; висота бар'єра на межі поділу напівпровідник-вакуум ($x=0$) в контакті $h(\Delta\Phi) = \Delta V_1^\sigma(x=0, \Delta\Phi)$ (висота запірного шару) завжди менша від контактної різниці потенціалів, $h(\Delta\Phi) < \Delta\Phi$, завдяки екрануючим властивостям напівпровідника та металу;
- висота потенціального бар'єра $V_2(x, \Delta\Phi)$ у вакуумній щілині (всередині ПЕШ) збільшується зі збільшенням товщини ПЕШ L відповідно до

розподілу потенціалу сил зображення $V_j^0(x)$ в ній;

- розподіл електростатичного потенціалу в напівпровіднику (12) з непоганою точністю корелює з відомим квадратичним законом утворення запірного шару Шотткі (16).

Список використаних джерел

1. Rhoderick E.H., Williams R.H. Metal-Semiconductor contacts. - Oxford: Oxford Science Publishers, 1988. - 251 p.
2. Г.П.Пека, В.І.Стріха. Поверхневі та контактні явища в напівпровідниках. Київ, «Либідь», 1992- 237 с..
3. М.Г.Находкін, Д.І.Шека. Фізичні основи мікро та наноелектроніки. Київ, «Київський університет». - 2005- 432 с.
4. Ільченко Л.Г., Ільченко В.В., Лобанов В.В. Розподіл електростатичного потенціалу в системі напівпровідник-вакуум-метал у відсутності зовнішньої напруги. // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. - 2009. - № 3. - С. 237-242.
5. Il'chenko L.G., Pashitskii E.A. and Romanov Yu.A. Charge interaction in layered systems with spatial dispersion // Surf. Sci. - 1982 - V. 121 - P. 375-395.
6. 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. Сер.: Радіофізика та електроніка. - 2008. - №11. - С. 29-34.
7. 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 - Т.2, С.52-81.

Надійшла до редколегії 28.04.2010

УДК 620.18:546.28

Находкін М.Г., акад. НАНУ, доктор ф.-м. наук,
Куліш М.П., чл.-кор. НАНУ, доктор ф.-м. наук,
Родіонова* Т.В., канд. ф.-м. наук,
Синяньський О.М., студент

Фасетування вершин двійників в зернах полікремнієвих плівок

Методом просвічуючої електронної мікроскопії досліджено вплив температури відпалювання на фасетування вершин двійникових прошарків в зернах полікремнієвих плівок, що отримані методом хімічного осадження в реакторі зниженого тиску. Встановлено що типи фасеток визначаються температурою відпалювання.

Ключові слова: полікремнієві плівки, двійникові границі, фасетування.

*E-mail: rodtv@univ.kiev.ua

Статтю представив д. ф.-м. н. Скришевський В.А.

Вступ

Завдяки широкому застосуванню полікремнієвих плівок в мікроелектроніці існує велика кількість публікацій, що присвячені дослідженням структури даних плівок, оскільки саме структура визначає важливі з точки зору практичних застосувань властивості плівок [4,5]. Відомо, що суттєвий вплив на властивості плівок мають дефекти структури, зокрема, внутрішні границі (міжфазні границі, границі зерен, двійникові границі всередині зерен). Тому останнім часом все більше уваги приділяється дослідженням границь та впливу на них різних технологічних чинників, зокрема, термообробок. Для кремнію, як і для інших матеріалів з невеликою енергією дефектів пакування, двійники є типовими лінійними дефектами [1,2]. Двійникові границі можуть суттєво впливати на структурно-чутливі властивості полікремнієвих плівок [2,4].

Дослідження показали [6], що двійникові границі в полікремнієвих плівках можна поділити на два типи: 1 – двійникові разорієнтації між зернами, що виникають внаслідок конкурентного росту зерен; 2 – двійникові прошарки в зернах, які формуються при міграції границь зерен в процесі відпалювання. В роботі [7] детально досліджено

Nakhodkin N.G., Acad. Of NAS of Ukraine,
Dr.Sci., Kulish N.P., Corresp. Member of NAS of
Ukraine, Dr.Sci., Rodionova* T.V., Ph.D.,
Syniansky O.M., stud.

Faceting of twin tips inside grains of polysilicon films

The faceting of the tip of twin plates inside grains of polysilicon films, produced by low-pressure chemical vapour deposition, has been investigated by transmission electron microscopy. It has been shown that the type of facets change depending on the annealing temperature.

Key words: polysilicon films, twin boundaries, faceting.

вплив відпалювання на характеристики процесів двійникування в зернах легованих фосфором рівноосьових полікремнієвих плівок. Розглянуто вплив розщеплення границь зерен та множинного двійникування на характеристики двійникових границь за різних температур відпалювання. Показано, що зростання температури супроводжується зменшенням питомої протяжності двійникових границь та густини двійників у зернах. Змінюється спектр двійникових орієнтацій між зернами.

Проте зміна протяжності та густини двійникових границь в зернах не єдині структурні перетворення, що відбуваються з такими границями в результаті відпалювання. Подібно до того, як зовнішня поверхня кристала може розбиватися на систему плоских фасеток, якщо сумарна енергія цих фасеток виявляється меншою за енергію вихідної поверхні кристалу, (не дивлячись на те, що при цьому збільшується площа поверхні зразка) [1,3], процеси фасетування мають місце і на внутрішніх границях полікристалічних матеріалів, зокрема, на границях зерен та на двійникових прошарках в об'ємі зерен. Принципова відмінність даних границь полягає в тому, що їх структура формується під впливом кристалічних ґраток

двох сусідніх кристалів, а не одного, як у випадку зовнішньої поверхні.

Існують детальні дослідження процесів фасетування на двійникових границях у металах, зокрема, в Zn [8], Cu [9,10], Mo [11]. Для напівпровідникових матеріалів, зокрема, полікремнієвих плівок, такі дослідження не проводились. Разом з тим відомо [12], що всі структурні зміни мають суттєвий вплив на електрофізичні властивості плівок.

У даній роботі методом просвічуючої електронної мікроскопії досліджено вплив температури відпалювання на фасетування вершин двійникових прошарків у зернах легованих фосфором полікремнієвих плівок.

Методика

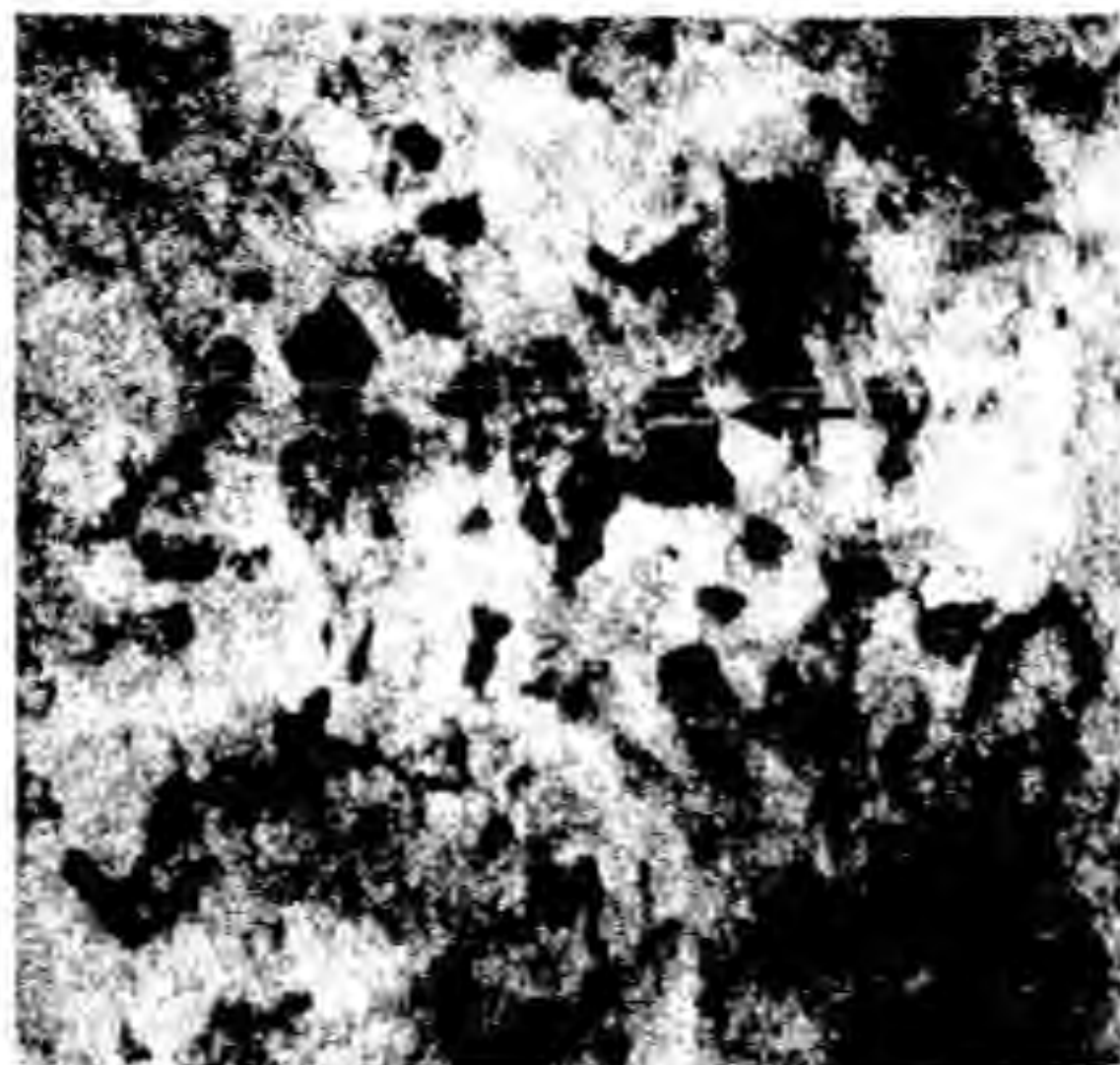
Полікремнієві плівки отримували методом хімічного осадження з газової фази в реакторі зниженого тиску. В якості підкладки використовували пластини $Si(100)$ із шаром SiO_2 товщиною $\sim 0,1$ мкм. Товщина плівок складала $0,5$ мкм. Температура осадження $630^\circ C$. Плівки легували фосфором шляхом термодифузії. Рівень легування $\sim 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Зразки відпалювали в атмосфері N_2 в інтервалі температур 1040 – $1200^\circ C$ на протязі 30 хвилин. Інтервал температур відпалювання був вибраний на основі попередніх досліджень [13,14], оскільки саме за цих температур мають місце зміни структури плівок, зокрема, зростання розмірів зерен, що призводить до перебудови зернограничної структури плівок.

Для електронно-мікроскопічних та електронографічних досліджень на просвіт товщину зразків в площині підкладки зменшували шляхом хімічного травлення в суміші $HF:HNO_3$ (1: 5). Орієнтаційні співвідношення між ділянками, а також відповідні кристалографічні напрямки були встановлені за допомогою електронографії. Окрім того, взаємну разорієнтацію суміжних зерен визначали з електронно-мікроскопічних зображень шляхом вимірювання кутів між слідами $\langle 112 \rangle$ мікродвійників, які присутні в більшості зерен.

Результати та обговорення

Аналіз електронно-мікроскопічних зображень полікремнієвих плівок показав, що для всіх температурах, що досліджувались, в плівках спостерігаються двійникові прошарки, які мають, переважно, пластинчасту форму, що є природним для кремнію, оскільки він відноситься до матеріалів із низьким значенням енергії дефектів

пакування, для яких є характерним формування пластинчатих двійників [3]. В інтервалі температур від температури осадження $630^\circ C$ до температури $\sim 1120^\circ C$ двійникові прошарки розповсюджуються через усе зерно від границі до границі (рис. 1). Двійники, які закінчуються в об'ємі зерен, відсутні. Можна припустити, що така морфологія зерен обумовлена їх формуванням в результаті множинного двійникування.



0,2 мкм

Рис. 1 Двійникові прошарки (відмічено стрілкою) в зернах полікремнію (температура $630^\circ C$).

У плівках, що відпалені при високих температурах ($> 1120^\circ C$), спостерігаються двійникові прошарки, які закінчуються в об'ємі зерен. Це так звані двійники відпалювання, що виникають у процесі міграції міжзеренних границь. Міграція границь зерен є механізмом, за допомогою якого здійснюється зростання розмірів зерен у плівках за даних температур відпалювання [3,13,14]. Типові електронно-мікроскопічні зображення мікроструктури відпалених плівок та двійникових прошарків наведені на рис. 2-4. Аналіз зображень свідчить, що двійникові прошарки в зернах полікремнію розташовані перпендикулярно до поверхні плівки та мають однорідну ширину по всій довжині. Паралельні витягнуті сторони двійникових прошарків утворені когерентними симетричними двійниковими границями $\{111\}_1/\{111\}_2$ (індекси 1 та 2 відповідають зерну та двійнику, відповідно).



0,2 мкм

Рис. 2 Мікрофотографії полікремнієвих плівок, що відпалені за температури 1120°C (стрілками відмічені фасетовані вершини двійникових прошарків).

Симетрична двійникова границя $\{111\}_1/\{111\}_2$ має дуже низьку енергію [2,5,6]. Вона відповідає площині $(100)_{\text{ГСВ}}$ ґратки вузлів, що співпадають і позначається $\Sigma 3$ (Σ – обернена щільність вузлів, що співпадають). Це найбільш щільно пакована площина ГСВ. Ширина двійникових прошарків змінюється в широких межах, від 0,025 мкм до 0,2 мкм. Прошарки малої товщини спостерігаються для всіх температур відпалювання. Разом з тим, максимальна товщина двійникових прошарків збільшується при зростанні температури. Що стосується вершин прошарків, то їх морфологія та орієнтація суттєво змінюється при різних температурах відпалювання.

Так, для температури відпалювання 1120°C на вершинах двійникових прошарків спостерігається декілька різновидів фасеток. На рис. 3,а,б наведено двійник, на вершині якого є одна фасетка, яка складає кут 26° з бічною стороною двійникового прошарку, тобто з симетричною двійниковою границею. Згідно схемам, що наведені в роботі [7], орієнтація такої фасетки відповідає $\{522\}_1/\{144\}_2$, або площині $(130)_{\text{ГСВ}}$ ГСВ. Наступний тип фасетки, що спостерігається за даної температури відпалювання, зображено на рис. 3,в,г. Вершина двійникового прошарку також складається з однієї фасетки, яка розташована під кутом 35° до симетричної двійникової границі. Ця фасетка має орієнтацію $\{511\}_1/\{111\}_2$ і відповідає площині $(120)_{\text{ГСВ}}$ ГСВ [7]. На рис. 3,д,е наведено двійниковий прошарок, на вершині якого

спостерігаються дві плоскі фасетки. Одна складає кут 70° з симетричною двійниковою границею та відповідає орієнтації $\{411\}_1/\{012\}_2$, або площині $(210)_{\text{ГСВ}}$. Друга фасетка складає кут 26° з боковою стороною двійника. Орієнтація фасетки $\{522\}_1/\{144\}_2$ або площина $(130)_{\text{ГСВ}}$. Кут між фасетками $\approx 90^{\circ}$.

Для температури відпалювання 1150°C , як і для температури 1120°C , на вершинах двійникових прошарків в зернах полікремнію спостерігаються фасетки, які орієнтовані під кутом 35° до симетричної двійникової границі (орієнтація фасеток $\{511\}_1/\{111\}_2$, або $(120)_{\text{ГСВ}}$). Крім того, на вершині двійника, що зображений на рис. 4, спостерігаються три фасетки. Перша розташована під кутом 90° до бічної грані двійника. Ця фасетка відповідає орієнтації $\{211\}_1/\{211\}_2$, або $(010)_{\text{ГСВ}}$. Це друга по щільності пакування площина ГСВ, яка має назву асиметричної двійникової границі. Далі, під кутом 90° до першої фасетки розташована друга фасетка, яка паралельна симетричним двійниковим границям (боковим границям двійникового прошарку), які мають орієнтацію $\{111\}_1/\{111\}_2$ ($(100)_{\text{ГСВ}}$). Під кутом 90° як до цієї фасетки, так і до бокової грані двійника, розташована фасетка $\{111\}_1/\{111\}_2$ (або $(100)_{\text{ГСВ}}$).

Таким чином видно, що за різних температур відпалювання на вершинах двійникових прошарків спостерігаються різні типи фасеток. При цьому зменшення температури призводить до збільшення типів фасеток.

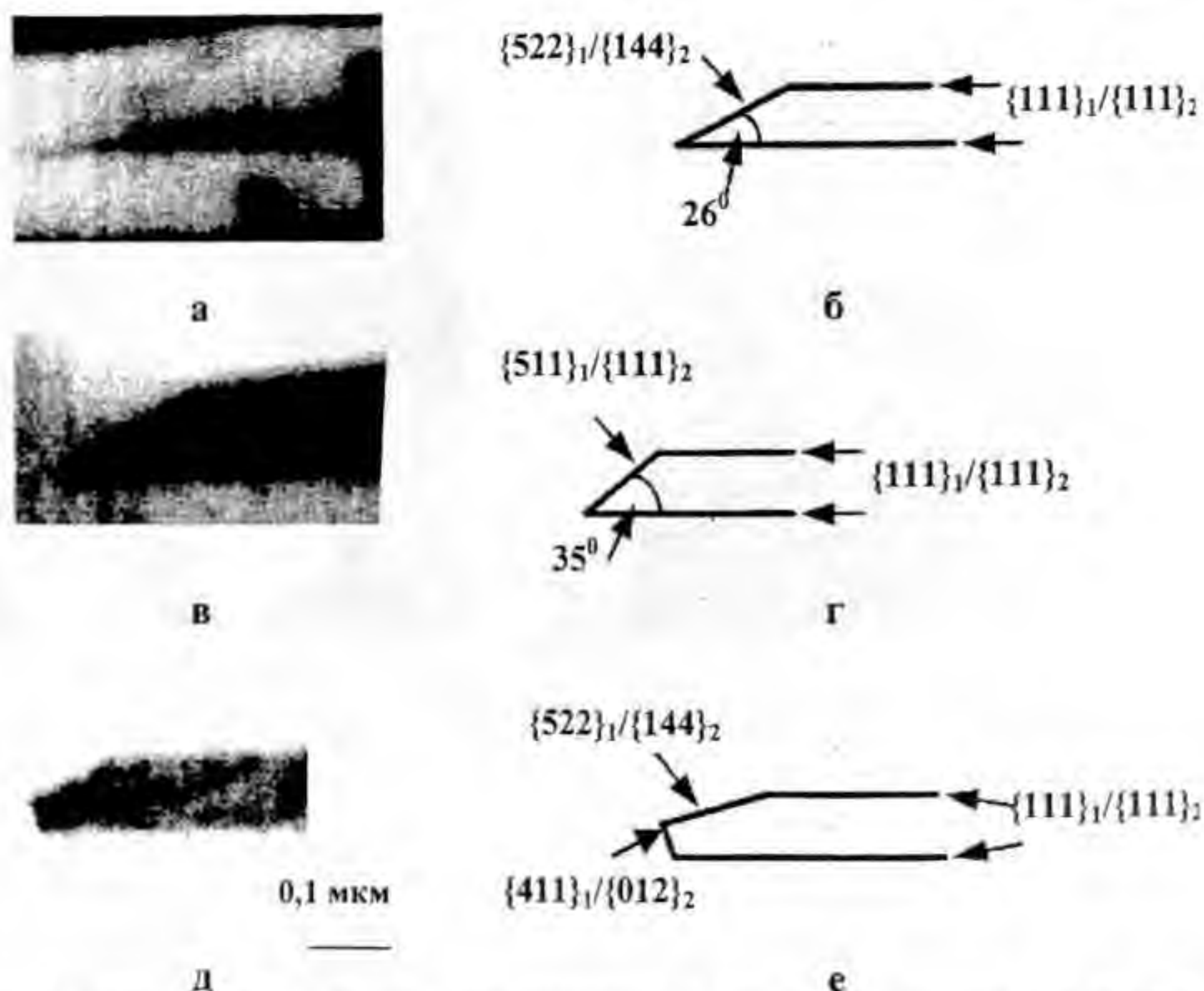


Рис. 3. Мікрофотографії двійникових прошарків в зернах полікремнію (а,в,д) та їх схематичні зображення (б,г,е).

При 1150°C співіснують два типа фасеток: $(120)_{\text{ГСВ}}$ та $(010)_{\text{ГСВ}}$. У випадку температури 1120°C мають місце три види фасеток: $(130)_{\text{ГСВ}}$, $(120)_{\text{ГСВ}}$. Подібне збільшення типів фасеток при зменшенні температури відпалювання спостерігається при фасетуванні двійникових границь в металах [7-11]. Це пов'язано з тим, що границі зерен мають спеціальну структуру та властивості в обмеженому інтервалі температур. При зростанні температури кількість спеціальних границь зерен зменшується [3,7-11]. Чим щільність пакування площини границі менша, тим вища енергія границі та нижче температури, при яких має місце теплове впорядкування границі. За високих температур існують тільки фасетки, які мають найбільшу щільність вузлів, що співпадають, і енергія яких найнижча. При зниженні температури кількість рівноважних фасеток поступово зростає, включаючи фасетки зі все меншою щільністю вузлів, що співпадають.

Наявність різних типів фасеток на вершинах двійникових прошарків навіть за однієї температури відпалювання обумовлено наявністю різних типів границь зерен в полікремнієвій плівці. В процесі міграції границь зерен за умов відпалювання має місце

розщеплення міжзеренних границь, яке супроводжується виникненням і зростанням двійникових прошарків в зернах. Рушійна сила процесу розщеплення границь обумовлена зменшенням сумарної зернограницної енергії [3]. Це відбувається завдяки заміні границь з високою питомою енергією низькоенергетичними границями.

Висновки

Виконані електронно-мікроскопічні дослідження показали:

1. На вершинах двійникових прошарків в зернах полікремнієвих плівок спостерігаються наступні типи фасеток: $\{211\}_1/\{211\}_2$, або $(010)_{\text{ГСВ}}$; $\{511\}_1/\{111\}_2$, або $(120)_{\text{ГСВ}}$; $\{522\}_1/\{144\}_2$, або $(130)_{\text{ГСВ}}$; $\{411\}_1/\{012\}_2$, або $(210)_{\text{ГСВ}}$.
2. Кількість типів фасеток зменшується зі зростанням температури відпалювання.
3. Фасетки $(130)_{\text{ГСВ}}$, $(120)_{\text{ГСВ}}$ та $(210)_{\text{ГСВ}}$ мають місце для температури 1120°C ; фасетки $(120)_{\text{ГСВ}}$ та $(010)_{\text{ГСВ}}$ спостерігаються при температурі 1150°C .

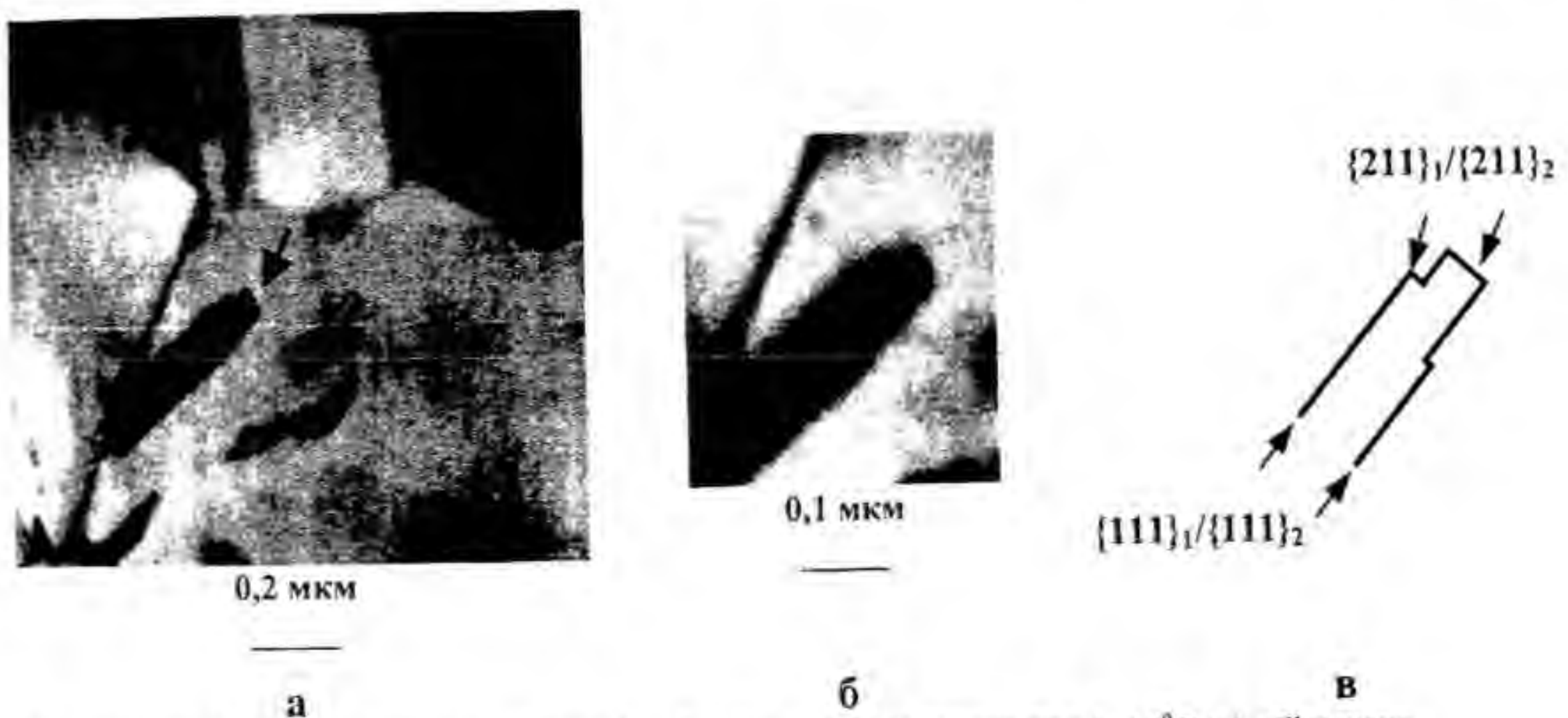


Рис. 4. Фрагмент мікроструктури полікремнієвої плівки, що відпалена при 1150°C (а), збільшене зображення двійникового прошарку в зерні полікремнію (б) та його схематичне зображення (в).

Список використаних джерел

1. Копецкий Ч.В., Орлов А.Н., Фионова Л.К. Границы зерен в чистых материалах. - М.: Наука, 1987. - 175 с.
2. Дефекты в кристаллах полупроводников. - М.: Мир, 1969. - 376 с.
3. Страумал Б.Б. Фазовые переходы на границах зерен. Фасетирование, специальные и неспециальные границы, потеря огранки. Учебное пособие. - М.: МИСиС, 2004. - 65 с.
4. Rath J.K. Low temperature polycrystalline silicon: a review on deposition, physical properties and solar cell applications // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. - 2003. - 76, № 4. - P. 431-487.
5. Michelutti L., Chovet A., Stoemenos J., Terrat J.-M., Ionescu M.A. Polycrystalline silicon films for microsystems: correlation between technological parameters, film structure and electrical properties // Thin Solid Films. - 2001. - 401. - P. 235-242.
6. Находкин М., Кулиш М., Родіонова Т. Фасетчаста будова границь зерен в полікремнієвих плівках різних структурних модифікацій // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Радіофізика та електроніка. - 2007. - Вип. 10. - С. 51-54.
7. Находкин Н.Г., Кулиш Н.П., Родіонова Т.В. Вплив відпалювання на двійникові границі в рівноосьових полікремнієвих плівках // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки. - 2006. - Вип. № 1. - С. 291-296.
8. Straumal B.B., Rabkin E., Sursaeva V.G., Gorukhova A.S. Faceting and migration of twin grains boundaries in zinc // Z. Metallkd. - 2005. - 96. - P. 161-166.
9. Straumal B.B., Polyakov S.A., Bischoff E., Mittemeijer E.J. Grain boundary faceting of $\Sigma 3$ coincidence misorientation in copper // Z. Metallkd. - 2004. - 95. - P. 939 - 944.
10. Straumal B.B., Polyakov S.A., Mittemeijer E.J. Temperature influence on the faceting of $\Sigma 3$ and $\Sigma 9$ grain boundaries in Cu // Acta Mater. - 2006. - 54. - P. 167-172.
11. Straumal B.B., Semenov V.N., Kogtenkova O.A., Watanabe T., Pokrovsky Talapov Critical Behavior and Rough-to-Rough Ridges of the $\Sigma 3$ Coincidence Tilt Boundary in Mo // Phys. Rev. Letters. - 2004. - 92, № 19. - P. 196101-1 - 196101-4.
12. Tsurekawa S., Kido K., Watanabe T. Measurements of potential barrier height of grain boundaries in polycrystalline silicon by Kelvin probe force microscopy // Philos. Mag. Lett. - 2005. - 85, № 1. - P. 41 - 49.
13. Nakhodkin N.G., Rodionova T.V. Formation of different types of polysilicon film structures and their grain growth under annealing // Phys. Stat. Sol.(a). - 1991. - 123, № 2. - P. 431-439.

Надійшла до редколегії 2.06 2010 р.

УДК 519.9

Нечипорук О.Ю., к. ф.-м. н. доц., Скрипка С.Л.,
інж., Чирков О.О., студ.

Перестроювання частоти метаструктур

Досліджено АЧХ масивів метаструктур в залежності від кількості метаструктур в діапазоні частот (0,1-18 ГГц). Показано можливість створення фільтру на основі метаматеріалу з використанням фериту, що перестроюється.

Ключові слова: метаструктура, перестроювання частоти, ферит.

*E-mail: ironloriin20@rambler.ru

Статтю представив д.ф.-м.н. Данилов В. В.

1. Вступ

В останні роки почали активно вивчатися штучні матеріали, які мають резонансний відгук на зовнішнє збуджуюче поле. Ці матеріали утворюються періодичним розташуванням металевих елементів певної геометричної форми на діелектричному шарі, характерні розміри цих елементів значно менші за довжину хвилі [1]. Резонансна частота відгуку на зовнішнє збуджуюче поле залежить від геометричної конфігурації і фізичних властивостей окремих елементів. Ці елементи певним чином реагують на зовнішнє електромагнітне поле вносячи зміни у індуковане у діелектричному шарі поле.

Найпростішим елементом може бути металеве кільце. При внесенні його у зовнішнє магнітне поле (поляризація якого є перпендикулярним до площини кільця) в ньому будуть наводитись мікроструми, що, в свою чергу, призведуть до утворення власного магнітного поля, напрям якого буде протилежний до напрямку зовнішнього збуджуючого поля, і сумарне індуковане поле змінить своє значення [2]. При цьому ефективна магнітна проникність стає від'ємною.

Ще одним різновидом метаматеріалів можуть бути періодично розташовані металеві стрижні розділені діелектричним прошарком [3].

Ефективна магнітна проникність таких матеріалів зазвичай змінюється від частоті таким чином, як показано на рис. 1.

A. Y. Nechiporuk, Ph.D., S. L. Skrypka*, eng.,
O.O.Chyrvkov, stud.

Metamaterials frequency tuning

The metamaterial arrays electrodynamic characteristics in the frequency range of 0.1-18 GHz where investigated in this article. The possibility of resonant frequency tuning ferrite metamaterial creation also studied.

Key Words: a metastructure, frequency reorganisation, ferrite.

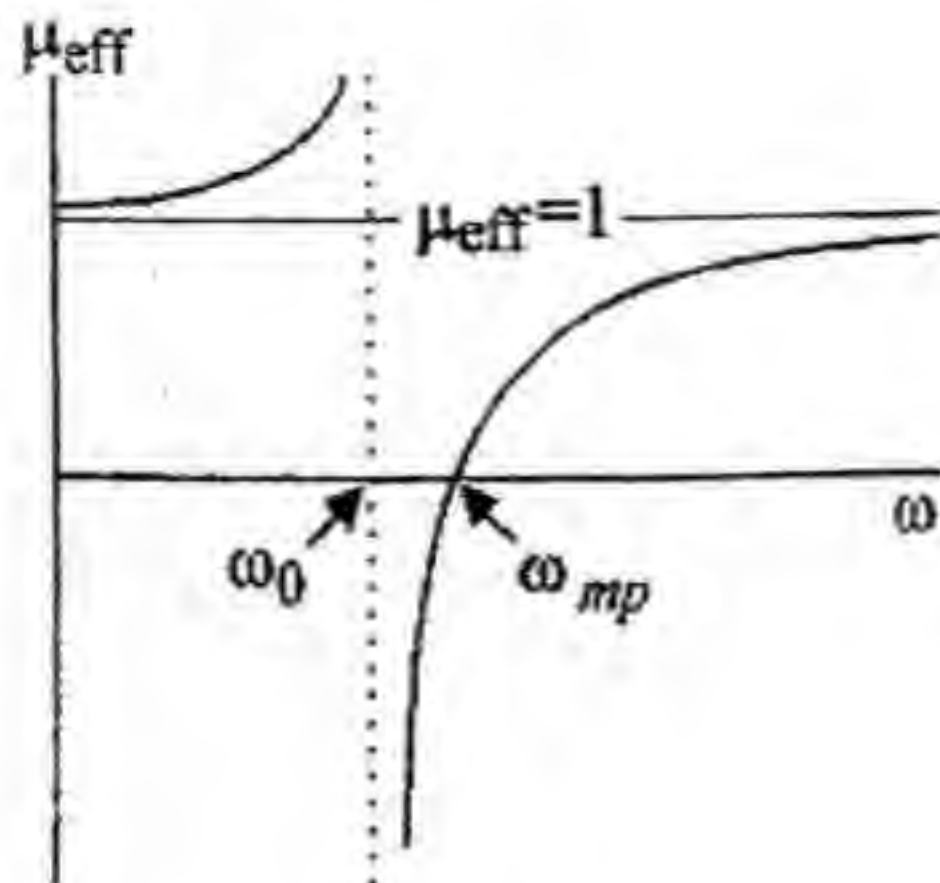


Рис. 1. Частотна залежність ефективної магнітної проникності.

Саме на частотах, що відповідають $\omega_0 < \omega < \omega_{mp}$, де ω_{mp} - магнітна плазмова частота, ω_0 - резонансна частота, ефективна магнітна проникність стає від'ємною.

В останні роки, почали активно досліджуватись мета матеріали, що виготовлені не з об'ємних елементів, а в планарному вигляді методом друкованих плат. В [4] проведено чисельне моделювання проходження плоскої електромагнітної хвилі через різновид планарного метаматеріалу. Елементи, що утворювали метаматеріал, зображено на рис. 2 - це металеві кільця з параметрами: a - відстань

між елементами водній площині, r - внутрішній радіус резонатора, d - відстань між внутрішнім і зовнішнім кільцем елемента, C_0 - швидкість світла у вакуумі, C - ширина металевої смужки, l - відстань між шарами, σ - провідність металу.

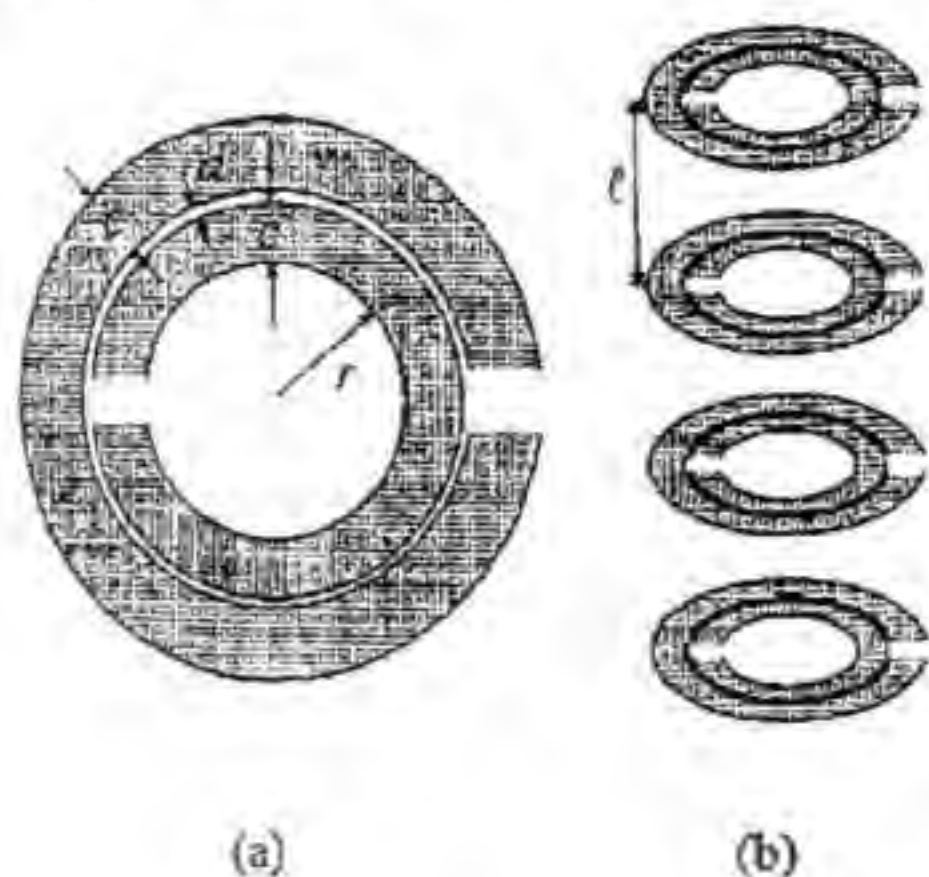


Рис. 2. Окремий елемент метаматеріалу і його періодичне розташування.

У полі падаючої хвилі в розімкненому кільцевому резонаторі наводяться мікроструми, тому для наближеного опису його частотних залежностей зазвичай використовують наближення звичайного коливального контуру з послідовно ввімкненими ємністю C і індуктивністю L та опором R [5].

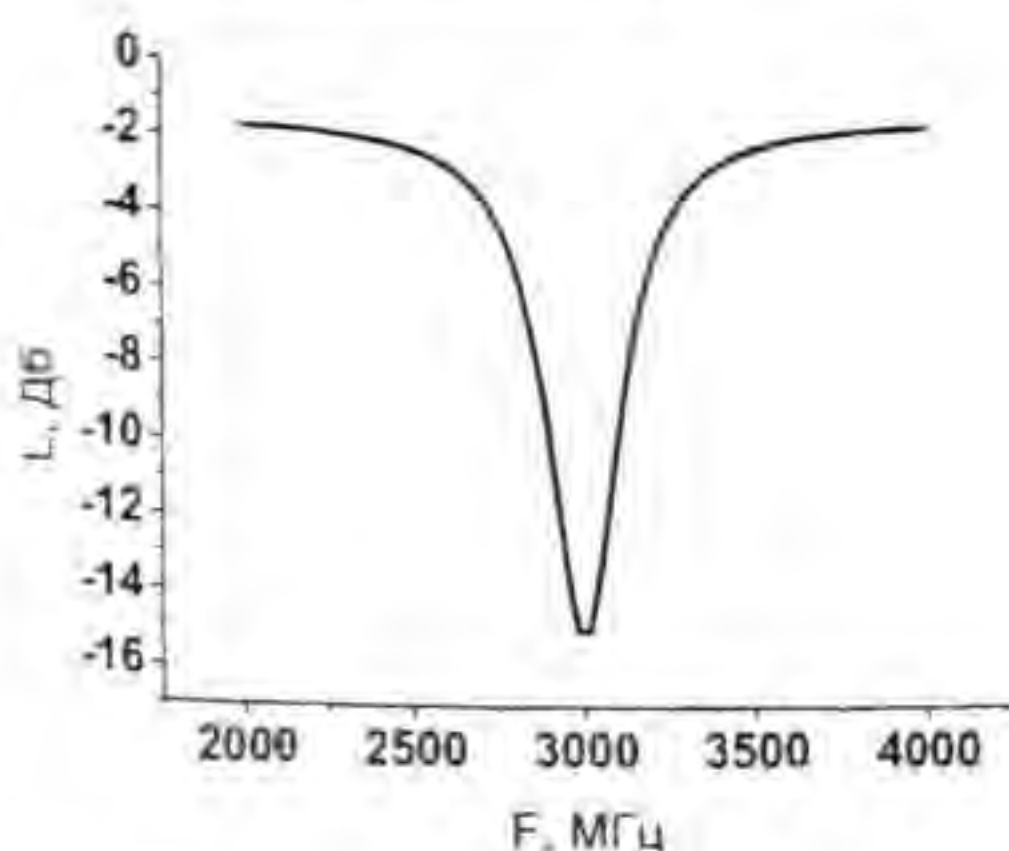


Рис. 3. АЧХ метаструктури, складалася з п'яти елементів SRR в діапазоні частот 2-4 ГГц.

Для мета структури такого типу з геометричними параметрами, що

відповідають значенням $r_1 = 5$ мм, $r_2 = 3.25$ мм, $g = 1$ мм, $w = 0.5$ мм, резонансна частота $\omega_0 = 3$ ГГц. АЧХ цієї мета структури розраховане за допомогою FDTD методу наведено на рис.3.

Метаматеріали вже знайшли застосування в якості лінз і систем, які можуть приховати певний об'єкт на певній частоті. Крім цього, як показують певні експериментальні результати, можливе їх використання в якості фільтруючого елемента для надвисокочастотних ліній передач [6]. Але єдиним їх недоліком є стаціонарна резонансна частота.

Оскільки дослідження резонансних характеристик метаструктур є актуальною задачею, то метою даної роботи є дослідження масивів метаструктур та визначення можливості перестроювання резонансної частоти мета структур, створених з використанням феритових матеріалів за допомогою зовнішнього магнітного поля.

2. Результати

2.1. Дослідження 3D масивів з метаструктур

Дослідження амплітудно-частотних характеристик проводились на панорамному вимірювачі КСХН НР 8620 в діапазоні частот від 0.1 до 18 ГГц. Схема вимірювальної установки складалася з: індикатора КСХН та ослаблення, НВЧ генератора (0.1-18 ГГц), напрямлених відгалужувачів та вимірювальної комірки.

Метаматеріали були створені на основі фальшованого стеклотекстоліту та дюрюїду (діелектрична проникність $\epsilon = 2.2$) товщиною 1мм методом фотолітографії. Параметри були обрані наступним чином: зовнішній радіус $r_1 = 5$ мм, внутрішній радіус становив $r_2 = 2.75, 3, 3.25$ мм, ширина розриву в кільцевих резонаторах $g = 1$ мм, ширина доріжок $w = 0.5$ мм.

Вимірювальна комірка складається з мікросмужкової лінії, що навантажена на метаматеріал. Таким чином утворювався смуго-загороджувачий фільтр з деякою АЧХ, яка відповідає резонансній АЧХ самого метаматеріалу. Цікаво було б з'ясувати, як змінюється характеристика пропускаючого фільтру при застосуванні масивів з метаструктур.

Дослідження АЧХ проводились в залежності від кількості метаструктур в діапазоні частот (0.1-18 ГГц).

На рис.4. показано АЧХ масиву із метаструктур з дюрюїду, який складався з трьох мета структур, що в свою чергу складались з трьох та п'яти елементів SRR.

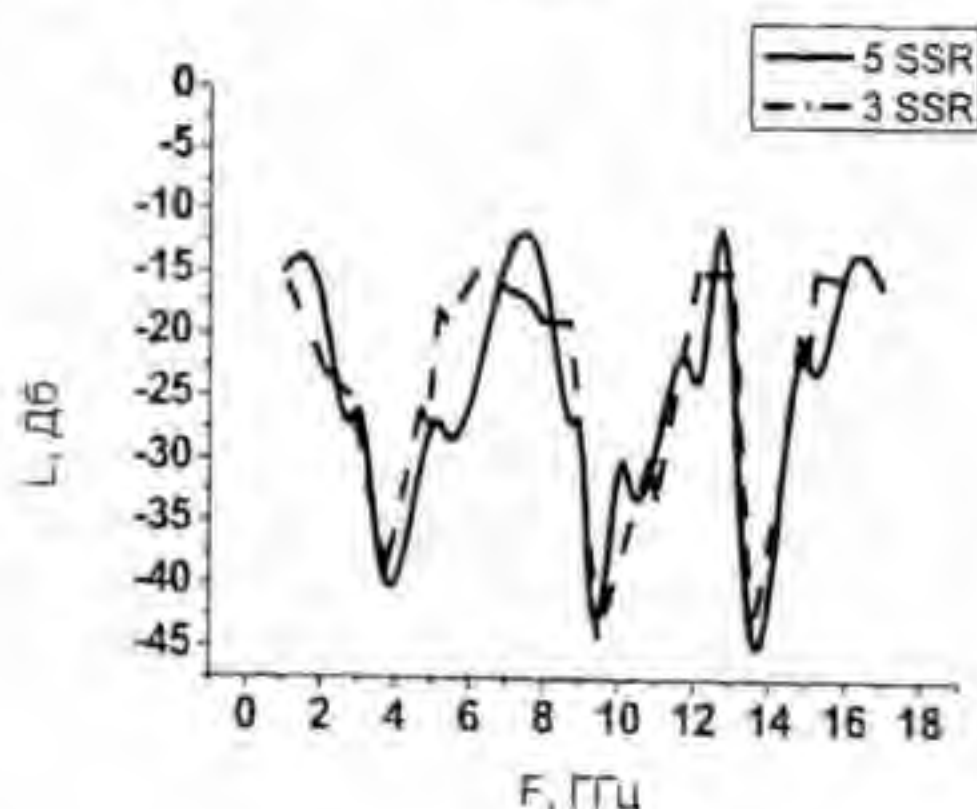


Рис. 4. АЧХ масиву із метаструктур з дюрюїду, який складався з трьох мета структур, що в свою чергу складались з трьох та п'яти елементів SRR.

Результати показали, що дані метаструктури мають три резонансні піки поглинання: 3.54, 9.2, 13.3 ГГц для структури з трьох елементів SRR, 3.75, 9.48, 13.52 ГГц для структури з п'яти елементів SRR.

Відповідно до попередніх вимірювань досліджено та зображено АЧХ масиву з трьох метаструктур з дюрюїду (2D масив), які в свою чергу складались з трьох елементів SRR та з п'яти елементів SRR відповідно. (рис.5).

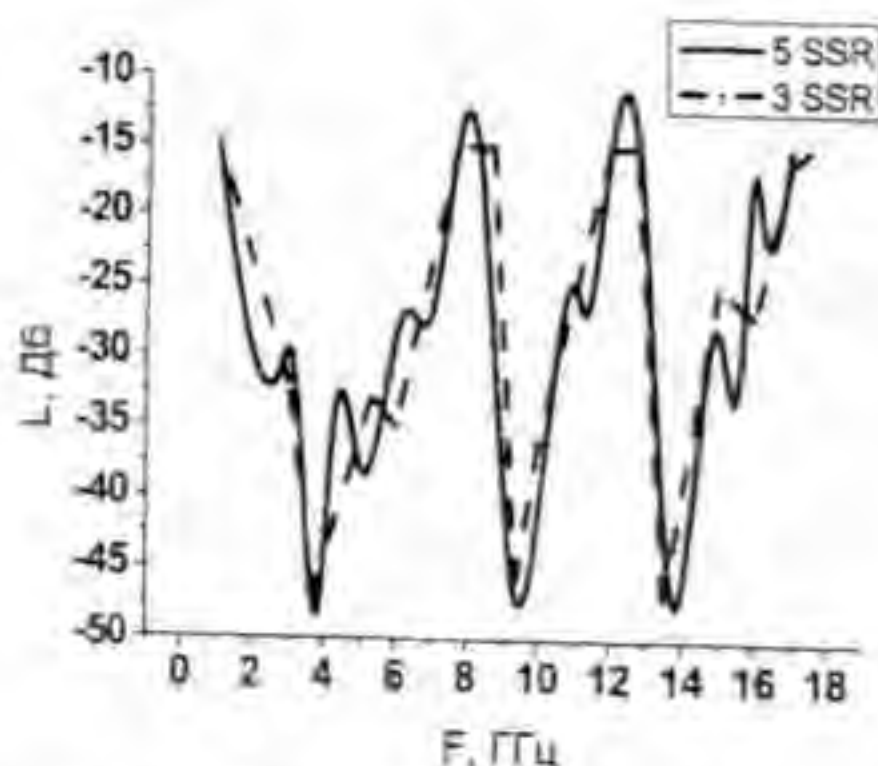


Рис. 5. АЧХ 3D масиву з трьох метаструктур, які в свою чергу складались з трьох елементів SRR та з п'яти елементів SRR відповідно в діапазоні частот 0.1-18 ГГц

Виходячи з результатів дослідження АЧХ масиву метаструктур можна сказати, що збільшення кількості метаструктур призводить до зсуву АЧХ в бік більших частот приблизно на $\Delta f = 200$ МГц, при збільшенні кількості SRR на один елемент. До того ж збільшення кількості SRR призводило до незначного уширення піку поглинання та збільшення величини поглинання (5-6 Дб) при зміні кількості SRR від мінімального до максимального значення.

2.2. Дослідження впливу фериту на метаструктуру

При проведенні експерименту було використано пластину полікристалічного ЗП алюміній-заміщеного ($4\pi M = 620$ Гс). Зовнішнє магнітне поле було спрямовано дотично до поверхні пластини вздовж напрямку поширення хвилі. На рис.6 представлено АЧХ феритового зразку з прикладеним зовнішнім полем 540 Е.

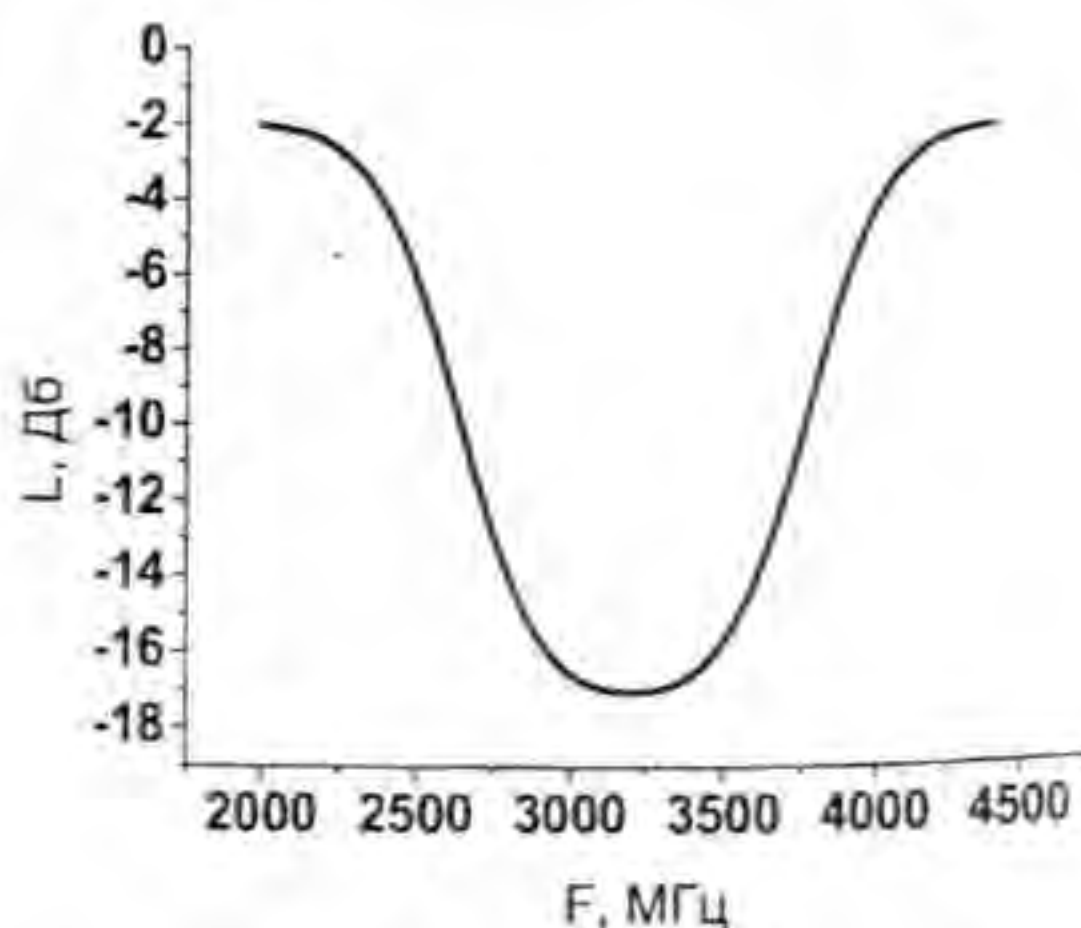


Рис. 6. АЧХ феритового зразку з прикладеним зовнішнім полем 540 Е.

Було досліджено АЧХ метаструктур, створених на основі фериту, в діапазоні 2-4 ГГц. На рис.7 показано АЧХ відповідних метаструктур без прикладеного зовнішнього поля, з прикладеним полем 270 Е та з прикладеним полем 540 Е відповідно.

З результатів видно, що в діапазоні від 2 до 3 ГГц піку поглинання власного ФМР феритової пластини не спостерігається, як не спостерігається і власний резонансний пік

метаматеріалу. До того ж треба підкреслити, що резонансний пік поглинання комплексного метаматеріалу існує навіть без прикладеного зовнішнього магнітного поля та зміщується при його збільшенні в бік високих частот. При цьому значним чином (14 Дб) змінюється величина втрат в піку загородження.

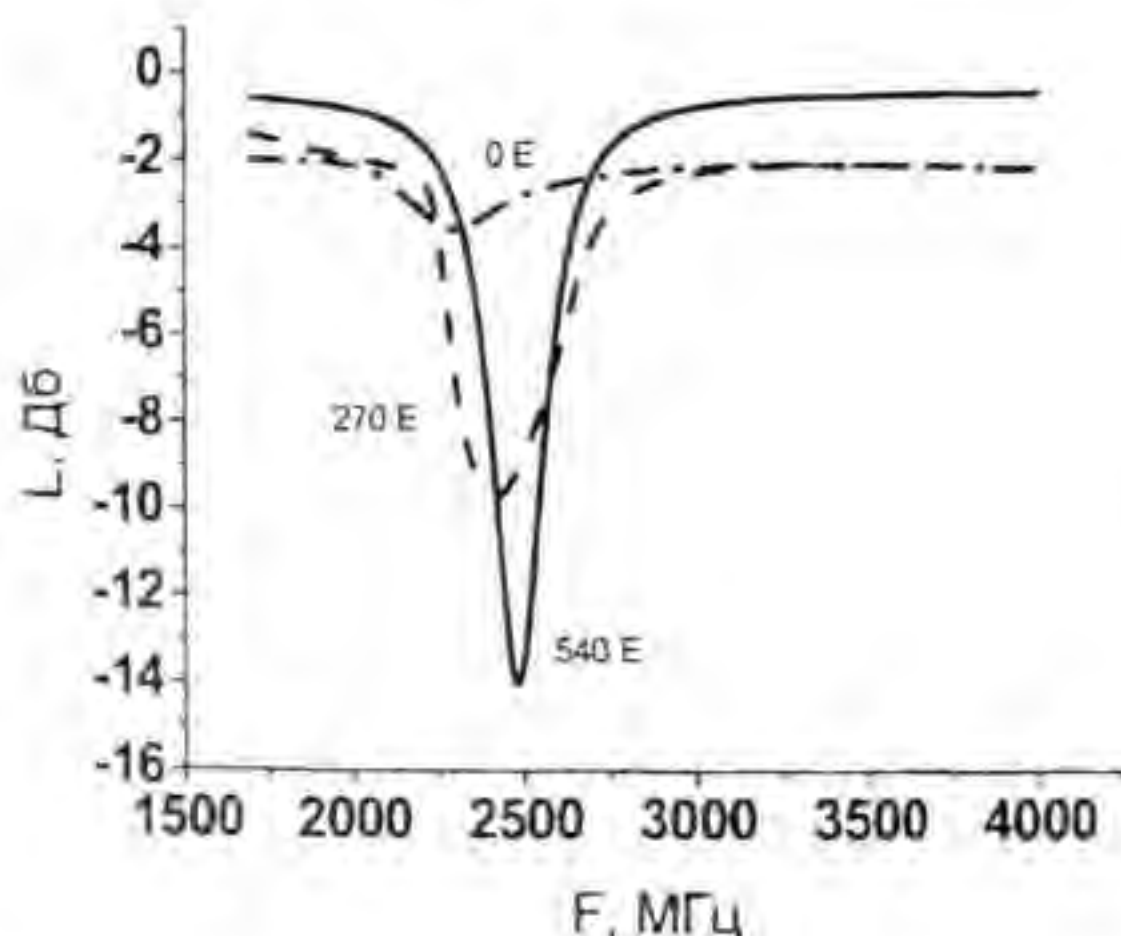


Рис. 7. АЧХ метаструктури з використанням фериту без прикладеного зовнішнього поля, з прикладеним полем 270 Е та з прикладеним полем 540 Е відповідно.

3. Висновки

Проводились дослідження АЧХ масивів метаструктур в залежності від кількості метаструктур в діапазоні частот (0.1-18 ГГц). Дослідження показали, що метаструктури на дюроді мають три резонансні піки поглинання. Виходячи з результатів дослідження АЧХ метаструктур можна сказати, що збільшення кількості метаструктур призводить до зсуву АЧХ в бік більших частот приблизно на $\Delta f = 200$ МГц. До того ж збільшення кількості SRR призводило до незначного уширення піку поглинання та збільшення величини поглинання (5-6 Дб) при зміні кількості SRR від мінімального до максимального значення.

З'ясовано, що метаструктури на основі фериту змінюють резонансну частоту при зміні величини зовнішнього магнітного поля. Таким чином, можна стверджувати, що на основі таких метаструктур можна створювати режекторні фільтри, що перестроюються.

Список використаних джерел

1. Pendry J. B., Holden A. J., Robbins D. J., Stewart W. J. Low frequency plasmons in thin-wire structures. // J. Phys. – 1998. - P. 4785–4809.
2. Aydin K., Bulu I., Guven K., Kafesaki M., Soukoulis C., Ozbay E. Investigation of magnetic resonances for different split-ring resonator parameters and designs. // New journal of physics. – 2005. - P. 1201.
3. Pendry J. B., Holden A. J., Robbins D. J., Stewart W. J. Low frequency plasmons in thin-wire structures. // J. Phys. – 1998. - P. 4785–4809.
4. Kafesaki M., Tsiapa I., Katsarakis N., Koschny Th., Soukoulis C. M., Economou E. N. Left-handed metamaterials: The fishnet structure and its variation. // Phys. Rev. – 2007. – 235114.
5. Zhou J., Koschny Th., Kafesaki M., Soukoulis C. M., Negative refractive index response of weakly and strongly coupled optical metamaterials // Phys. Rev. – 2009. - P. 035109.
6. Soukoulis C. M., Koschny Th., Zhou J., Kafesaki M., Economou E. N., Magnetic response of split-ring resonators at terahertz frequencies // Phys. Stat. Sol. – 2007. - P. 1181-1187.

Надійшла до редколегії 27.04.10

УДК 537.8, 621.272.832.01

Обелець О.К.^{*}, студ.,
Прокопенко О.В.^{**}, канд. фіз.-мат. наук

Мікрохвильові властивості вищих мод чвертьхвильового резонатора поверхневої електромагнітної хвилі

Вперше розглянуто мікрохвильові властивості вищих мод чвертьхвильового резонатора поверхневої електромагнітної хвилі (РПХ) (залежність власних частот та добротностей резонатора від його геометричних розмірів та електрофізичних параметрів діелектричних підкладок). Показано, що вплив електрофізичних параметрів діелектричних підкладок на мікрохвильові властивості вищих мод РПХ слабкіший, ніж для випадку основної моди. Як результат, для збільшення власної добротності вищих мод РПХ необхідно застосовувати діелектрики з більшою діелектричною проникністю, ніж у випадку основної моди РПХ.

Ключові слова: поверхнева хвиля, мікрохвильовий резонатор, власна частота, власна добротність.

Obeleets O.K.^{*}, stud.,
Prokopenko O.V., Ph. D. (Physics & Mathematics)

Microwave properties of higher modes of surface electromagnetic wave resonator

For the first time the microwave properties of higher modes of quarter-wave surface electromagnetic wave resonator (SWR) (the dependence of eigen frequencies and unloaded quality (Q-) factors on resonator sizes and electrical parameters of dielectric substrates) are investigated. The influence of electrical parameters of dielectric substrates on microwave properties of higher modes of SWR is shown to be weaker than in the case of fundamental mode of SWR. As result, in order to increase the unloaded Q-factor of the higher modes of SWR it is necessary to employ dielectrics with higher dielectric permittivity than in the case of the fundamental mode.

Keywords: surface electromagnetic wave, microwave resonator, eigen frequency, unloaded Q-factor.

^{*}E-mail: o.obeletz@gmail.com, ^{**}E-mail: ovp@univ.kiev.ua
Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Данилов В.В.

Вступ

Резонатори поверхневої електромагнітної хвилі (РПХ) (рис. 1) мають помітні переваги порівняно з іншими типами мікрохвильових резонаторів [4–12]. Завдяки своїм унікальним властивостям, у першу чергу, наявності значної однорідності розподілу мікрохвильового струму для фундаментальної моди основного класу коливань, РПХ є зручною системою для побудови на його основі пристроїв з джозефсонівськими контактами [4–5, 7–8, 12]. Останнім часом РПХ також успішно застосовується при дослідженні комплексного показника заломлення рідин та твердих діелектриків [6, 10–11], є спроби застосувати РПХ в якості бази для розробки мікрохвильових пристроїв на основі магнітних наноструктур [18].

Широкомасштабне впровадження РПХ як базового елемента для різноманітних активних та пасивних пристроїв сучасної мікрохвильової електроніки стримується тим, що на сьогоднішній день, з одного боку, відсутній достатньо швидкий алгоритм чисельного

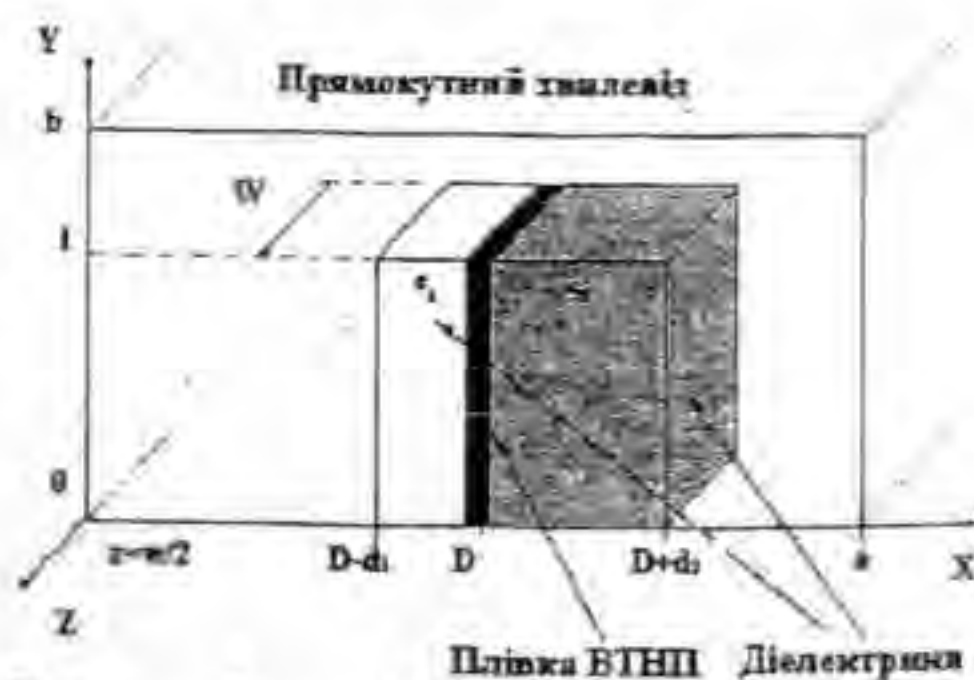


Рис. 1 Схематичне зображення чвертьхвильового ВТНП резонатора поверхневої електромагнітної хвилі в прямокутному хвилеводі

розрахунку мікрохвильових властивостей РПХ (складність і, відповідно, недостатньо висока швидкість існуючого алгоритму пов'язана у першу чергу з тим, що РПХ є відкритою (або майже відкритою) електродинамічною системою; помітне покращення алгоритму розрахунку було

проведено у [13]). З іншого боку, фактором обмежуючим широке застосування РПХ є той факт, що у реальних системах, як правило, використовуються лише мікрохвильові властивості основної моди півхвильових РПХ. Півхвильові РПХ мають більші геометричні розміри, ніж чвертьхвильові РПХ (це зручно у 8-мм та у більш короткохвильових діапазонах) та більшу власну добротність, оскільки півхвильовий РПХ віддалений від стінок прямокутного хвильоводу, що призводить до зменшення омичних втрат у цих стінках [6, 9]. Разом з тим теоретичний аналіз півхвильового РПХ є складнішим за теоретичний аналіз чвертьхвильового РПХ, проблематичним також є порівняння відповідних даних фізичного та модельного експериментів, оскільки у фізичному експерименті резонатор може розташовуватись під довільним кутом до широкої стінки хвильоводу, а врахування цієї обставини у модельному експерименті є наближенням і призводить до значного збільшення часу розрахунку.

Враховуючи вище викладене, метою цієї роботи є теоретичний аналіз мікрохвильових властивостей вищих мод чвертьхвильового РПХ та порівняння одержаних результатів з аналогічними результатами, отриманими для основної моди РПХ. У роботі безпосередньо досліджується поведінка власних частот основного класу коливань РПХ від його поздовжнього розміру w та залежності нормованих власних частот та добротностей основної та вищих мод основного класу коливань РПХ від діелектричної проникності є діелектричних підкладок.

Теорія

Теоретичний аналіз чвертьхвильового РПХ з розмірами $l \times w$ (l – поперечний розмір, w – поздовжній розмір) у регулярному прямокутному хвильоводі з розмірами $a \times b$ (рис. 2) проводився за допомогою методу часткових областей (МЧО) [1–3, 13–17]. Стандартна реалізація МЧО недостатньо враховує особливості електромагнітних полів (ЕМП) поблизу від геометричних сингулярностей [2–3, 13–17], тому у роботі використовувався МЧО з особливостями на ребрі, оптимізований для розрахунку мікрохвильових властивостей чвертьхвильового РПХ [13].

Загальний підхід до теоретичного аналізу чвертьхвильового РПХ за допомогою МЧО наведено у роботах [4–12], тому далі зосередимо

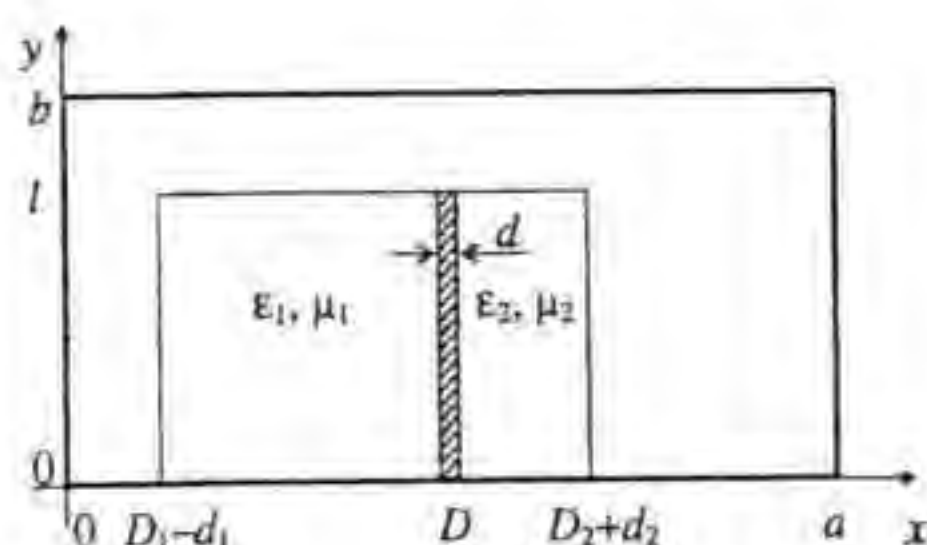


Рис. 2 Поперечний переріз прямокутного хвильоводу з чвертьхвильовим резонатором поверхневої хвилі

увагу лише на тих особливостях теоретичного аналізу РПХ, які виникають при врахуванні особливостей ЕМП поблизу від геометричних сингулярностей, і врахування яких дозволяє підвищити ефективність чисельного алгоритму розрахунку власної частоти та добротності резонатора.

Задача про чвертьхвильовий РПХ розглядається у два етапи. Спочатку розглядається задача про нескінченно довгий резонатор (поздовжній розмір РПХ $w \rightarrow \infty$), який розташовано у прямокутному хвильоводі з відомим поперечним перерізом (рис. 2). Потім враховується скінченність поздовжнього розміру w резонатора.

Для спрощення, врахування особливостей ЕМП РПХ проводилось тільки у поперечному перерізі хвильоводу з резонатором (див. рис. 2). У роботі [13] було показано, що цього досить для суттєвого покращення швидкодії та/або точності чисельного алгоритму розрахунку власної частоти фундаментальної моди чвертьхвильового РПХ. Природно вважати, що це наближення є зручним і для розрахунку власної добротності РПХ.

На рис. 2 геометричним сингулярностям відповідають метало-діелектричні ребра при $x = D_{1,2}$, $y = l$ та діелектричні ребра при $x = D_{1,2} \mp d_{1,2}$, $y = l$; $D_{1,2} = D \mp d/2$. Поблизу від цих ребер ЕМП будь-якої моди РПХ повинні поводити себе наступним чином:

при $x \rightarrow D_1$, $y = l$:

$$E_x \sim |x - D_1|^{\alpha_1}, H_x \sim |x - D_1|^{\beta_1};$$

при $x \rightarrow D_2$, $y = l$:

$$E_x \sim |x - D_2|^{\alpha_2}, H_x \sim |x - D_2|^{\beta_2};$$

при $x \rightarrow D_1 - d_1$, $y = l$:

$$E_x \sim |x - D_1 + d_1|^{\alpha_1}, H_x \sim |x - D_1 + d_1|^{\beta_1};$$

при $x \rightarrow D_2 + d_2$, $y = l$:

$$E_x = |x - D_2 - d_2|^{p_2}, \quad H_x = |x - D_2 - d_2|^0, \quad (1)$$

де

$$\rho_{1,2} = \frac{2}{\pi} \arccos \left(\frac{1 - \varepsilon_{1,2}}{2\varepsilon_{1,2} + 1} \right), \quad \zeta_{1,2} = \frac{2}{\pi} \arctg \sqrt{1 + 2\varepsilon_{1,2}}$$

Для спрощення в (1) припускається, що діелектричні підкладки РПХ виготовлені з немагнітних діелектриків ($\mu_1 = \mu_2 = 1$).

Для врахування особливостей ЕМП на границі $y = l$ було введено нові функції $E_x^{(1,2)}(x)$, $E_z^{(1,2)}(x)$, $H_x^{(1,2)}(x)$, $H_z^{(1,2)}(x)$, де координати x , визначені у площині $y = l$ (єдиний для всіх функцій множник $e^{i\beta z}$, де β – стала поширення власної хвилі, опускається):

$$\begin{aligned} E_x^{(1)}(x) &= \sum_{j=1} C_{1j} \varphi_{x1j}(x), \quad E_z^{(2)}(x) = \sum_{k=1} C_{2k} \varphi_{z2k}(x), \\ H_x^{(1)}(x) &= \sum_{j=1} D_{1j} \psi_{x1j}(x), \quad H_z^{(2)}(x) = \sum_{k=1} D_{2k} \psi_{z2k}(x), \\ E_z^{(1)}(x) &= \sum_{j=1} C_{1j} \varphi_{z1j}^e(x) + \sum_{j=1} D_{1j} \psi_{z1j}^e(x), \\ H_z^{(1)}(x) &= \sum_{j=1} C_{1j} \varphi_{z1j}^h(x) + \sum_{j=1} D_{1j} \psi_{z1j}^h(x), \\ E_z^{(2)}(x) &= \sum_{k=1} C_{2k} \varphi_{z2k}^e(x) + \sum_{k=1} D_{2k} \psi_{z2k}^e(x), \\ H_z^{(2)}(x) &= \sum_{k=1} C_{2k} \varphi_{z2k}^h(x) + \sum_{k=1} D_{2k} \psi_{z2k}^h(x). \end{aligned} \quad (2)$$

Функції $\varphi_{x\theta}(x)$, $\psi_{x\theta}(x)$, $\theta = \{1j; 2k\}$ у (2) визначаються наступним чином:

$$\begin{aligned} \varphi_{x1j}(x) &= \\ &= \begin{cases} (1 - u_1)^{\rho_1} C_{2j}^{p_1+0.5}(u_1), & 0 \leq x \leq D_1 - d_1 \\ (u_1 - 1)^{\rho_1} (1 + u_2)^{\zeta_2} P_j^{\zeta_2, p_1}(u_2), & D_1 - d_1 \leq x \leq D_1 \end{cases} \\ \varphi_{x2k}(x) &= \\ &= \begin{cases} (u_3 + 1)^{\zeta_2} (u_4 - 1)^{\rho_2} P_k^{\zeta_2, p_2}(u_3), & D_2 \leq x \leq D_2 + d_2 \\ (1 - u_4)^{\rho_2} C_{2k}^{p_2+0.5}(u_4), & D_2 + d_2 \leq x \leq a \end{cases} \\ \psi_{x1j}(x) &= \begin{cases} C_{2j+1}^{0.5}(u_1), & 0 \leq x \leq D_1 - d_1 \\ C_{2j}^{0.5}(u_2), & D_1 - d_1 \leq x \leq D_1 \end{cases} \\ \psi_{x2k}(x) &= \begin{cases} C_{2k}^{0.5}(u_3), & D_2 \leq x \leq D_2 + d_2 \\ C_{2k+1}^{0.5}(u_4), & D_2 + d_2 \leq x \leq a \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \text{де} \quad u_1 \equiv u_1(x) &= \frac{x}{D_1 - d_1}, \quad u_2 \equiv u_2(x) = \\ &= \frac{x - (D_1 - d_1/2)}{d_1/2}, \quad u_3 \equiv u_3(x) = \frac{x - (D_2 + d_2/2)}{d_2/2}, \end{aligned}$$

$$u_4 \equiv u_4(x) = \frac{a - x}{a - D_2 - d_2}; \quad C_n^\lambda(x) - \text{поліноми}$$

Гегенбауєра, $P_n^{\alpha, \beta}(x)$ – поліноми Якобі;

$\rho_1 = -1 + \tau_1$, $\rho_2 = -1 + \tau_4$, $\zeta_1 = -1 + \tau_2$, $\zeta_2 = -1 + \tau_3$, а $\tau_{1,2,3,4}$ – параметри сингулярності поля поблизу від ребер $x = D_1 - d_1$, $x = D_1$, $x = D_2$, $x = D_2 + d_2$ відповідно. В загальному випадку параметри сингулярності $\tau_{1,2,3,4}$ знаходяться за допомогою алгоритму, викладеного у [3, 14–17].

Використовуючи стандартні граничні умови неперервності тангенціальних складових полів при $y = l$, а також граничні умови на поверхні ідеального металу при $D_1 \leq x \leq D_2$, було одержано систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу ЕМП у кожній з часткових областей. З умови рівності нулю визначника цієї системи було знайдено сталі поширення β_n та поля власних хвиль у прямокутному хвилеводі з нескінченно довгим РПХ; $n = 1, 2, 3, \dots$

Використовуючи одержані вирази для ЕМП та раніше знайдені значення β_n , потім за допомогою стандартного МЧО було розв'язано задачу про резонатор зі скінченним повздовжнім розміром w . Було визначено вектор власних частот основного класу коливань чвертьхвильового РПХ.

До цього часу усі розрахунки проводились у наближенні відсутності втрат у системі. Для знаходження власної добротності РПХ було зроблено припущення, що втрати малі, а значить, для знаходження потужності втрат можна скористатись значеннями хвильових чисел, частот та полів, одержаних для випадку консервативної системи [1, 3]. Користуючись цим наближенням власну добротність РПХ Q_0 було записано у вигляді:

$$Q_0 = \omega_0 \frac{W_0}{P_w + P_n + P_d + P_f}, \quad (4)$$

де ω_0 та W_0 – власна циклічна частота та енергія певної моди РПХ, розраховані без урахування втрат, P_w – потужність втрат у широких стінках хвилеводу, P_n – потужність втрат у вузьких стінках хвилеводу, P_d – потужність втрат у діелектричних підкладках і P_f – потужність втрат у провідній пластині або плівці резонатора.

Потужності втрат, що входять до формули (4) були розраховані таким чином:

$$\begin{aligned}
 P_w &= \int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^b dx \operatorname{Re} p_w(x, b, z) - \\
 &\int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^b dx \operatorname{Re} p_w(x, 0, z) \\
 P_0 &= - \int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^b dy \operatorname{Re} p_n(0, y, z) + \\
 &\int_{z_1}^{z_2} dz \int_0^b dy \operatorname{Re} p_n(a, y, z) \\
 P_d &= \frac{1}{2} \omega_0 |\epsilon| \lg \delta \int_V |E|^2 dV, \\
 P_f &= \int_0^w dz \int_0^l dy \operatorname{Re} p_n(D_1, y, z) - \\
 &\int_0^w dz \int_0^l dy \operatorname{Re} p_n(D_2, y, z) - \\
 &\int_0^w dz \int_{D_1}^{D_2} dx \operatorname{Re} p_w(x, l, z),
 \end{aligned} \quad (5)$$

де V – об'єм діелектрика,

$$\begin{aligned}
 p_w(x, y, z) &= E_z(x, y, z) H_x^*(x, y, z) - \\
 &E_x(x, y, z) H_z^*(x, y, z) \\
 p_n(x, y, z) &= E_y(x, y, z) H_z^*(x, y, z) - \\
 &E_z(x, y, z) H_y^*(x, y, z) \\
 p_z(x, y, z) &= E_x(x, y, z) H_x^*(x, y, z) - \\
 &E_x(x, y, z) H_x^*(x, y, z)
 \end{aligned}$$

Знак зірочка (*) означає комплексне спряження,
 $\operatorname{Re} z$ – функція, що повертає дійсну частину від z .

Енергія ЕМП W_0 у РПХ була розрахована за формулою

$$W_0 = \frac{1}{16\pi} \int_{z_1}^{z_2} dz \int_{\Omega} dx dy [\epsilon(x, y, z) |E|^2 + |H|^2], \quad (6)$$

де E , H – комплексні амплітуди ЕМП на власній частоті $\omega = \omega_j$, $\epsilon(x, y, z)$ – функція відмінна від одиниці тільки в області діелектричних підкладок, де вона тотожно дорівнює ϵ_1 або ϵ_2 , Ω – область поперечного перерізу прямокутного хвильоводу з РПХ, $z_{1,2}$ – координати площин, які відсікають об'єм, в якому знаходиться 99% енергії ЕМП.

Використовуючи (4)–(6), було розраховано власну добротність Q_0 чвертьхвильового РПХ залежно від розмірів резонатора та діелектричних підкладок, електрофізичних параметрів

діелектричних підкладок, координати резонатора D у хвильоводі та ін.

Числовий експеримент

Числовий розрахунок власних частот $\omega_0/2\pi$ та добротності чвертьхвильового РПХ проводився за допомогою комп'ютерної програми, написаної авторами мовою C++. Розрахунки проводились для РПХ з поперечним розміром $l = 2,0$ мм. Резонатор був розташований посередині стандартного 8-мм хвильоводу: $a = 7,2$ мм, $b = 3,4$ мм, $D = 3,6$ мм. Розглядався випадок резонатора у вигляді симетричного сандвіча з двома діелектричними підкладками, кожна з яких мала товщину $d_1 = d_2 = 0,5$ мм. У ході експерименту діелектричні проникності підкладок $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$ одночасно приймали значення $\epsilon = \{1; 4; 10; 26; 40; 75; 100\}$. Під час експерименту товщина резонатора d дорівнювала 0,1 мм.

Еталонним значенням частоти $\omega_{00}/2\pi$ та добротності Q_{00} було обрано значення частоти та добротності розраховані за допомогою стандартного алгоритму МЧО, що не враховує особливостей ЕМП. При цьому кількість парціальних мод, які враховувались у кожній з часткових областей, становила $N = 10^3$, що давало змогу вважати похибку визначення частоти та добротності достатньо низькою (меншою за 1% та 5% відповідно).

Результати та їх обговорення

На рис. 3 показано залежність власних частот основного класу коливань чвертьхвильового РПХ від поздовжнього розміру резонатора w для випадку $\epsilon = 1$, $d_1 = d_2 = 0$. Залежність має типовий характер, який неодноразово був спостережений у фізичних експериментах [6, 8–11]. Розраховані абсолютні значення власних частот, показані на рис. 3, були використані для нормування значень власних частот тих же самих мод, але розрахованих вже для випадку, коли $d_1 = d_2 = 0,5$ мм, а параметр ϵ змінювався – див. рис. 4.

Як можна бачити з рис. 4 вплив діелектричних підкладок на мікрохвильові властивості вищих мод основного класу коливань РПХ слабшає зі збільшенням номера моди. Це може бути пов'язано з тим, що зі збільшенням абсолютного значення частоти моди РПХ зростає

потужність випромінювання з резонатора назовні, що призводить до послаблення взаємодії ЕМП резонатора з діелектричними підкладками. Відповідно, при збільшенні номера моди зменшується вплив діелектричних підкладок на частоту моди.

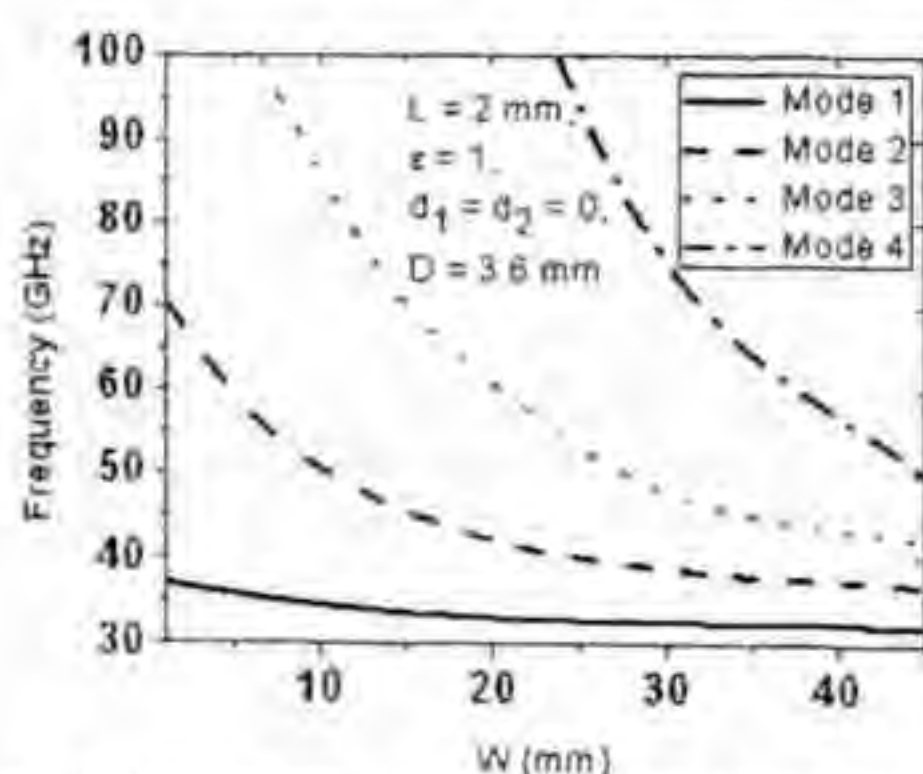


Рис. 3 Залежність власних частот основного класу коливань чвертьхвильового РПХ від поперечного розміру резонатора w при $\epsilon = 1$, $d_1 = d_2 = 0$

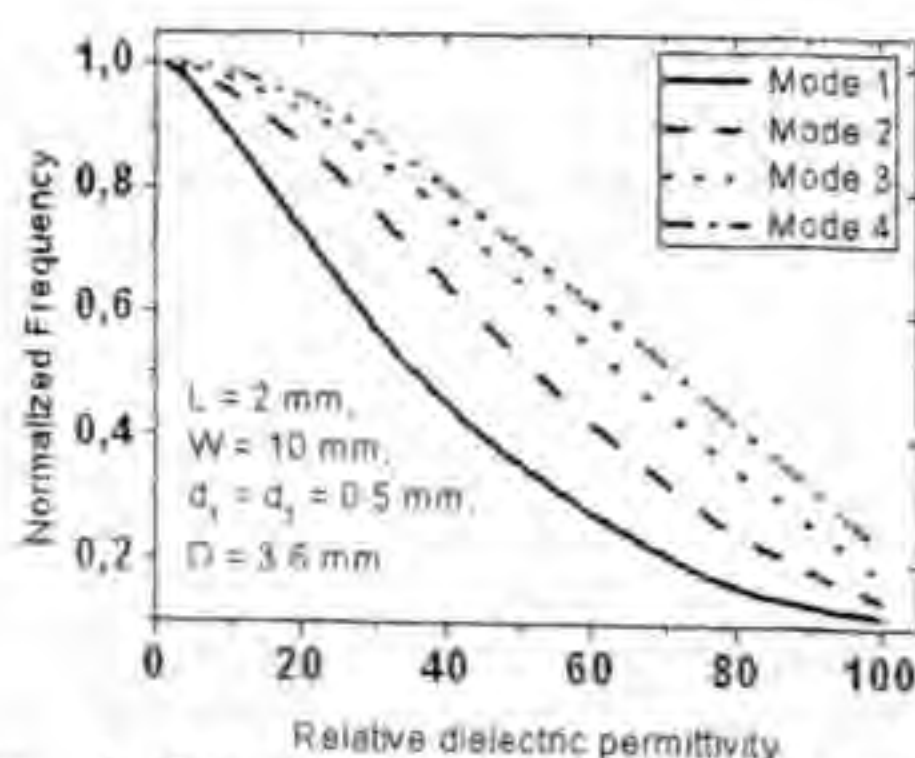


Рис. 4 Залежність нормованих значень власних частот основного класу коливань чвертьхвильового РПХ від діелектричної проникності підкладки ϵ при $d_1 = d_2 = 0.5$ мм

На рис. 5 наведено залежності нормованих власних добротностей перших чотирьох мод основного класу коливань РПХ від діелектричної проникності підкладки ϵ . Розраховані залежності мають монотонний характер, причому із зменшенням номеру моди залежність стає більш явно вираженою. Це можна пояснити

конкуренцією двох факторів: при збільшенні ϵ зростають втрати у самому резонаторі і у діелектричних підкладках, але зменшуються втрати у стінках хвильоводу.

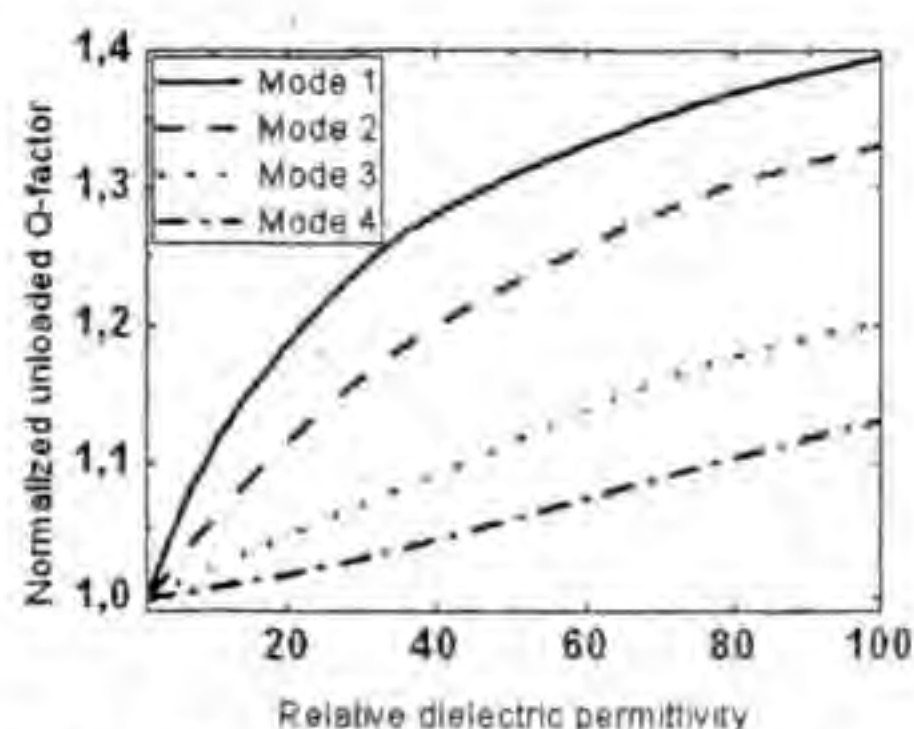


Рис. 5 Залежність нормованих власних добротностей перших чотирьох мод основного класу коливань РПХ від діелектричної проникності підкладки ϵ

Оскільки на високих частотах найбільш суттєвими є втрати у провідних елементах системи, нормована добротність буде зростати при збільшенні ϵ оскільки при цьому зменшується вихід поля, а значить і потужності втрат P_w та P_a . Разом з тим, як бачимо на рис. 5, цей вииграш у добротності стає слабко помітним для вищих мод, для яких величина P_f є настільки великою, що вище означений вииграш у добротності не призводить до суттєвої зміни її абсолютного значення.

Висновки

Таким чином, у результаті проведених досліджень показано, що вплив електрофізичних параметрів діелектричних підкладок на мікрохвильові властивості вищих мод РПХ слабкіший ніж для випадку основної моди. Як результат, для збільшення власної добротності вищих мод РПХ необхідно застосовувати діелектрики з більшою діелектричною проникністю, ніж у випадку основної моди РПХ.

Список використаних джерел

1. Вайнштейн Л.А. Электромагнитные волны. – М.: Радио и связь, 1988. – 440 с.
2. Заргано Г.Ф., Лерер А.М., Ляпин В.П., Синяевский Г.П. Линии передачи сложных сечений. – Ростов: Изд-во Ростовского ун-та.

1983. – 320 с.
3. Mumptra P., Ли С. Аналитические методы теории волноводов. – М.: Мир, 1974. – 328 с.
4. Melkov G.A., Egorov Y.V., Ivanyuta A.N., Mulyshch V.Y., Zeng H.K., Wu K.H., Juang J.Y. HTS Surface Wave Resonators // Journal of Superconductivity. – 2000. – 13, № 1. – P. 95-100.
5. Іванюта О.М., Кищенко Я.І., Прокопенко О.В., Рахша В.М. Система збудження джозефсонівських контактів у резонаторі поверхневої хвилі // Український фізичний журнал. – 2002. – 47, № 6. – С. 592-593.
6. Іванюта О.М., Прокопенко О.В., Рахша В.М., Ребіков А.І., Тягульский С.І. Вплив діелектричних підкладок на добротність напівхвильового резонатора поверхневої хвилі // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2002. – 2. – С. 328-336.
7. Ivanyuta O.M., Prokopenko O.V., Raksha V.M., Klushin A.M. Microwave detection using Josephson junction arrays integrated in a resonator // Physica Status Solidi. – 2005. – 2, № 5. – P. 1688-1691.
8. Кислюк В., Прокопенко О., Пустильник О. Про вибір матеріалу підкладки для створення резонансних детекторів міліметрового діапазону на основі ґратки джозефсонівських контактів // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: радіофізика та електроніка. – 2006. – 9. – С. 29-32.
9. Іванюта О.М., Прокопенко О.В. Методи підвищення власної добротності резонатора поверхневої електромагнітної хвилі // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2007. – 1. – С. 248-252.
10. Іванюта О.М., Прокопенко О.В. НВЧ аналізатор біоактивних рідин // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2007. – 2. – С. 248-252.
11. Іванюта О.М., Прокопенко О.В. Дослідження водних сольових розчинів за допомогою НВЧ аналізатора на основі резонатора поверхневої хвилі // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2008. – 1. – С. 180-182.
12. Іванюта О., Прокопенко О., Прокопенко Л. Особливості вольт-амперних характеристик джозефсонівських контактів, інтегрованих у резонатор поверхневої хвилі // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: радіофізика та електроніка. – 2008. – 11. – С. 20-25.
13. Прокопенко О.В. Підвищення ефективності алгоритму чисельного розрахунку власної частоти фундаментальної моди чвертьхвильового резонатора поверхневої хвилі // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2009. – 1. – С. 211-214.
14. Andersen J.B., Solodukhov V.V. Field Behavior near a Dielectric Wedge // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. – 1978. – 26, №4. – P. 598-602.
15. Brooke G.H., Kharadly M.M.Z. Field behavior near anisotropic and multielectric edges // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. – 1977. – 25, № 7. – P. 571-575.
16. Hurd R.A. The edge condition in electromagnetics // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. – 1976. – 24, №1. – P. 70-73.
17. Meixner J. The Behavior of Electromagnetic Fields at Edges // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. – 1972. – 20, №4. – P. 442-446.
18. Prokopenko O.V., Borisenko M.O., Yudina O.S. Perspectives of application of surface wave resonators for creation of spin-transfer devices // Proceedings of the Seventh International Young Scientists' Conference on Applied Physics (June 13-15, 2007). – Kyiv (Ukraine), 2007. – P. 165-166.

Надійшла до редколегії 28.05.2010

УДК 519.6 621.375+535

Овечко В.С., д.ф.-м. н., професор

Розклад фур'є-спектру радіосигналу за елементарними хвильовими пакетами

В роботі встановлено зв'язок між фур'є-спектром радіосигналу, розкладом останнього за елементарними хвильовими пакетами та вейвлет-представленням.

Ключові слова: фур'є-спектр, елементарні хвильові пакети, вейвлет-представлення

E-mail: ovs@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Левитський С.М.

Ovechko V.S., Doct. Sci., professor

Expansion of the Fourier-spectrum of the radiosignal into a series of elementary wave packets

It has been determined connection between Fourier-spectrum of the radiosignal, expansion into a series of the elementary wave packets and wavelets representation.

Key words: Fourier-spectrum, elementary wave packets representation, wavelets-transform

1. Вступ

Сучасні методи синтезу та аналізу сигналів включають в себе доволі різні методики: 1) фур'є-перетворення [1], 2) вейвлет-аналіз [2], 3) розклад за елементарними хвильовими пакетами (ЕХП) [4]. Перша методика є найбільш поширеною завдяки простоті її технічної та аналітичної реалізації. Недолік фур'є-перетворення полягає в тому, що одержаний таким чином спектр є інтегральною характеристикою сигналу і не описує його локальних властивостей. Цей недолік враховано в теорії вейвлет-аналізу. Двопараметричний розклад сигналу за параметрами «масштаб-затримка» дозволяє дослідити його локальні (в часі) характеристики. Розклад за елементарними хвильовими пакетами враховує фізичні властивості електромагнітних сигналів. В цій статті буде запропоновано розклад фур'є-спектру радіосигналу за елементарними хвильовими пакетами нульового порядку і встановлено зв'язок такого розкладу з вейвлет-представленням.

2. Методика розкладу фур'є-спектру

Розглянемо фінітний радіосигнал $f(t)$

$$f(t) = \begin{cases} f(t), & 0 \leq t \leq \tau_i \\ 0, & t < 0, t > \tau_i \end{cases} \quad (1)$$

Запишемо sin-перетворення Фур'є. Тоді спектр

$$S(t) = \int_0^{\tau_n} f(t) \sin \omega t dt \quad (2)$$

Cos - перетворення може бути розглянуто аналогічно. Розкладемо гармонічну функцію за елементарними хвильовими пакетами нульового порядку

$$f_0(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\cos 2\pi \frac{t}{\tau} - \cos 4\pi \frac{t}{\tau} \right), \tau - \text{тривалість}$$

ЕХП-імпульсу. Тоді $\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right)$ може бути

подано рядом

$$\begin{aligned} \sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) &= \sum_i^{i^{\max}} f_0\left(\frac{\pi}{\tau}(t - t_i)\right) = \\ &= \sum_{i=0}^{i^{\max}} f_0\left(\frac{\pi}{\tau}\left(t - \frac{2}{3}\tau i\right)\right), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\text{де } \omega = \frac{2\pi}{T}, \tau = \frac{3}{2}T, \frac{2i^{\max} + 1}{3}\tau \leq \tau_i.$$

Підставимо (3) в (2) і одержимо

$$\begin{aligned} S(\tau, i) &= \int_0^{\tau_i} f(t) \sum_{i=0}^{i^{\max}} f_0\left(\frac{\pi}{\tau}\left(t - \frac{2}{3}\tau i\right)\right) dt = \\ &= \sum_{i=0}^{i^{\max}} \int_0^{\tau_i} f(t) f_0\left(\frac{\pi}{\tau}\left(t - \frac{2}{3}\tau i\right)\right) dt \end{aligned} \quad (4)$$

Зробимо заміну змінної $\theta = \frac{\pi}{\tau}\left(t - \frac{2}{3}\tau i\right)$

Тоді (4) запишеться як

$$S(\tau, i) = \sum_i I_i(\tau),$$

$$\text{де } I_i(\tau) = \frac{\tau}{\pi} \int_0^\pi f\left(\frac{\tau}{\pi}\left(\theta + \frac{2\pi}{3}i\right)\right) f_0(\theta) d\theta \quad (5)$$

Можемо перейти в (5) до безрозмірної змінної $l = \tau / \tau_i$. Тоді

$$I_i(l) = \frac{\tau_i}{\pi} l \int_0^\pi f\left(l \frac{\tau_i}{\pi}\left(\theta + \frac{2\pi}{3}i\right)\right) f_0(\theta) d\theta \quad (6)$$

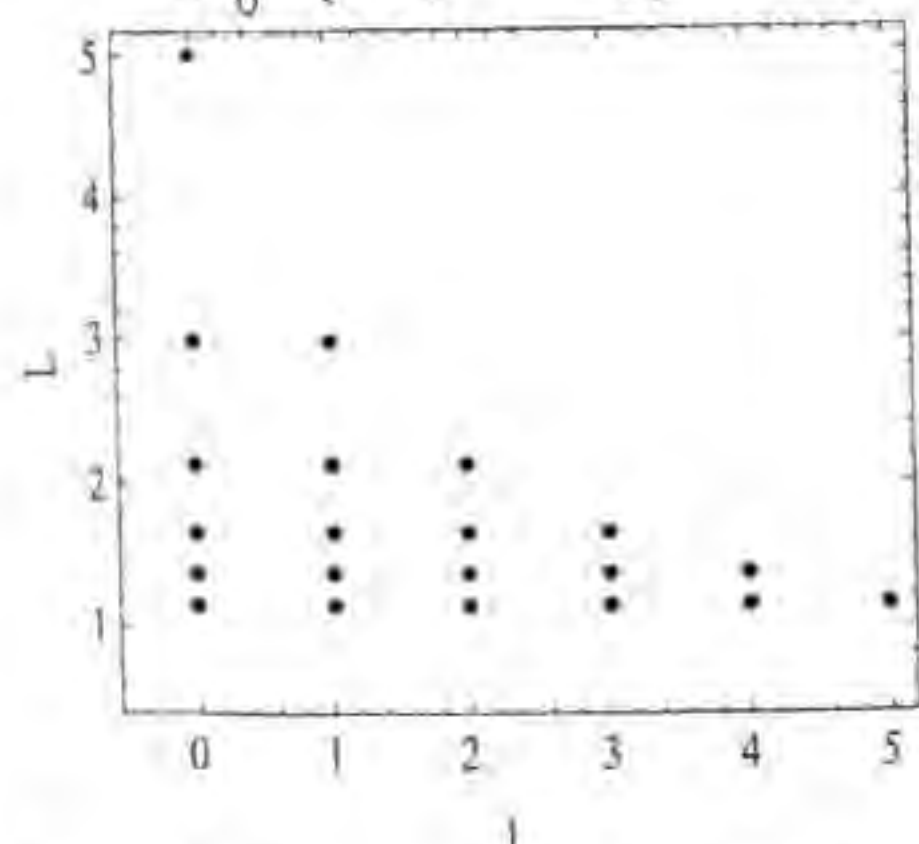


Рис.1. Сітка параметрів (l, L) , за якими розраховується фур'є-ЕХП-вейвлет спектр $I_i(l) / l : L = 5l = 5\tau / \tau_i, l \equiv i$.

На рис. 1. зображено сітку точок, на якій розраховується двовимірний спектр

$$I_i(l) / \left(\frac{\tau_i l}{\pi^{3/2}}\right)$$

Таким чином, ряд (5), (6) одночасно відтворює елементи фур'є-спектру, оскільки залежить від $l(\tau)$, а також вейвлет-розкладу, оскільки « i » визначає місце розташування ЕХП-функції $f_0(\theta)$ в межах досліджуваного імпульсу $[0, \tau_i]$. Ці властивості далі будуть більш детально досліджено на типових прикладах.

3. Приклади застосування методики

Розглянемо радіоімпульс [3], властивості якого задовольняють вимогам щодо електромагнітних сигналів [4]

$$f(t) = \sin\left(\pi \frac{t}{\tau_i}\right) \sin\left(n\pi \frac{t}{\tau_i}\right), \quad (7)$$

$$n = 2, 3, 4, \dots$$

Його розклад за елементарними хвильовими пакетами виконаний в той же роботі [4].

Нижче ми розглянемо розклад фур'є-спектру цього імпульсу. Для цього використаємо формули (5), (6), одержані в попередньому розділі. З урахуванням обмежень на i, l вони запишуться як

$$I_i(l) = l \left(1 + \text{sign}\left[1 - \frac{l}{3}(2i+1)\right] \right) \int_0^\pi \sin\left[l\left(\theta + \frac{2\pi}{3}i\right)\right] \sin\left[nl\left(\theta + \frac{\pi}{3}i\right)\right] (\cos[2\theta] - \cos[4\theta]) d\theta \quad (8)$$

Інтеграл в (8) може бути розрахований аналітично, але це буде громіздкий вираз і ми його залишимо у вигляді (8). Результати розрахунків для функції (7) подано на рис. 2а - рис.2в.

Діаметри "circle" і "disk" пропорційні амплітудам $|I_i(\tau / \tau_i)| l$. Індекс "i" визначає затримку відповідної базової функції, якою є елементарний хвильовий пакет нульового порядку [4]. Таким чином, по-суті, розклад (5), (6) – це вейвлет представлення фур'є-спектрів для радіосигналів. За те, що це вейвлет свідчить те, що розподіли (рис.2а-рис.2в) – це двовимірні залежності в координатах масштаб (τ) -затримка (i) .

Збільшення ваги високочастотних компонент (τ зменшується) в спектрах зображених на рис.2 від рис.2а ($n=2$) до рис. 2в ($n=4$) відповідає зростанню швидкості зміни сигналу (7) в часі. Спектр рис.2б. має особливість - значна вага

компоненти з координатами $(i=0, \tau / \tau_i = 1)$.

Це пояснюється тим, що в цьому окремому випадку форма функції $f(t)$ (7) і базової функції $f_0(t)$ співпадають.

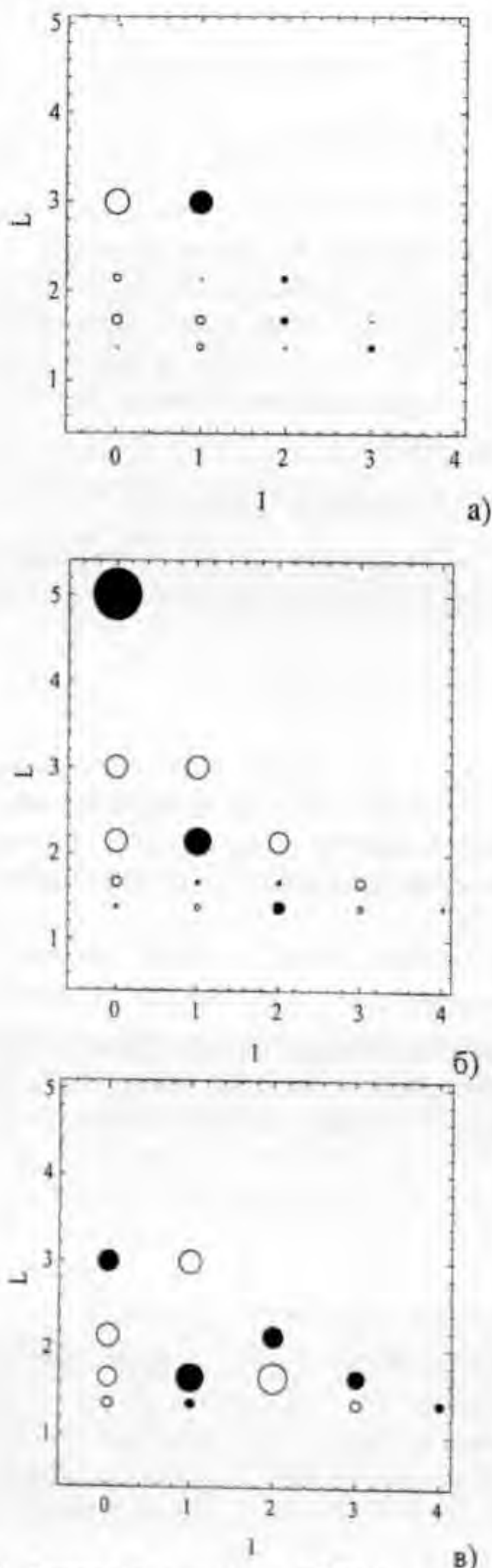


Рис.2. Розподіл амплітуд ЕХП-функцій для сигналу $\sin[\pi t / \tau_1] \sin[n\pi t / \tau_1]$,

$L = 5\tau / \tau_1$, $I \equiv i: n = 2$ (а), $n = 3$ (б), $n = 4$ (в);

○ - від'ємні, ● - додатні амплітуди.

Порівняння спектрів (рис.2а) і (рис.2в) свідчать про поступове збільшення внеску

високочастотних (в термінах фур'є-аналізу) і короткотермінових (в термінах вейвлет аналізу) процесів. Крім того, можна стверджувати, що процес (7) для $n=4$ характеризується антисиметричною функцією, швидкість зміни якої збільшується в центральній її частині (рис.2в).

4. Висновки

Застосування розкладу фур'є-спектру радіосигналу за елементарними хвильовими пакетами нульового порядку дає змогу досліджувати як часові, так і спектральні його характеристики. По-суті, такий розклад за двома параметрами $\{i, l\}$ є аналогом вейвлет-перетворення, в якому в якості базової функції використовується ЕХП-функція нульового порядку. Таким чином, в цій роботі встановлено зв'язок між спектрами фур'є, розкладом за ЕХП-функціями і вейвлет-представлення електромагнітних сигналів. Підґрунтям для такого підходу є можливість представлення гармонічної функції у вигляді ряду зміщених парних ЕХП-функцій нульового порядку.

Список використаних джерел

1. Будаков Б.М., Фомин С.В. Кратные интегралы и ряды. – М., «Наука», 1967.- 608с.
2. Чуи К. Введение в вейвлеты. Пер. с англ., -М.: Мир, 2001.- С.412.
3. Астанин Л.Ю., Костылев А.А. Основы сверхширокополосных радиолокационных измерений. М.: Радио и связь, 1989.-192с.
4. Овечко В.С. „Ортонормованный базис для радиосигналов”, Вісник Київського університету. Серія Фізико-математичних наук, №1, 2009, С.196-202.

Надійшла до редколегії 25.05.2010

УДК 535

Пархоменко* Д. А., аспірант,
Колєнов** С. О., кандидат фіз.-мат. наук

Анізотропна акустооптична взаємодія у 2D фотонному кристалі поблизу фотонної та фононної заборонених зон

Обраховано геометрію анізотропної акустооптичної взаємодії у 2D фотонному кристалі з квадратною ґраткою, що утворена в кремнії. Побудовано залежності кута Брегга від частоти акустичної хвилі для випадку одночасної наявності фотонної та фононної заборонених зон. Визначено основні перспективи досліджень у даному напрямку.

Ключові слова: акустооптика, анізотропна дифракція, фотонний кристал, фононний кристал.

D. A. Parhomenko*, post graduate student,
S. O. Kolenov**, Ph.D.

Anisotropic acoustooptic Bragg interaction in 2D photonic crystal near the photonic and phononic bandgaps

We calculated anisotropic acoustooptic Bragg interaction geometry in silicon based 2D photonic crystals with square lattice. Bragg angle vs. acoustic wave frequency dependencies are presented and analyzed for case both photonic and phononic bandgaps. Further research aims and expected effects are defined.

Key Words: acoustooptics, anisotropic diffraction, photonic crystal, phononic crystal.

* Dmitry.Parhomenko@googlemail.com, ** ksa@univ.kiev.ua
Представлено докт. ф.-м. н., проф. Скришевським В. А.

Вступ

Існування заборонених зон для електромагнітного випромінювання в фотонних структурах викликало неабиякий інтерес до теоретичних та експериментальних досліджень в даній галузі [1, 2]. Останнім часом це стимулювало до швидкого росту кількості досліджень по пошуку аналогічних ефектів в акустиці періодичних пружних середовищ або в, так званих, фононних кристалах [6-9]. В той же час акустооптика залишається найбільш ефективним методом впливу на поширення світла і знайшла на сьогодні застосування в безлічі пристроїв [4, 5].

В даній роботі ми намагаємося розглянути основні засади анізотропної акустооптичної взаємодії в структурах, які мають одночасно властивості фотонного кристалу щодо оптичного випромінювання та властивості фононного кристалу щодо акустичної хвилі. Вже сьогодні фотонні кристали набувають все більшого поширення в системах обробки оптичних сигналів. Інтерес до фотонних кристалів викликаний, по-перше, тим що, вони мають незвичні дисперсійні властивості, що відкриває нові можливості для акустооптичної взаємодії. По-друге, звук та світло у фотонних кристалах мають досить малу групову швидкість на границі забороненої зони, що повинно призвести до поліпшення акустооптичної взаємодії [10].

Параметри моделювання

Ми розглядаємо фотонний кристал в кремнії (Si) з квадратною ґраткою, яку сформовано у вигляді циліндрів із плавненого кварцу (silica). Ці матеріали найбільш уживані для побудови фотонних структур, однак в акустооптиці широкого вжитку не мають. Радіус циліндрів, що утворюють фотонну ґратку, при моделювання було обрано $R=0.4a$ (відповідно фактор заповнення складав $f=0.5$). Розрахунок оптичних та акустичних дисперсійних властивостей фотонного/фононного кристалу було здійснено за допомогою методу розкладу за плоскими хвилями (PWE). При моделюванні властивостей фотонного кристалу для розрахунків використовувалися показники заломлення матеріалів на довжині хвилі $1.55\mu m$: $n=3.47$ для кремнію та $n=1.44$ для плавненого кварцу. Пружні константи при обчисленні властивостей фононної структури складали: $c_{11}=16.578$, $c_{12}=6.394$ та $c_{44}=7.962 \times 10^{10} Pa$ для кремнію; $c_{11}=7.839$, $c_{12}=1.587$ та $c_{44}=3.126 \times 10^{10} Pa$ для плавненого кварцу.

Всі результати моделювання наведені у даній роботі отримані для нормованих частот оптичного випромінювання та звуку:

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega a}{2\pi c} \quad (1)$$

$$\tilde{\Omega} = \frac{\Omega a}{2\pi v} \quad (2)$$

де v – швидкість звуку в одному з матеріалів, що утворюють фотонний кристал. В роботі для нормування було обрано $v = 5844 \text{ m/s}$ – швидкість поперечної хвилі в кремнії.

Анізотропна акустооптична взаємодія у фотонних структурах

Акустооптична взаємодія у фотонному кристалі може бути описана як трьохчастинкове фотон-фононне розсіювання, що супроводжується народженням (поглинанням) фонона. До процесу розсіювання застосовні закони збереження енергії та імпульсу. Закон збереження енергії визначає співвідношення між частотами розсіяного фотона ω_s , падаючого фотона ω_i та фонона Ω :

$$\omega_s = \omega_i \pm \Omega \quad (3)$$

Знак плюс (мінус) відповідає поглинанню (народженню) фонона. Закон збереження імпульсу для цих двох процесів відповідно запишеться у вигляді:

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_i \pm \mathbf{K} \pm \mathbf{G} \quad (4)$$

де $\mathbf{k}_s$ – хвильовий вектор розсіяного фотона; $\mathbf{k}_i$ – хвильовий вектор падаючого фотона; $\mathbf{K}$ – хвильовий вектор фонона; $\mathbf{G}$ – вектор оберненої ґратки фотонного кристалу. Якщо $\mathbf{G} \neq 0$, взаємодія враховує відбиття/дифракцію на фотонній ґратці. Ми розглядаємо випадок лише коли $\mathbf{G} = 0$.

Для наведеної структури можна розглянути два типи акустооптичної взаємодії – ізотропну та анізотропну [4, 5]. Ізотропна дифракція в анізотропному середовищі означає дифракцію без зміни поляризації. Анізотропна дифракція відбувається із зміною поляризації. Векторна діаграма – це графічне представлення фазового синхронізму при фотон-фононній взаємодії. Векторна діаграма анізотропної дифракції Брегга, побудована на ізочастотних кривих в першій зоні Брілюена двовимірного фотонного кристалу з квадратною ґраткою, наведена на рис.1. Фотонна структура породжує оптичну анізотропію й робить можливою анізотропну дифракцію Брегга в оптично ізотропних матеріалах.

Існує три типи об'ємних акустичних мод, що можуть розповсюджуватися у фононному кристалі [3]. Ці моди: зсувна горизонтальна мода (SH), зсувна вертикальна мода (SV) та повздовжня мода (L). Ми розглядаємо акустооптичну взаємодію окремо для кожної

об'ємної акустичної моди. В [10] геометрія анізотропної дифракції була обрахована лише для однієї поперечної моди. При моделюванні звук було направлено вздовж напрямку ХМ невиродженої зони Брілюена. Оскільки звук розповсюджувався вздовж напрямку симетрії фононної структури, акустичні моди носили явно виражений поперечний або повздовжній характер. Для напрямків розповсюдження, що не співпадають із симетрією структури, акустичне поле набуває виродження.

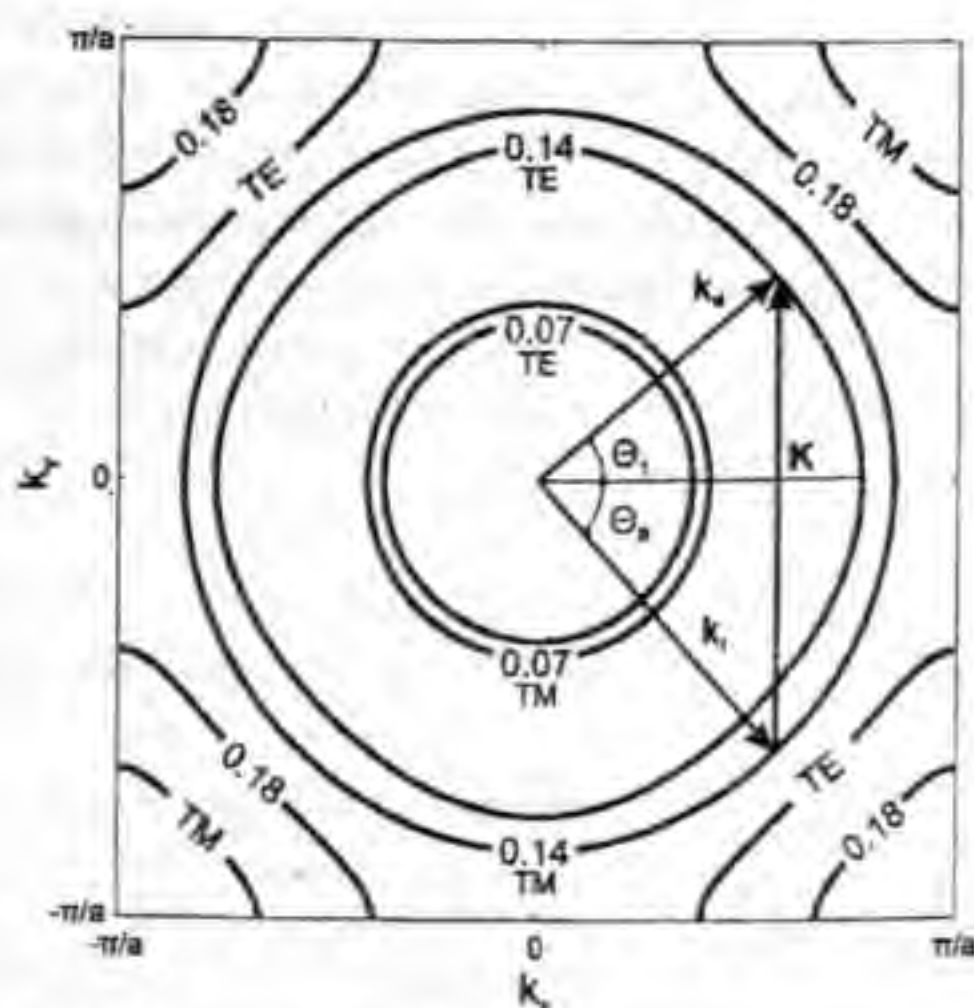


Рис.1. Ізочастотні криві 2D фотонного кристалу з квадратною ґраткою та векторна діаграма анізотропної дифракції Брегга.

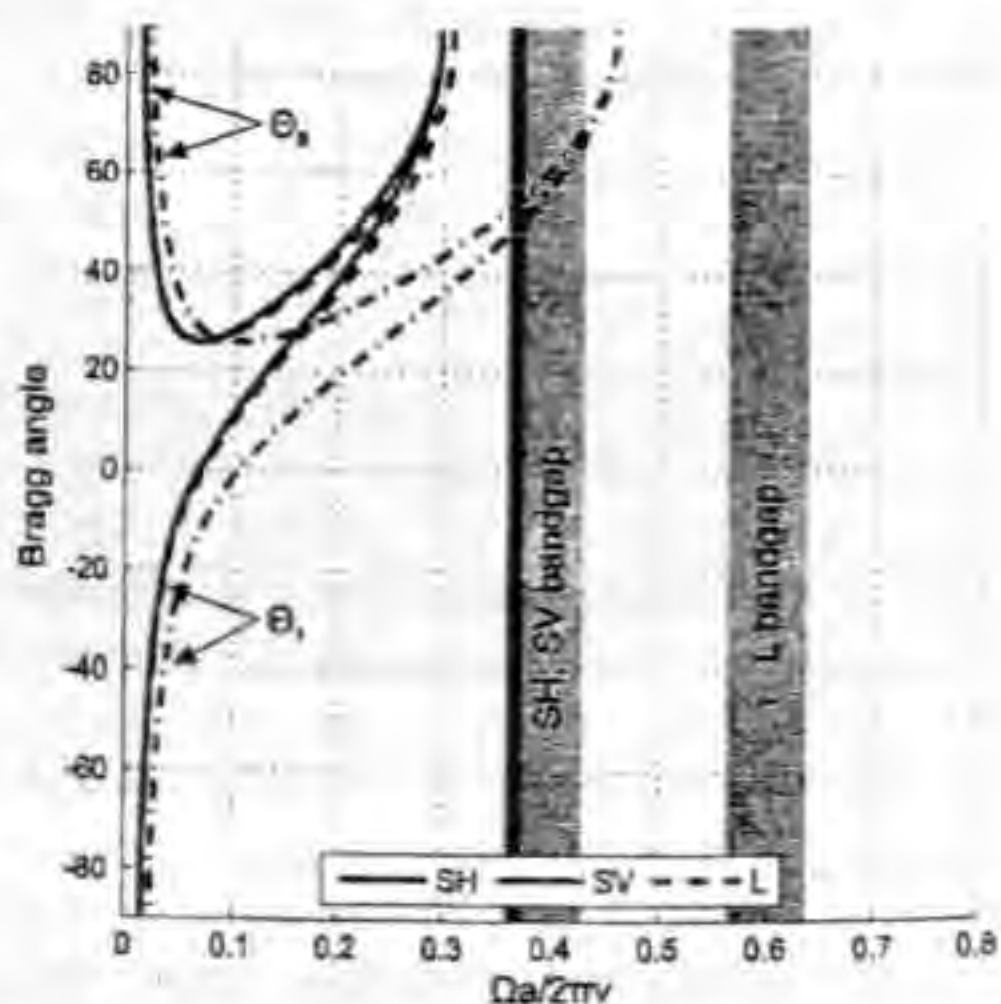


Рис.2. Залежності кута Брегга від частоти звуку для анізотропної дифракції Брегга в 2D фотонному кристалі з квадратною ґраткою. Частота світла $\tilde{\omega} = 0.07$.

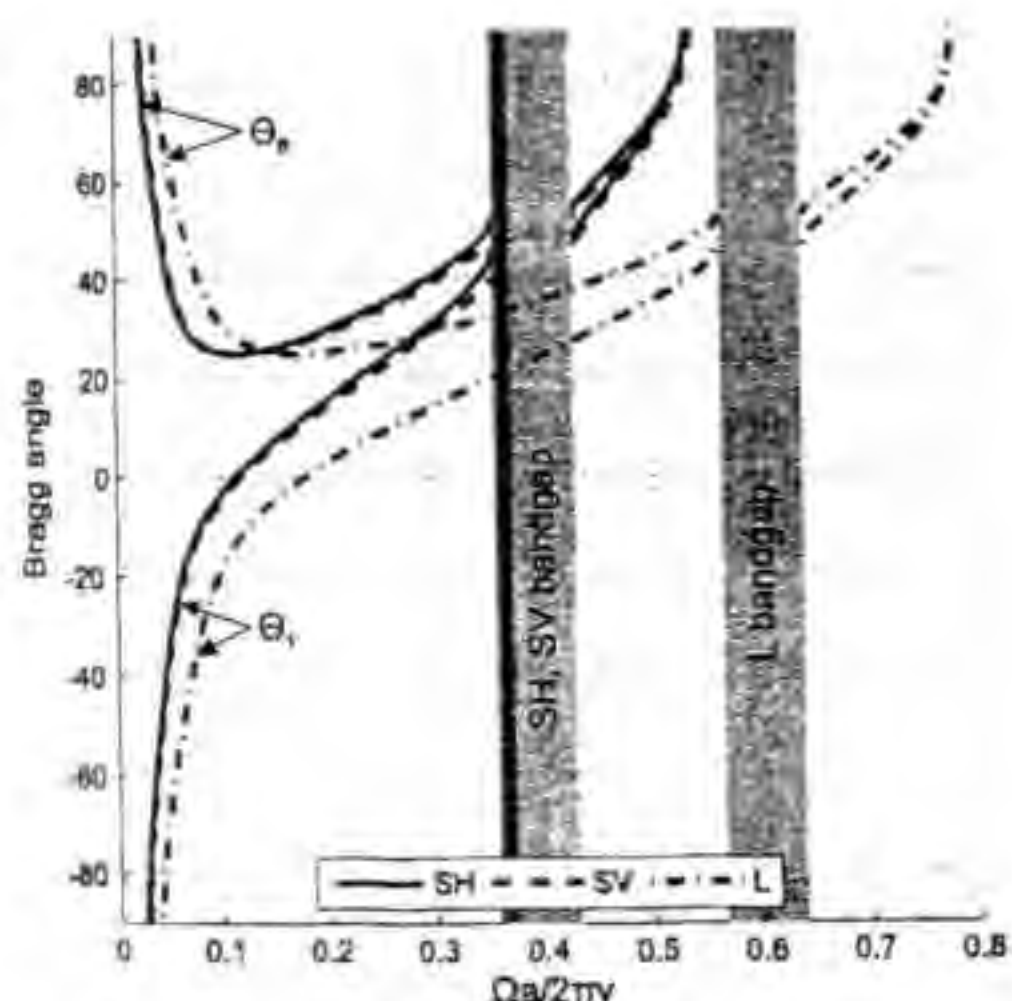


Рис.3. Залежності кута Брегга від частоти звуку для анізотропної дифракції Брегга в 2D фотонному кристалі з квадратною ґраткою. Частота світла $\tilde{\omega} = 0.12$

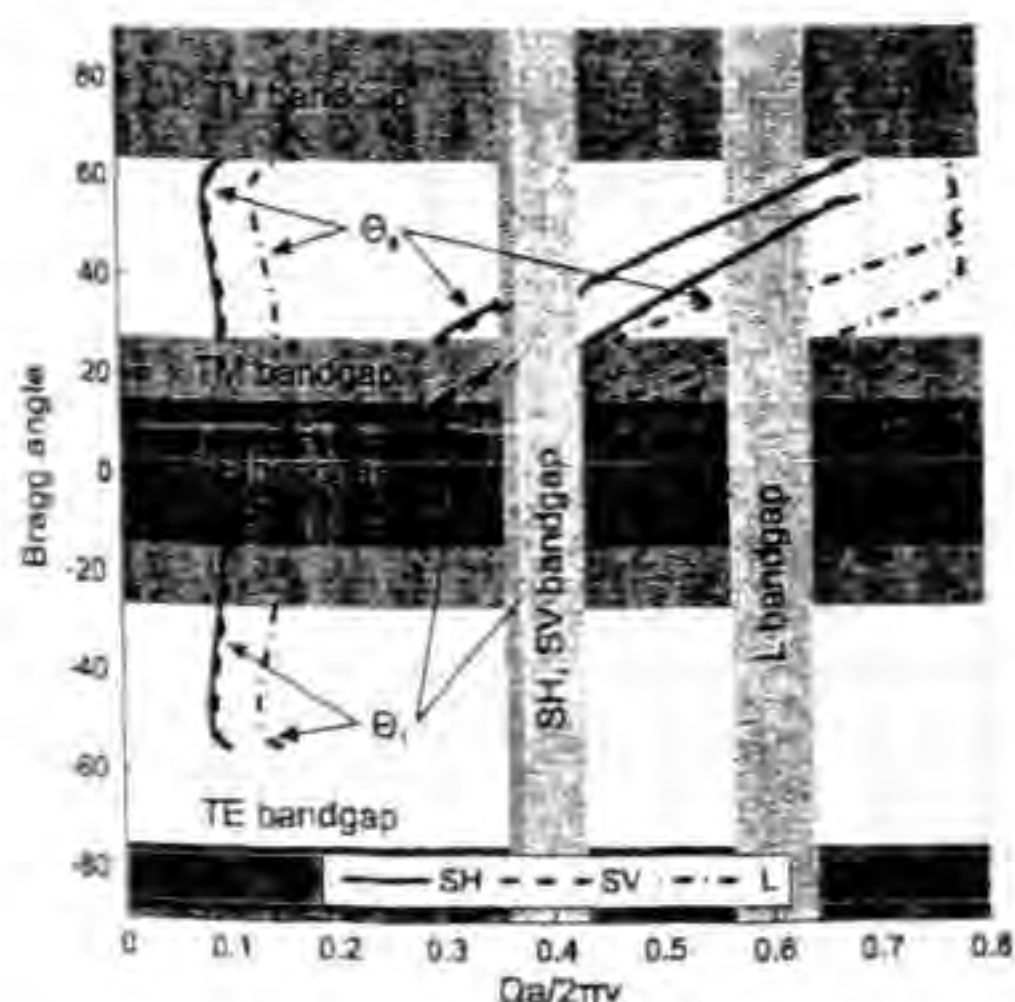


Рис.4. Залежності кута Брегга від частоти звуку для анізотропної дифракції Брегга в 2D фотонному кристалі з квадратною ґраткою. Частота світла $\tilde{\omega} = 0.17$

Частотні залежності для кута Брегга при анізотропній дифракції в 2D фотонному кристалі з квадратною ґраткою наведено на рис.2-рис.4. Тут Θ_0 – кут падаючого променя (кут Брегга) та Θ_1 – кут дифрагованого променя. Як видно з рис.2, для малих частот оптичного випромінювання ($\tilde{\omega} = 0.07$) вигляд залежностей кута Брегга аналогічний до відповідних залежностей при анізотропній дифракції в

однорідному середовищі [4, 5]. Для високих частот оптичного випромінювання ($\tilde{\omega} > 0.09$) залежності кута Брегга мають заборонені зони для акустичних мод (рис.3). Якщо частота оптичного випромінювання вища за $\tilde{\omega} > 0.15$, з'являється додаткове обмеження кута падаючого променя через фотонну заборонену зону (наприклад, це добре видно на ізочастотній кривій $\tilde{\omega} = 0.18$ рис.1). Таким чином, дозволений кут падіння для оптичної моди з ТМ поляризацією і частотою $\tilde{\omega} = 0.17$ (рис.4) лежить приблизно у межах $25 < \Theta_0 < 65$ градусів. Поведінка кутових залежностей Брегга для зсувної горизонтальної (SH) та зсувної вертикальної (SV) акустичних мод практично однакова. Слід лише зазначити, що ширина забороненої зони для зсувної вертикальної моди менша. Повздовжня (L) акустична мода має значно вищі частоти порівняно з поперечними модами. Заборонена зона для повздовжньої моди є найширшою. Кут падіння (Брегга), для якого спостерігаються акустичні заборонені зони, не залежить від типу акустичної моди.

Цікава для практичного використання та пошуку нових ефектів ділянка кутових залежностей лежить в області низьких акустичних частот $\tilde{\Omega} < 0.1$. По-перше, кутові залежності для запропонованої фотонної структури мають майже вертикальний нахил на цій ділянці. По-друге, на цій ділянці можна спостерігати колінеарну дифракцію на акустичній хвилі. Колінеарна дифракція відбувається із зміною поляризації без зміни напрямку розповсюдження світла й при цьому потребує найменшої частоти звуку. Цей режим дифракції найбільш цікавий з точки зору експериментальної перевірки акустооптичної взаємодії в фотонній структурі. По-третє, для високих частот оптичного випромінювання на цій ділянці можна спостерігати дифракцію на межі фотонної забороненої зони. Оскільки світло у фотонних кристалах має досить малу групову швидкість на границі забороненої зони, слід очікувати поліпшення акустооптичної взаємодії.

Інша цікава ділянка лежить в межах $0.45 < \tilde{\Omega} < 0.65$ акустичних частот при досить високій частоті оптичного випромінювання (рис.4). Тут кутові залежності мають лінійний характер.

Для повздовжньої (L) акустичної моди при досить великих частотах у другій зоні Брілюєна характерною є ділянка з від'ємною дисперсією. Їй відповідає від'ємний кут нахилу кутової

залежності на рис.4 при $\tilde{\Omega} > 0.75$. Фактично, ця ділянка майже співпадає з режимом колінеарної дифракції на акустичній хвилі, при якій дифрагований промінь змінює поляризацію й розповсюджується в протилежному напрямку. Цей режим практично недосяжний через дуже високу частоту акустичної хвилі.

Зробимо деякі числові оцінки. Оберемо, наприклад, нормовану частоту оптичного випромінювання $\tilde{\omega} = 0.17$ (рис.4). Довжина хвилі світла складає $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$. Таким чином, період фотонного кристалу має бути $a = \tilde{\omega}\lambda = 0.26 \mu\text{m}$. Частота звуку при дифракції поблизу фотонної забороненої зони (рис.4) складає $\tilde{\Omega} = 0.1$ або з (2) шляхом простих перетворень можна отримати $\Omega = 14 \text{ ГГц}$. Це дуже висока частота, яку нелегко навіть згенерувати. Для того, щоб отримати більш менш придатні для практичного використання структури, необхідно обирати матеріали фотонного кристалу з невеликим контрастом показника заломлення. Також впливати на значення частоти звуку, при якій виконуються умови фазового синхронізму, можна змінюючи фактор заповнення структури.

Висновки

Представлена геометрія акустооптичної брегівської взаємодії в двовимірному фотонному кристалі являється лише базисом для подальших досліджень в цьому напрямі. Умови фазового синхронізму лише передбачають можливість фотон-фононної взаємодії. Іншим важливим показником якості акустооптичної взаємодії є ефективність дифракції. Основний ефект що визначає ефективність дифракції – є фотопружний ефект, тобто зміна діелектричного тензору під впливом деформації акустичною хвилею. Фотопружний ефект в фотонному кристалі має дві складові, що визначаються: фотопружними властивостями матеріалів, з яких утворений фотонний кристал, та наведений фотопружний ефект внаслідок деформації фотонної ґратки акустичною хвилею. Іншою задачею є пошук шляхів оптимізації параметрів фотонної структури для зменшення частоти акустичної хвилі. Ця проблема може бути вирішена шляхом належного вибору геометрії та матеріалів фотонного кристалу. Обмеження кута Бреґґа фотонними забороненими зонами може бути використане для розробки

високоселективних просторових фільтрів. Наявність ділянок з негативною акустичною дисперсією дозволяє отримати дифракцію Бреґґа в широкому діапазоні кутів падіння. Кардинально нові ефекти очікуються при дифракції поблизу фотонної/фононної забороненої зони через низьку групову швидкість світла/звуку. Фотонні кристали відкривають широкий спектр можливостей для досліджень в галузі акустооптики.

Список використаних джерел

1. John D. Joannopoulos Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. – Princeton University Press, 2008. – 286 p.
2. K. Sakoda Optical Properties of Photonic Crystals. – Springer, 2001. – 253 p.
3. Auld B. A. Acoustic Fields and Waves in Solids – John Wiley & Sons, 1973. – 1
4. Балахний В. И., Парыгин В. Н., Чирков Л. Е. Физические основы акустооптики - М.: Радио и связь, 1985. – 280 с.
5. Магдич Л. Н., Молчанов В. Я. Акусто-оптические устройства и их применение. – М.: Советское радио, 1978. – 112 с.
6. M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani Acoustic band structure of periodic elastic composites // Phys. Rev. Lett. – 1993. – 71, 2022
7. M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites // Phys. Rev. B – 1994. – 49, 2313
8. Yukihiro Tanaka, Yoshinobu Tomoyasu, and Shin-ichiro Tamura Band structure of acoustic waves in phononic lattices: Two-dimensional composites with large acoustic mismatch // Phys. Rev. B – 2000. – 62, 7387
9. Tsung-Tsong Wu, Zi-Gui Huang, and S. Lin Surface and bulk acoustic waves in two-dimensional phononic crystal consisting of materials with general anisotropy // Phys. Rev. B – 2004. – 69, 094301
10. Pyatakova Z. A., Belokopytov G. V. Acoustic-Optical Interaction in Photonic Crystals – Frequency Dependence of Bragg Angle // Moscow University Physics Bulletin – 2009. – 64, No. 3

Надійшла до редколегії 05.06.2010

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 535.015+53.047

Барабаш Ю.М., с.н.с., Заболотний М.А. к. ф.-м.н., с.н.с., Куліш М.П. д.ф.м.н., проф., Дмитренко О.П. к. ф.-м.н., доц., Костіна А., студ., Сидельникова Ю.. студ.

Радіаційно стимульована динаміка конформаційного стану молекул NADH у приповерхневих шарах дистилату води.

В роботі досліджується електромагнітний вплив на реологічні властивості приповерхневих шарів водного розчину NADH. Для вимірювання спектру капілярних коливань приповерхневих хвиль був застосований оптичний гетеродинний метод, що дозволив виявити зміни характеристик хвиль. Водний розчин моделювався системою рівнянь Нав'є-Стокса та неперервності. Експериментально зареєстрований нетепловий реверсивний вплив опромінення електромагнітними хвилями на в'язкість води і водного розчину NADH. При опроміненні в'язкість приповерхневого шару дистилату води зростає, а розчину NADH – спадає.

Ключові слова: NADH, конформація, опромінення.

E-mail: anka-pmt@gmail.com
afinka877@rambler.ru

Проблема створення молекулярних і біологічних тестів в даний час досить актуальна. Необхідність використання тестуючих технологій обумовлена:

1) різноманітним техногенним (у тому числі і електромагнітним) забрудненням навколишнього середовища і викликаній цим необхідністю оперативного контролю параметрів середовища, 2) розвиток нових фармацевтичних, молекулярних і нанотехнологій підвищує вимогу до хімічної чистоти та структурної однорідності створюваних виробів. Перспективними в цьому напрямку показали себе технології, засновані на використанні біологічних молекул, селективність активності яких дозволяє використовувати їх в якості первинних рецепторів змін контрольованих параметрів. Одна з можливих реалізацій такого підходу базується на

Barabash Y.M., Sen. Sci. Res., Zabolotny M.A. PhD, Sen. Sci. Res., Kulysh M.P. Dr. Sci., Prof., Dmytrenko O.P. PhD Ass. Prof., Kostina A. stud., Sidelnikova J. stud.

Radiation stimulated dynamics of the conformation state of the NADH molecules in the surface layers of water's distillate.

The no thermal electromagnetic radiation influence on the rheologic properties of aqueous NADH solutions was studied. For this purpose the free solution surface thermal fluctuation (capillary waves) spectrum was measured using the optical heterodyne method. It allowed detecting the frequency changes of the light scattered by the surface waves. The amplitude of these waves, normally, is less than 1 nm. A model of the viscous in compressive liquid, described by the Navier-Stokes and continuity equations was chosen as a theoretical model of the aqueous solution. The conditions of the viscous liquid adhesion to the solid wall and the absence of outer forces (except the surface tension) were used as the boundary conditions. This system of equations is the system of the first order equations with the constant coefficients.

Key Words: NADH, conformation, irradiation.

використанні молекул NADH, структурна формула якої наведена на Рис.1.

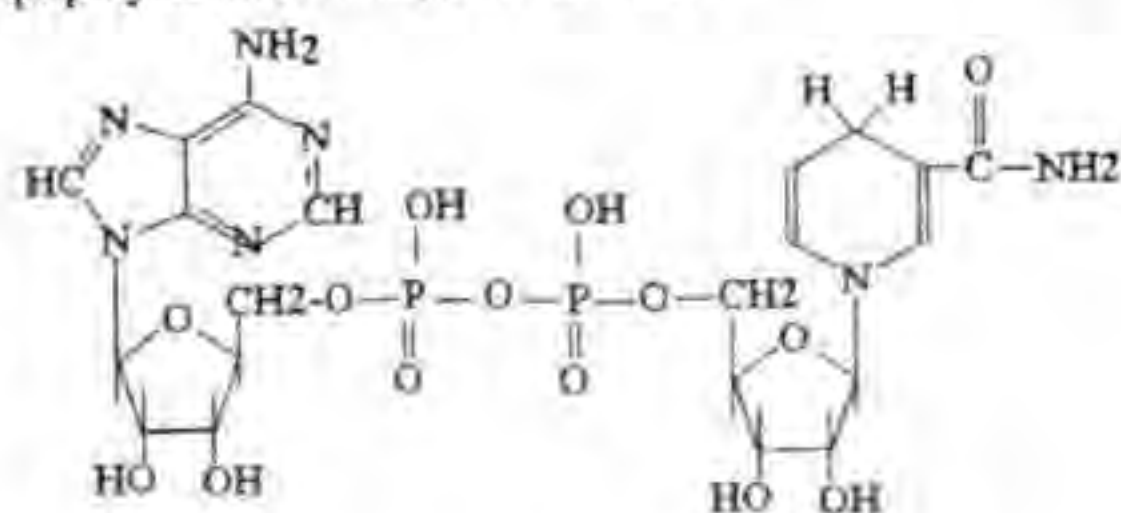


Рис.1 Структурна формула нікотінамідадінуклеотіда (NADH).

Проведені експериментальні дослідження [1, 2, 3, 4] дозволили зробити висновок про істотні залежності реакційних, люмінесцентних і транспортних властивостей молекул NADH від їх конформаційного стану. У нейтральних водних

Представлено:
д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

розчинах NADH утворює як мінімум два конформаційних стани. Одна з конформації молекули є відкритою (див.Рис.1), її кістяк (рибоза - діфосфат-рибоза) витягнутий, інша конформація - закритою (кістяк згорнутий, а два гетероцикли аденіновий і нікотинамідні, розташовані паралельно і взаємодіють один з одним) [3].

Залежно від конкретного типу процесу, визначальним є наявність і концентрація NADH того чи іншого конформаційного стану. При зв'язуванні молекули NADH спостерігається незначне деформування її конформаційного стану - при збереженні згорнутої форми гетероциклічні основи перестають бути компланарними.

Відомо, що властивості води в малих обсягах (тобто в присутності силових полів, створюваних молекулами, що обмежують рідину стінок) істотно відрізняються від властивостей обсягів води, що знаходяться далеко від поверхонь фазового розділу при незмінних тиску та температурі. Відзначимо, що функціонування біомолекул реалізується найчастіше в малих обсягах.

Можливість визначення впливу електромагнітного випромінювання (у тому числі міліметрового діапазону, що слабо поглинається водою) на конформаційний стан NADH відкриває можливість використання NADH в якості люмінесцентних датчиків предракових патологій [2]. З іншого боку, дослідження впливу електромагнітного випромінювання на чутливі до нього молекули NADH дозволяє розробляти методики мінімізації деструктивних наслідків опромінення. Таким чином, дослідження закономірностей фотостимульованих конформаційних переходів молекул NADH представляє як теоретичний [5, 6], так і прикладний інтерес.

Динаміка вільної поверхні рідини визначається флуктуативно-дисипативними процесами [9]. Вони призводять до виникнення теплових гідродинамічних флуктуацій форми вільної поверхні рідини, що залежать від

властивостей середовища (в даному випадку - розчину наночастинок в однорідній рідині). Виникаючі флуктуаційні деформації вільної поверхні зразка можна розглядати [10] як результат суперпозиції поверхневих капілярних хвиль, що розповсюджуються по ній.

Динаміка хвиль досить добре [9, 11] описується системою рівнянь Нав'є - Стокса і неперервності, яку в разі малих і пологих деформацій вільної поверхні шару рідини (амплітуда деформацій (h) набагато менше просторової довжини хвилі (λ)) та двовимірного руху можна представити у вигляді [11]:

$$\frac{\partial v_x(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p(x, y, t)}{\partial x} + \frac{\eta}{\rho} \cdot \Delta v_x(x, y, t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial v_y(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p(x, y, t)}{\partial y} + \frac{\eta}{\rho} \cdot \Delta v_y(x, y, t) \quad (2)$$

$$\frac{\partial v_x(x, y, t)}{\partial x} + \frac{\partial v_y(x, y, t)}{\partial y} = 0, \quad (3)$$

Тут використані наступні позначення: $v_x(x, y, t)$, $v_y(x, y, t)$ - компоненти вектора швидкості частинок рідини в точці з координатами x, y в момент часу t , $p(x, y, t)$ - гідродинамічний тиск, η - динамічна в'язкість рідини, ρ - щільність, вісь ОУ спрямована по нормалі до вільної поверхні деформованого середовища, а вісь ОХ - розташована на її вільній поверхні. В якості граничних умов використовуються:

$$\frac{\partial v_x(x, y, t)}{\partial y} \Big|_{y=h(x, t)} + \frac{\partial v_y(x, y, t)}{\partial x} \Big|_{y=h(x, t)} = 0 \quad (4)$$

$$p(x, y, t) \Big|_{y=h(x, t)} - 2 \cdot \eta \cdot \frac{\partial v_y(x, y, t)}{\partial y} \Big|_{y=h(x, t)} + T_M \cdot \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad (5)$$

$$h(x, t) = \int_0^t v_y(x, y=0, t) dt, \quad (6)$$

T_M - коефіцієнт поверхневого натягу. При формулюванні задачі (1) - (6) враховано, що розміри просторових неоднорідностей, які визначаються розмірами молекул NADH, набагато менше λ . Це дозволяє використовувати

для опису особливостей кінетики капілярних хвиль усереднену локальну в'язкість, яка у разі реалізації ньютонівської рідини у вигляді суспензії, істотно залежить від форми зважених часток [9].

У разі еліпсоїдної форми (з напівосями еліпсоїда a і b) частинки для опису в'язкості суспензії можна використовувати наступну параметризацію [9]: $\eta = \eta_0 \cdot (1 + \gamma \cdot \varphi)$ (7),

тут φ - відношення об'єму частинок, зважених в об'ємі V рідини до величини V , γ - параметр залежний від значення відношення $\frac{a}{b}$. (При $\frac{a}{b} = 0,1$ - $\gamma = 8,04$, $\frac{a}{b} = 0,2$ - $\gamma = 4,71$; $\frac{a}{b} = 0,5$ - $\gamma = 2,85$; $\frac{a}{b} = 1$ - $\gamma = 2,5$).

Сформульована задача є лінійною, тому в рамках цієї моделі можна вважати, що окремі гармоніки поверхневих хвиль не взаємодіють один з одним. Розглядаючи поведінку однієї з поверхневих гармонік з довжиною хвилі λ у разі, коли λ набагато менше товщини зразка, враховуючи, що значення v_x , v_y експоненційно спадають по мірі віддалення від вільної поверхні рідини, розв'язок системи (1-3) можемо вибрати в наступному вигляді, [9]:

$$v_x(x, y, t) = \left(-\frac{k}{\rho \alpha} C_1 \exp(k \cdot z) + C_2 \cdot \exp(k \cdot \beta \cdot z) \right) \cos(k \cdot x) \exp(\alpha \cdot t) \quad (8)$$

$$v_y(x, y, t) = \left(-\frac{k}{\rho \alpha} C_1 \exp(k \cdot z) + C_2 \cdot \exp(k \cdot \beta \cdot z) \right) \sin(k \cdot x) \exp(\alpha \cdot t) \quad (9)$$

$$p(x, y, t) = p \cdot C_1 \cdot \exp(k \cdot z) \cdot \sin(k \cdot x) \exp(\alpha \cdot t) \quad (10)$$

де $k = 2\pi/\lambda$, $\alpha = \delta - i \cdot \omega$ - комплексна величина, уявна частина якої визначає частоту коливань, а дійсна - їх згасання, $\beta = \sqrt{1 + \frac{\alpha \cdot \rho}{\eta \cdot k^2}}$, C_2 - стала,

що зв'язана з параметром C_1 співвідношенням (4), з якого випливає:

$$C_2 = \frac{2 \cdot k}{\rho \cdot \alpha \cdot (1 + \beta^2)} C_1 \quad (11)$$

C_1 , яка залишається невідомою, не може бути визначена, що математично обумовлюється

однорідним характером сформульованої задачі, а фізично - некаузальним характером флуктуаційних сил, що є причиною виникнення хвильових збурень вільної поверхні рідини. Облік невикористаної граничної умови (5) дозволяє одержати дисперсійне рівняння, що є аналогом відомого співвідношення [9] і зв'язує α і k .

$$\rho \cdot \alpha + \frac{2 \cdot \eta \cdot k^2}{1 + \beta^2} - \frac{T_M \cdot k^3}{\alpha} \cdot \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} = 0 \quad (12)$$

Аналітичне рішення рівняння (11) може бути знайдено тільки при використанні теорії збурень. Зокрема, у разі слабко в'язкої рідини [9] його можна записати у вигляді:

$$\omega \approx \omega_0 \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2 \cdot \eta \cdot k^2}{\rho \cdot \omega_0} \right)^2 \right], \quad (13)$$

$$\delta = -2 \frac{\eta}{\rho} k^2 + \left(\frac{\eta \cdot k^2}{\rho} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{(2\omega_0)^{\frac{1}{2}}}, \quad (14)$$

де $\omega_0^2 = \frac{T_M \cdot k^3}{\rho}$. При отриманні (13) й

(14) було враховано внесок двох перших порядків малості. Необхідність обліку другого порядку малості в порівнянні з аналізом, що приведений в [9], обумовлювалось тим, що

безрозмірний параметр $\frac{\omega \rho}{\eta k^2}$, по якому проводиться розкладання при аналізі (12) досягає для води значення 0,3, що обумовлює необхідність врахування декількох порядків розкладу. Співвідношення (6), (8), (12) визначають функціональний вид амплітуди рельєфу зразка, що утворюється на вільній поверхні:

$$h(x, t) = \frac{2 \cdot k(1 - \beta^2)}{\rho \cdot \alpha^2(1 + \beta^2)} C_1 \cdot \sin(k \cdot x) \cdot \exp(\delta \cdot t - i \cdot \omega \cdot t) \quad (15)$$

При експериментальному дослідженні динаміки капілярних хвиль на вільній поверхні рідини, врахуємо [8], що при освітленні її лазерним пучком з інтенсивністю світла, розсіяного в тілесному

куті Ω , визначається величиною середньоквадратичного зсуву елемента коливної поверхні рідини:

$$\frac{dI}{d\Omega} = I_0 \frac{q^4}{(4 \cdot \pi)^2} \cdot \langle \tilde{h}^2 \rangle(\tilde{\omega}, k) \cdot \cos^3(\theta) \quad (16)$$

де I_0 - інтенсивність відображеного випромінювання, визначена для плоскої поверхні за допомогою формул Френеля, θ - кут падіння світла, q - хвильове число падаючого світла, знак $\langle \rangle$ позначає проведення операції усереднювання. Величина $\langle \tilde{h}^2 \rangle(\tilde{\omega}, k)$ залежить від ω , δ , k і є часовим Фур'є перетворенням [8] автокореляційної функції $\langle h(k, t) h(k, t + \tau) \rangle$

($\tilde{\omega}$ - спряжена t змінна), яке з врахуванням співвідношення (15), можна представити в наступному вигляді:

$$\langle \tilde{h}^2 \rangle(\tilde{\omega}, k) = \left(\frac{k(1 - \beta^2)}{\rho \cdot \alpha^2(1 + \beta^2)} \right)^2 \cdot \langle C_1^2 \rangle \cdot \frac{1}{(\tilde{\omega} - \omega)^2 + \delta^2} \quad (17)$$

Величина $\langle C_1^2 \rangle$ визначається особливостями флуктуаційної генерації капілярних хвиль. Об'єднуючи співвідношення (16) і (17), одержуємо:

$$\frac{dI}{d\Omega} = I_0 \frac{q^4}{(4 \cdot \pi)^2} \cdot \left(\frac{k(1 - \beta^2)}{\rho \cdot \alpha^2(1 + \beta^2)} \right)^2 \cdot \langle C_1^2 \rangle \cdot \frac{1}{(\tilde{\omega} - \omega)^2 + \delta^2} \cdot \cos^3(\theta) \quad (18)$$

Із співвідношення (17) видно, що величина δ визначає напівширину густини спектральної потужності капілярних хвиль вільної поверхні рідини, ω - положення точки максимуму густини спектральної потужності капілярних хвиль на осі часових частот. Вимірюючи ω , δ і використовуючи співвідношення (13) і (14), визначають ефективну в'язкість і поверхневий натяг суспензії, що реалізується при хвильовому русі з частотою ω і хвильовим вектором k .

Результати досліджень та їх обговорення.

Досліджувалися спектри капілярних хвиль дистилату води та водного розчину NADH, їх динаміка під впливом електромагнітного випромінювання міліметрового діапазону. Результати досліджень наведені на Рис.2,3

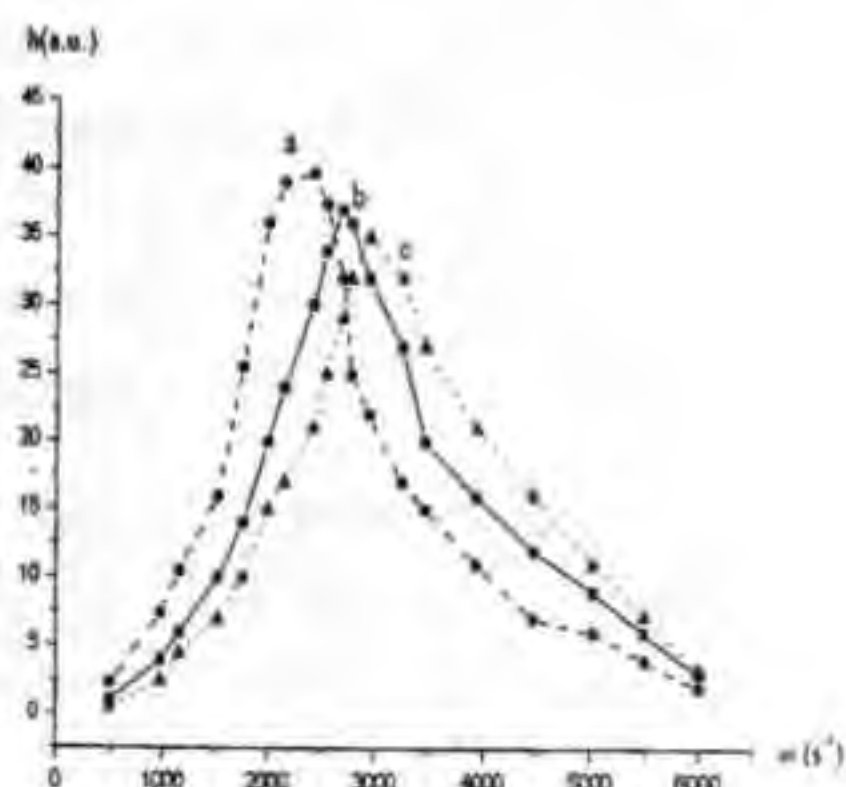


Рис.2. Залежність амплітуди капілярних хвиль на поверхні водного розчину NADH від частоти для трьох довжин хвиль (0,034 см – крива а, 0,029 см. - б, 0,24 - з см) при $t = 20^\circ \text{C}$.

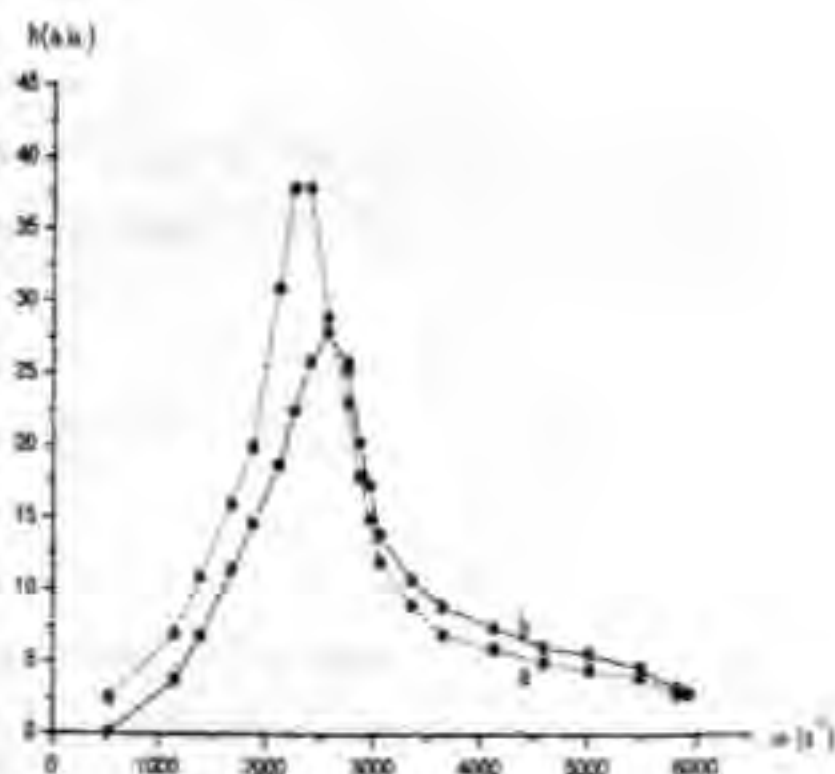


Рис.3. Залежність амплітуди капілярних хвиль на поверхні дистилату води від частоти коливань для двох довжин хвиль (0,034 см - крива а, 0,029 см. - б) при $t = 20^\circ \text{C}$.

Представлені дані дозволяють визначити в'язкість приповерхневого шару рідкого зразка та його коефіцієнт поверхневого натягу. Результати обробки даних досліджень впливу експонування протягом 10 хвилин міліметровим випромінюванням верств дистилату води та

водного розчину NADH наведені на Рис.4 і Рис.5 відповідно.

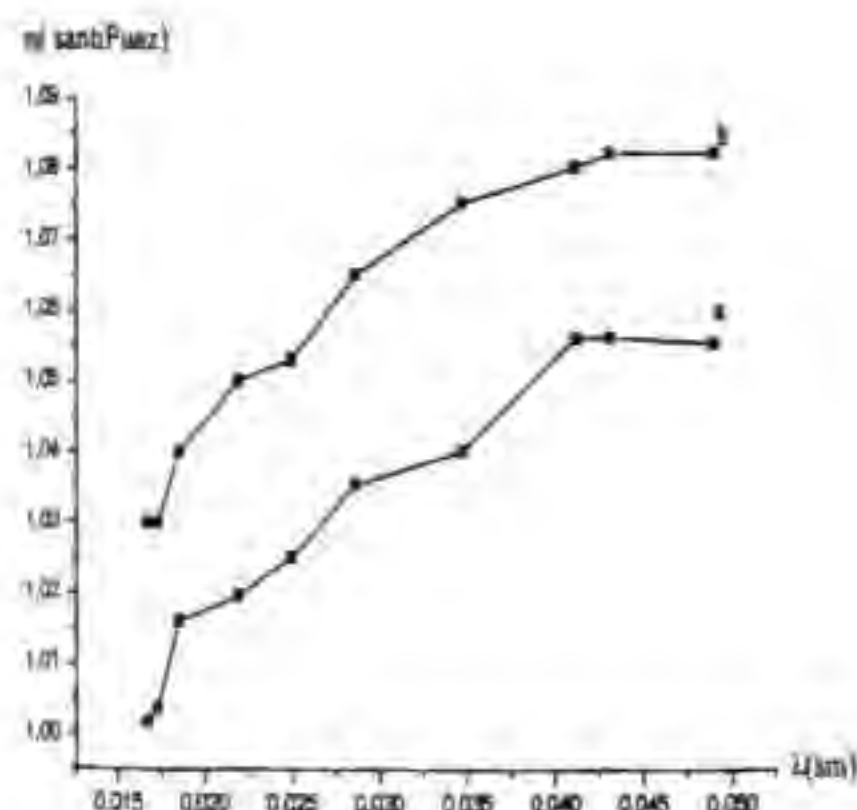


Рис.4. Залежність в'язкості від довжини капілярної хвилі на поверхні води до дистилату (крива - а) і після (b) експонування зразка

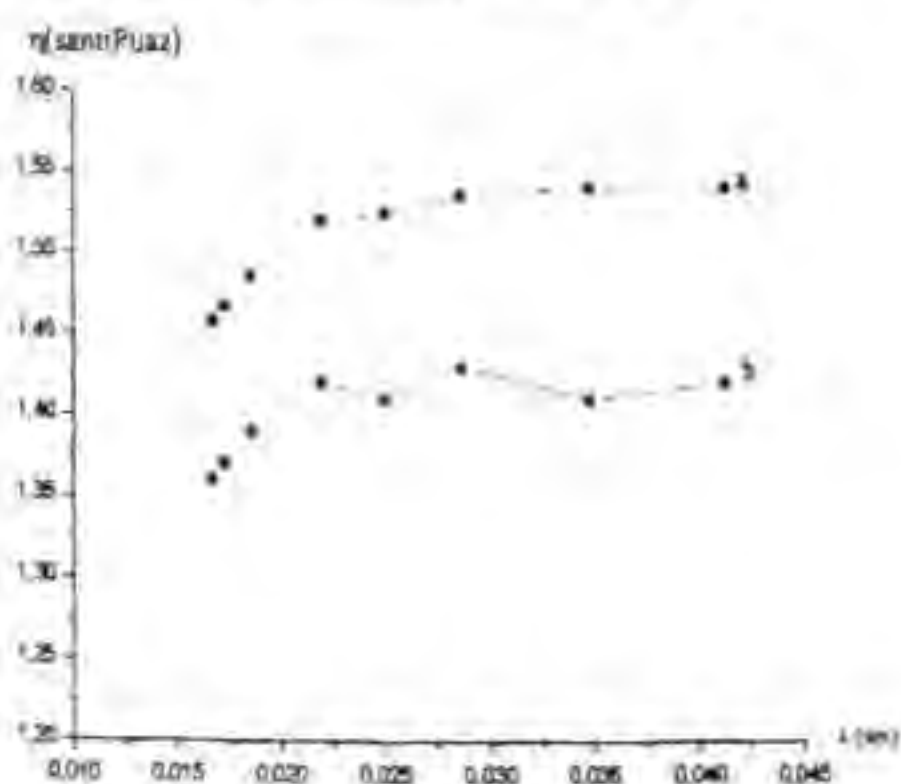


Рис.5. Залежність в'язкості від довжини капілярної хвилі на поверхні розчину NADH у дистилаті води до (крива - а) і після (b) експонування зразка

З наведених на Рис.4 даних видно, що в'язкість приповерхневого шару (з товщиною порядку 0,015 - 0,05 см) дистилату води під дією електромагнітного опромінення зростає на величину близько 3%. При зменшенні часу експонування до 2 хвилин величина зміни в'язкості під дією опромінення зменшується до ~1%, що порівнянно з точністю вимірювань (розбіг даних при проведенні повторюваних вимірювань). Такий характер поведінки в'язкості виключає можливість чисто теплового результату дії випромінювання. Вибір

температури вимірювань визначався тим, що при ній амплітуда хвиль була достатньою для реєстрації (при зменшенні температури амплітуда убыває, а кінцевість радіуса кривизни вільної поверхні зразка не сильно впливала на точність вимірів).

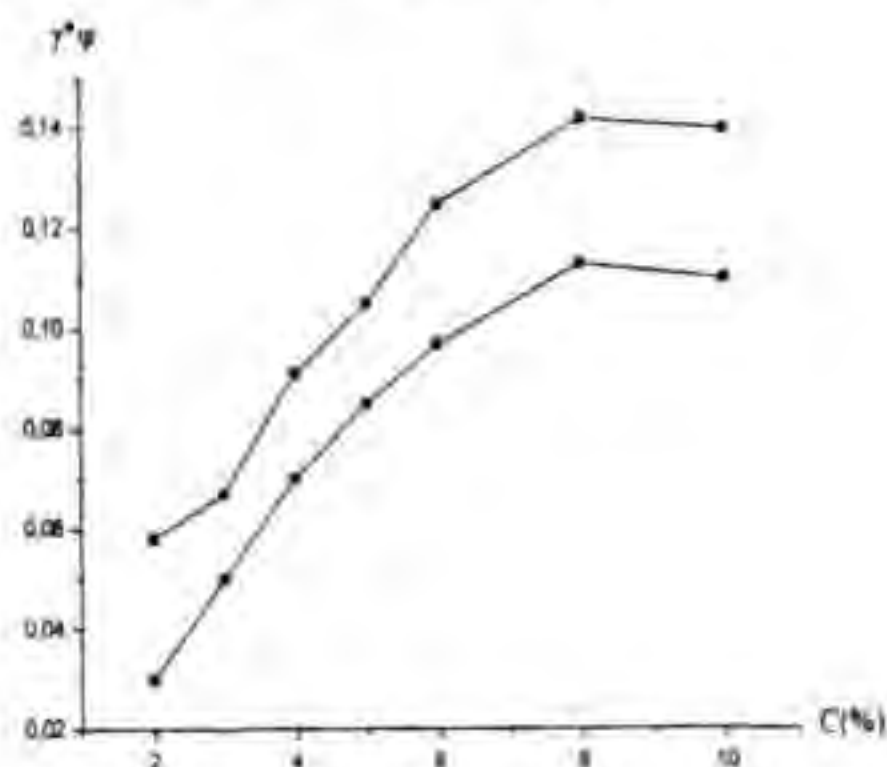


Рис.6.Залежність індукованого мм - випромінювання зміни добутку параметра форми молекули NADH у водному розчині (γ) та відносного об'єму (φ) розчинених частинок суспензії від вагової концентрації NADH.

Наявність нетривіальної залежності в'язкості дистилату води від тривалості дії та інтенсивності міліметрового випромінювання може свідчити або про вплив випромінювання на флуктуаційні процеси, що визначають властивості капілярних хвиль, або про можливе структурування дистилату води, що залежить від властивостей випромінювання.

Рис.5 ілюструє зміну в'язкості приповерхневих шарів 5% розчину NADH у дистилаті води під дією міліметрового випромінювання при температурі 20 C°. Видно, що під дією електромагнітного випромінювання в'язкість розчину зменшується. Такий вплив опромінення міліметровим електромагнітним випромінюванням на в'язкість розчину контрастує впливом цього ж чинника на в'язкість дистилату води. Можливим поясненням цього результату може бути припущення, що під дією опромінення:

а) змінюється конформаційний стан молекул NADH - наприклад, форма молекули стає ближче

до сферичної - змінюється параметр γ (формула (7));

б) зменшується товщина шару пов'язаних з NADH молекул води, що призводить до зменшення ефективного обсягу φ (7) зважених у воді частинок.

Висновки

1. Вплив електромагнітного випромінювання (потужність 10-4Вт/см², частота 60ГГц, протягом 5 - 20 хв.) на бідистиллят води призводить до зростання значень в'язкості. Зміни значень в'язкості і поверхневого натягу розчинів залежить від просторової частоти капілярних хвиль. Це дозволяє висловити припущення про структурування води і зміну конформації молекул NADH або товщини оточуючої їх оболонці молекул зв'язаної води, що знаходяться у водному розчині під впливом електромагнітного випромінювання слабкої інтенсивності. У разі концентрації NADH 3-5% вагових відсотків зміна в'язкості розчину досягало 10-14%, в'язкість дистилляту води при цьому збільшувалась на 2 - 3 відсотки.

2. Показана можливість керування конформаційним станом молекул NADH що знаходяться у водному середовищі за допомогою електромагнітного випромінювання, що дає можливість змінювати оптичні і біологічні характеристики молекул NADH.

3. В рамках моделі слабо в'язкої нестисливої ньютонівської рідини з урахуванням двох порядків малості отримано дисперсійне рівняння, що визначає зв'язок між частотою капілярних хвиль і їх довжиною хвилі

Список використаних джерел

1. Х.А. Аршакян, С.В. Пушкарев, Е.С. Половняков, Ю.П. Мешалкин, Диагностические возможности индуцированной лазером флуоресценции смывов с шейки матки при онкологических заболеваниях, БЮЛЛЕТЕНЬ СО РАМН, №1 (123), 2007, 30 - 34).

2. Lipson R.A., Baldes E.J., Olsen A.M. The use of a derivative of hematoporphyrin in tumor

detection // J. Nat. Cancer Inst. — 1961, vol.26, 1 - 11.

3. Демченко А.П. Люминесценция и динамика структуры белков / А.П. Демченко. — Киев: Наукова думка. — 1988. — с.280.

4. Клинов С.В., Чеботарева Н.А., Курганов Б.Н., Литвак Ж.И., Жилина Т.А., Пекель Н.Д., Березовский В.М., Взаимодействие мышечной гликогенфосфорилазы с флавинадениннуклеотидом и его аналогами // Биоорганическая химия, 1985, т.11, №2, 196 - 204.

5. Christophorov LN., Holzwarth A R; Kharkyanen V N, Conformational regulation in bacterial single reactions, // Ukr. J. Phys., journal 2003; Vol.48, №7, :672 - 680.

6. М.А.Заболотный, Е.А.Андреев, Ю.М.Барабаш, Э.Л.Мартинчук, В.Н.Харкянен, Модель фотоиндуцированных конформационных изменений в реакционных центрах биомолекул, // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, 2008, том.6, №1, С. 277 - 290.

7. А. Л. Дмитриев, Оптические системы передачи информации, Санкт-Петербург, 2007, с.98.

8. Shih L.B. "Surface Fluctuation spectroscopy: A novel technique for characterizing liquid interfaces" // Rev. Sci. Instrum., 1984, vol.55. №5, 716-726.

9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика, 1986, с.738.

10. Кляцкин В., Гурарий Д., Когерентные явления с стохастических динамических системах, Успехи физ. наук, 1999, т.169, №2, 171 - 207.

11. Левич В.Г. Физико - химическая гидродинамика, М, Изд. Ан СССР, 1952, с 538.

12. Сухарев В.И., Векшин Н.Л., Диаметр глобулы и некоторые электронно - конформационные свойства флавопротеинового фрагмента митохондриальной NADH - дегидрогеназы по данным флуоресцентной спектроскопии // Биоорганическая химия, 2000, т.26, №10, 723 - 727.

Надійшла до редколегії 07.06.10

УДК 621.315.592

Боровий М.О.^{1*}, к. ф.-м. н., доцент
Гололобов Ю.П.^{2*}, д. ф.-м. н., професор
Ісаєнко Г.Л.², ст. викладач
Сальник А.В.¹, студентка

Вплив атомів домішки Fe на структурні фазові переходи в кристалах TlGaSe_2

В інтервалі температур $T = 90\text{--}300\text{ K}$ проведені порівняльні рентгенографічні дослідження і виміряна діелектрична проникність ϵ кристалів TlGaSe_2 та $\text{TlGaSe}_2\langle\text{Fe}\rangle$ з концентрацією Fe 0.5 mol %. Виявлено, що легування атомами Fe не впливає на температурне положення сегнето-електричного фазового переходу (ФП), що відбувається при $T_c = 108\text{ K}$, але одночасно призводить до зростання температури ФП, пов'язаного з утворенням неспівмірно модульованої структури. Аналіз отриманих експериментальних даних свідчить про те, що ФП I роду при температурі $T_c = 108\text{ K}$, найімовірніше, пов'язаний із переміщенням іонів Tl^+ .

Ключові слова: шаруваті кристали, структура, діелектрична проникність, фазовий перехід, неспівмірна фаза.

*E-mail: borovoy@univ.kiev.ua, gololo@ukr.net

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

²Національний транспортний університет, Київ, Україна

Талій-галієвий діселенід (TlGaSe_2) та його ізоструктурний аналог талій-індієвий дисульфід (TlInS_2) є сегнетоелектриками-напівпровідниками з шаруватою структурою кристалічної ґратки. Ці потрійні халькогенідні сполуки привертають до себе увагу в першу чергу незвичайністю і складністю структурних ФП, що відбуваються в інтервалі температур $T = 100\text{--}300\text{ K}$ і пов'язані з утворенням неспівмірно модульованої структури. Надійно встановлено існування в кристалах TlGaSe_2 двох

N.A. Borovoy, Ph.D.,
Yu.P. Gololobov, Dr. Sc.
G.L. Isayenko, sen. teach.
A.V. Salnik, student

Influence of Fe admixture atoms on structural phase transitions in the TlGaSe_2 crystals

In the temperatures interval $T = 90\text{--}300\text{ K}$ comparative X rays researches are conducted and dielectric permeability ϵ of TlGaSe_2 and $\text{TlGaSe}_2\langle\text{Fe}\rangle$ crystals with 0.5 mol % Fe concentration is measured. It is discovered that alloying the atoms of Fe does not influence on temperature position of ferroelectric phase transition (PT), which takes place at $T_c = 108\text{ K}$, but at the same time results in an increase of temperature of PT related to formation of the incommensurate modulated structure. The analysis of the received experimental data testifies that most probably first order PT at the temperature $T_c = 108\text{ K}$ is caused by movement of Tl^+ ions.

Keywords: layered crystals, structure, dielectric permeability, phase transition, incommensurate phase.

структурних перетворень: ФП II роду, який призводить до утворення неспівмірної фази з хвильовим вектором $\mathbf{k}_1 = (\delta, 0, 0.25)$, (де $\delta = 0.04$ – параметр неспівмірності), а також сегнето-електричного ФП I роду, що супроводжується збільшенням учетверо розмірів елементарної комірки уздовж осі C [1]. Що стосується температур ФП, то їх значення в роботах різних авторів декілька відрізняються, а саме, для ФП II роду $T_c = 115\text{--}120\text{ K}$, а для ФП I роду $T_c = 107\text{--}110\text{ K}$ [2]. Результати досліджень впливу різ-

Представлено: член-кор. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Макара В.А

них зовнішніх факторів, таких, як постійне електричне поле [3], одноосна механічна напружка [4], електромагнітне поле [5], періодична зміна температури [6], дозволили істотно просунутися в розумінні фізичних механізмів фазових перетворень, що відбуваються в кристалах $TlGaSe_2$. Особливий інтерес викликають дослідження впливу атомів домішок на ФП, оскільки їх результати часто дозволяють прояснити структурні аспекти таких перетворень [7-10]. Зокрема, в [8] показано, що в кристалічній ґратці $TlInS_2$ катіонні домішки залежно від іонних радіусів займають різні структурні позиції, внаслідок чого по-різному впливають не тільки на температури, але й на перебіг ФП в таких кристалах. Стосовно впливу атомів домішки Fe на структурні перетворення в $TlGaSe_2$ в літературі можна знайти досить суперечливі дані. Так, згідно [11], атоми Fe заміщують атоми Ga в кристалічній решітці, при цьому відбувається зсув двох зазначених раніше ФП в область нижчих температур. Однак, у відповідності до результатів [12], наявність в кристалах $TlGaSe_2$ атомів домішки Fe призводить до підвищення температур обох ФП. Для усунення такої неоднозначності, а також з метою з'ясування фізичних механізмів вказаних ФП в інтервалі температур $T = 90-300$ K було проведено порівняльні рентгенографічні дослідження і отримано температурні залежності діелектричної проникності $\epsilon(T)$ нелегованих $TlGaSe_2$ і легованих $TlGaSe_2<Fe>$ кристалів.

Методика експерименту

Рентгенівські дифрактограми монокристалічних зразків при відбиванні від площин сколювання (00 l) було отримано з використанням дифрактометру ДРОН-4-07 (випромінювання $Co\ K\alpha_{1,2}$, монохроматор $Ge\ (111)$). Зразки розміщувалися у стандартній низькотемпературній камері УРНТ-180. Точність визначення ве-

личини параметра c елементарної комірки кристалів була не гірша за 0,002 Å (детально методику наведено в [13]). Діелектричну проникність ϵ у напрямі, перпендикулярному шарам у кристалі, вимірювали на частоті 1 кГц за допомогою мосту змінного струму Е7-8. Температура підтримувалася постійною з точністю до 0,5 K з використанням терморегулятора ВРТ-2 і вимірювалася мідь-константановою термопарою (точність 0,1 K). Зразки являли собою ті ж самі пластинки, які використовувалися при рентгенографічних дослідженнях (типові розміри 6x8x2 мм³). За контакти використовували індієво-галієву пасту, яку наносили на заздалегідь обезжирені дзеркальні поверхні природного сколювання (001). Досліджувалися зразки, виготовлені з нелегованих зливок $TlGaSe_2$ і зливок $TlGaSe_2<Fe>$ з концентрацією Fe 0,5 mol %. Зливки було вирошено модифікованим методом Бріджмена.

Експериментальні результати і їх обговорення

Характерною рисою шаруватих кристалів є їх схильність до утворення політипних модифікацій, які можуть суттєво відрізнятися за своїми фізичними властивостями [13]. Оскільки для кристалів $TlGaSe_2$ виявлено існування декількох політипів, які відрізняються значеннями параметра c елементарної комірки [1], був проведений попередній рентгеноструктурний аналіз зразків. Повна ідентичність числа і кутового положення структурних рефлексів типу (00 l) для зразків кристалів $TlGaSe_2$ і $TlGaSe_2<Fe>$ свідчить про те, що вони відносяться до одного і того ж політипу з параметром елементарної комірки $c = 15,63$ Å.

Температурні залежності параметра $c(T)$ елементарної комірки кристалів $TlGaSe_2$ і $TlGaSe_2<Fe>$ для інтервалу температур $T = 90-200$ K представлено на рис.1. Як видно, на

обох залежностях $c(T)$ при температурі $T_c = 108$ K спостерігаються стрибкоподібні зміни параметра c ($\Delta c = 0,007$ Å), які відповідають ФП I роду, зареєстрованому у кристалах $TlGaSe_2$ раніше [14, 15]. Слід зазначити, що при температурах $T < T_c = 108$ K для обох типів кристалів було зафіксовано структурні рефлексії, які свідчать про збільшення вчетверо розмірів елементарної комірки вздовж осі C . Окрім вказаних аномалій на залежностях $c(T)$ спостерігаються злами: для нелегованих зразків при температурі $T_f = 119$ K, а для легованих при вищій температурі $T_f = 123$ K. Для кристалів $TlGaSe_2$ такий злам відповідає ФП II роду, в результаті якого виникає неспівмірно модульована структура [1, 14-17], тобто, згідно з результатами рентгенографічних досліджень, легування кристалів $TlGaSe_2$ атомами Fe призводить до розширення температурної області існування не-

співмірної фази на $\Delta T = 4$ K, подібно до того, як це виявлено для його ізоструктурного аналога $TlInS_2$ [7].

На рис.2 представлено результати вимірювань діелектричної проникності ϵ тих самих зразків $TlGaSe_2$ і $TlGaSe_2<Fe>$ в інтервалі температур $T = 90-140$ K, які досліджувалися рентгеноструктурно. Як видно, для обох зразків при температурі $T_c \approx 108$ K також, як і на залежностях $c(T)$, спостерігаються аномалії: для $TlGaSe_2<Fe>$ вона має вид чітко вираженого максимуму, а для $TlGaSe_2$ – форму вигину. Крім того, на залежностях $\epsilon(T)$ для цих зразків спостерігаються також максимуми, розташовані при температурах $T = 116$ K і $T = 114$ K, відповідно, тобто для легованого зразка максимум на залежності $\epsilon(T)$ знаходиться при більш високій температурі.

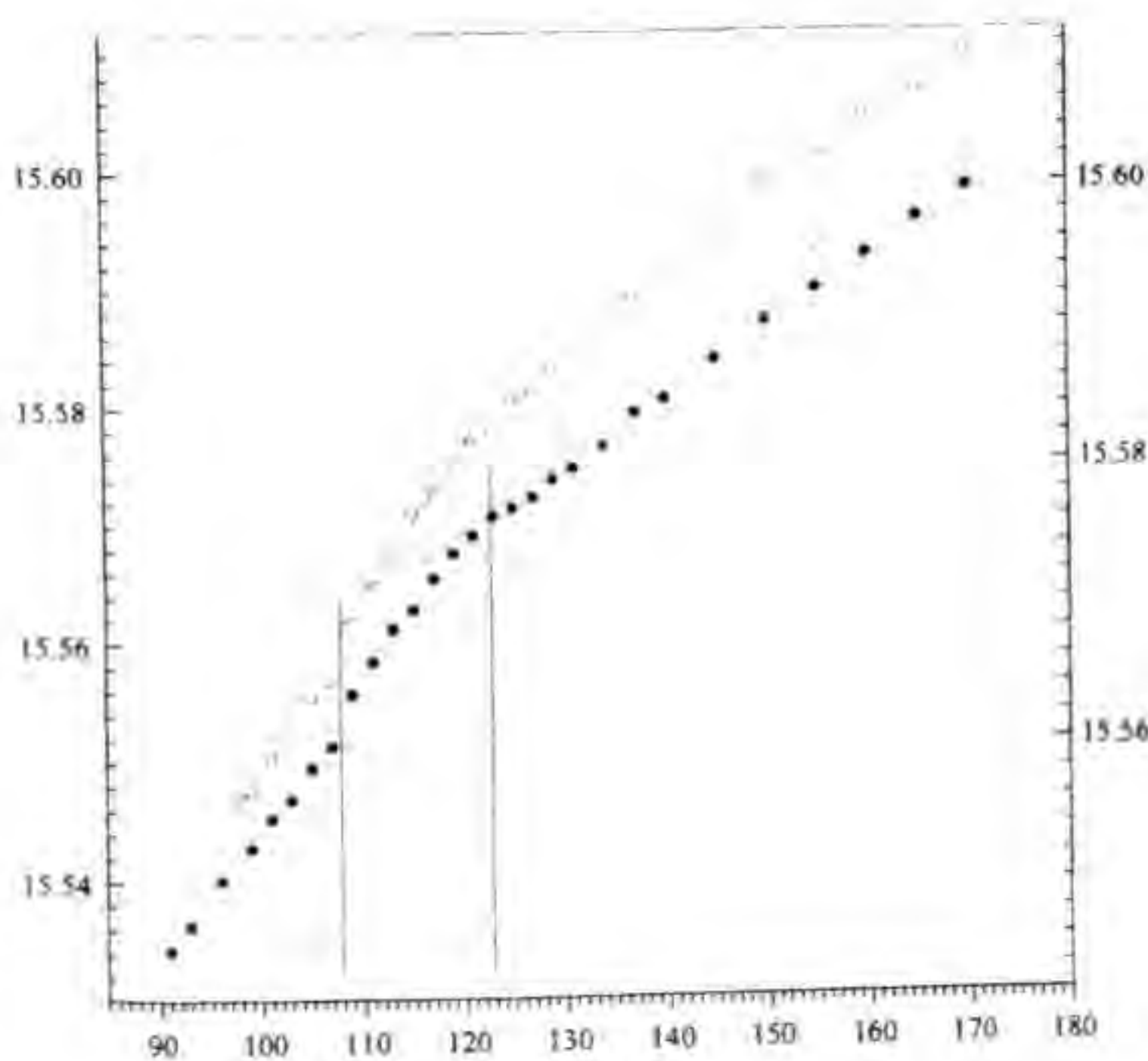


Рис.1. Температурні залежності параметра $c(T)$ елементарної комірки кристалів: ○ – $TlGaSe_2$; ● – $TlGaSe_2<Fe>$. Відрізки прямих – результати лінійної апроксимації методом найменших квадратів на відповідних ділянках залежностей $c(T)$.

Важливо, що за виглядом залежності $\varepsilon(T)$ співпадають з аналогічними залежностями, отриманими для кристалів $TlGaSe_2$ раніше, тобто для досліджуваного політипу $TlGaSe_2<Fe>$ на температурних залежностях $\varepsilon(T)$ у температурному інтервалі $T=105-117\text{ K}$ спостерігаються два максимуми, перший з яких, відповідає ФП I роду, а другий – ФП II роду [5, 10]. Слід зазначити, що розмитий характер, а також близькість за величиною і температурним положенням цих максимумів приводять до того, що для кристалів $TlGaSe_2$ і $TlGaSe_2<Fe>$ вид результуючої кривої $\varepsilon(T)$, а також температурне положення на ній вказаних максимумів залежать від форми, абсолютної величини, а також дійсного температурного положення кожного з них. У зв'язку з цим, виникає питання про коректність визначення температур ФП в кристалах $TlGaSe_2$ за температурним положенням максимумів на залежностях $\varepsilon(T)$ [5, 10]. Можливо, цим і обумовлене неповне співпадання температурного положення максимумів на залежностях $\varepsilon(T)$ і аномалій, виявлених на залежностях параметра елементарної комірки $c(T)$ тих же зразків $TlGaSe_2$ і $TlGaSe_2<Fe>$.

Таким чином, отримані експериментальні дані свідчать про те, що легування кристалів $TlGaSe_2$ атомами Fe з концентрацією 0,5 mol % не призводить до зміни температурного положення структурного ФП I роду, що відбувається при $T_c = 108\text{ K}$. В той же час, спостерігається зсув температури ФП II роду в область вищих температур, що викликає розширення температурної області існування неспівмірної фази.

Перш за все, слід зазначити, що представлені результати дещо відрізняються від даних, отриманих раніше для кристалів $TlInS_2$. Так, згідно [7], наявність атомів домішки Fe в $TlInS_2$ також призводить до розширення температурного інтервалу існування неспівмірної

фази, але при цьому температури обох ФП, які обмежують цей інтервал, зміщуються вниз за температурною шкалою. На наш погляд, вказані відмінності можуть бути обумовлені неповним збігом фізичних механізмів фазових перетворень, що відбуваються в цих ізоструктурних з'єднаннях. А саме, сегнетоелектричний ФП I роду, що відбувається в $TlGaSe_2$ при температурі $T_c = 108\text{ K}$, пов'язаний із зсувом атомів Tl [2, 18], в той же час, для кристалів $TlInS_2$ активною групою, відповідальною за фазові перетворення, у тому числі і за сегнетоелектричні, є тетраedr InS_4 [18]. Зупинимось на цьому детальніше, для чого розглянемо структуру кристалів $TlGaSe_2$.

Як відомо, кристали $TlGaSe_2$ належать до сімейства потрійних халькогенідних з'єднань з загальною формулою $Tl'(M^{3+}X^{2-})_2$, де $M = Ga, In$; $X = Se, S$ або Te . Структура кристалічної ґратки $TlGaSe_2$ зображена на рис.3. Основною структурною одиницею кристалів $TlGaSe_2$ є комплекс тетраедра Ga_4Se_{10} , який, у свою чергу, складається з чотирьох $GaSe_4$ тетраедрів. Комплекси Ga_4Se_{10} з'єднуються між собою загальними вершинами, в яких знаходяться атоми Se , і утворюють аніонні шари, паралельні площини ab . Два сусідніх шари в елементарній комірці розвернуто один відносно іншого на кут 90° і між собою ці шари пов'язані операцією інверсії. Іони Tl' займають тригонально-призматичні порожнини, які утворюються між цими комплексами.

При утворенні кристалічної ґратки $TlGaSe_2$ зовнішні електронні оболонки двох атомів Se добудовуються до стабільної конфігурації (s^2p^6) за рахунок трьох ($4s^24p^1$) електронів Ga і одного ($6p^1$) електрона Tl , при цьому у середині шарів домінує іонно-ковалентний зв'язок, а взаємодію між шарами забезпечують слабкі сили ван-дер-ваальсівського типу. Завдяки таким особливостям структури $TlGaSe_2$ належить

до шаруватих кристалів з яскраво вираженою площиною спайності (001), паралельно якій

кристали легко сколюються і утворюють дзеркальні поверхні.

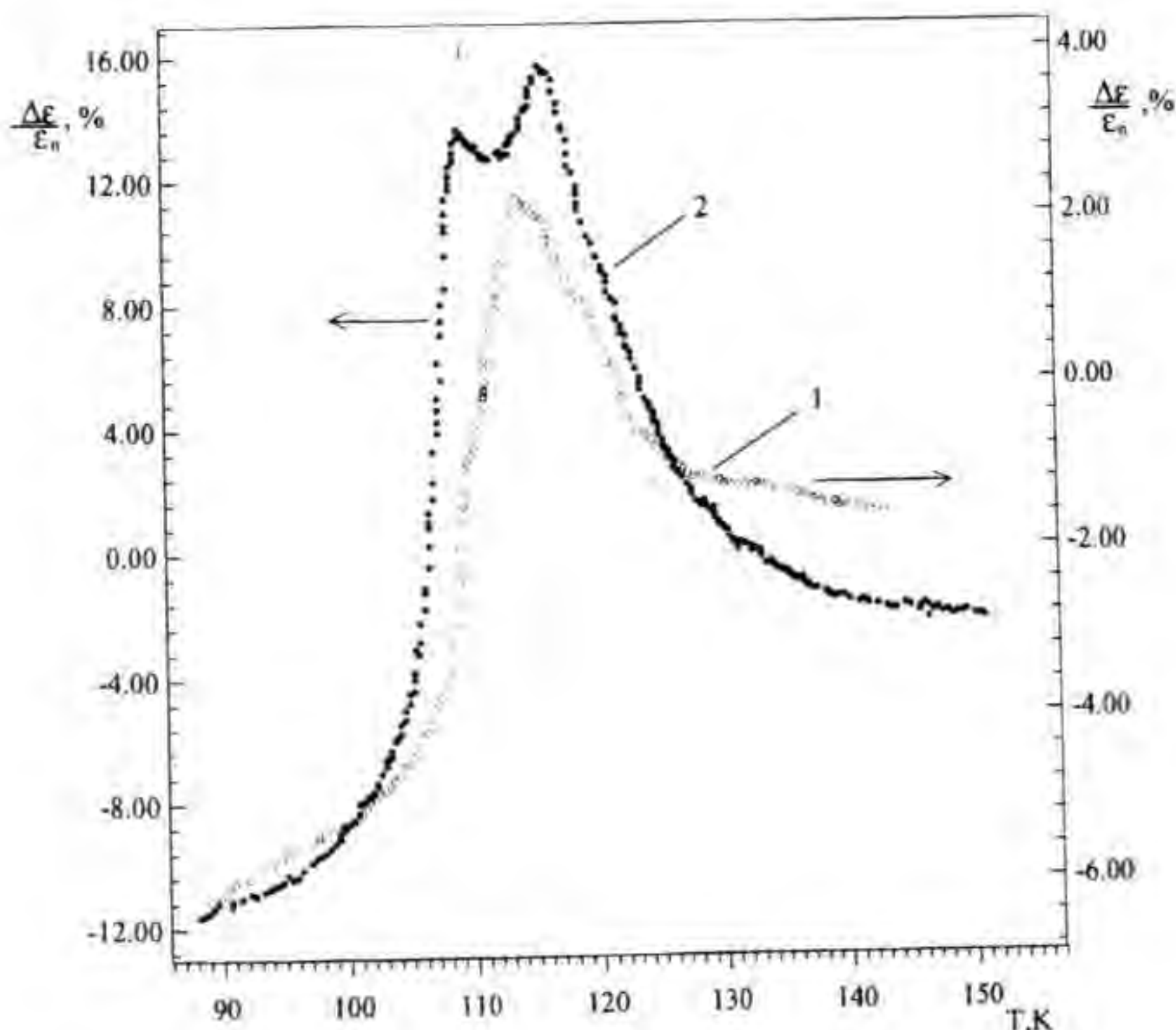


Рис. 2. Температурні залежності відносної діелектричної проникності $\Delta\epsilon/\epsilon_n = (\epsilon - \epsilon_n)/\epsilon_n$ (ϵ_n – діелектрична проникність при кімнатній температурі) тих же зразків: 1 – $TlGaSe_2$; 2 – $TlGaSe_2<Fe>$

Крім основної площини спайності існують ще дві додаткові, значно менш виражені. Вони перпендикулярні до площини (001) і розташовані під кутом 45° до осей X' та Y' тобто співпадають з осями $[110]$ та $[-110]$, вздовж яких направлені ланцюжки іонів Tl^+ [14]. Крім того, дослідження методом ЯМР квадрупольних ефектів в кристалах $TlGaSe_2$ також показали, що зв'язок між атомами Ga і Tl є слабким і здійснюється через перекриваючі електронні оболонки атомів, які знаходяться на відстані, не меншій, ніж $3,93 \text{ \AA}$ [20]. Як встановлено, атоми домішки Fe в кристалічній ґратці $TlGaSe_2$ заміщують атоми Ga в центрах тетра-

едрів $GaSe_4$ [21], тому таке заміщення не повинно істотно впливати на коливання атомів катіонної підрешітки, а отже, і на температурне положення ФП, який обумовлений зсувом іонів Tl^+ . Як зазначалося, в ізоstrukturних кристалах $TlInS_2$ сегнетоелектричний ФП I роду обумовлений трансформацією тетраедра InS_4 . Оскільки атоми домішки Fe заміщують атоми In в центрах таких тетраедрів [22], вплив домішки Fe на температурне положення зазначеного ФП, на відміну від кристалів $TlGaSe_2$, повинен бути суттєвим.

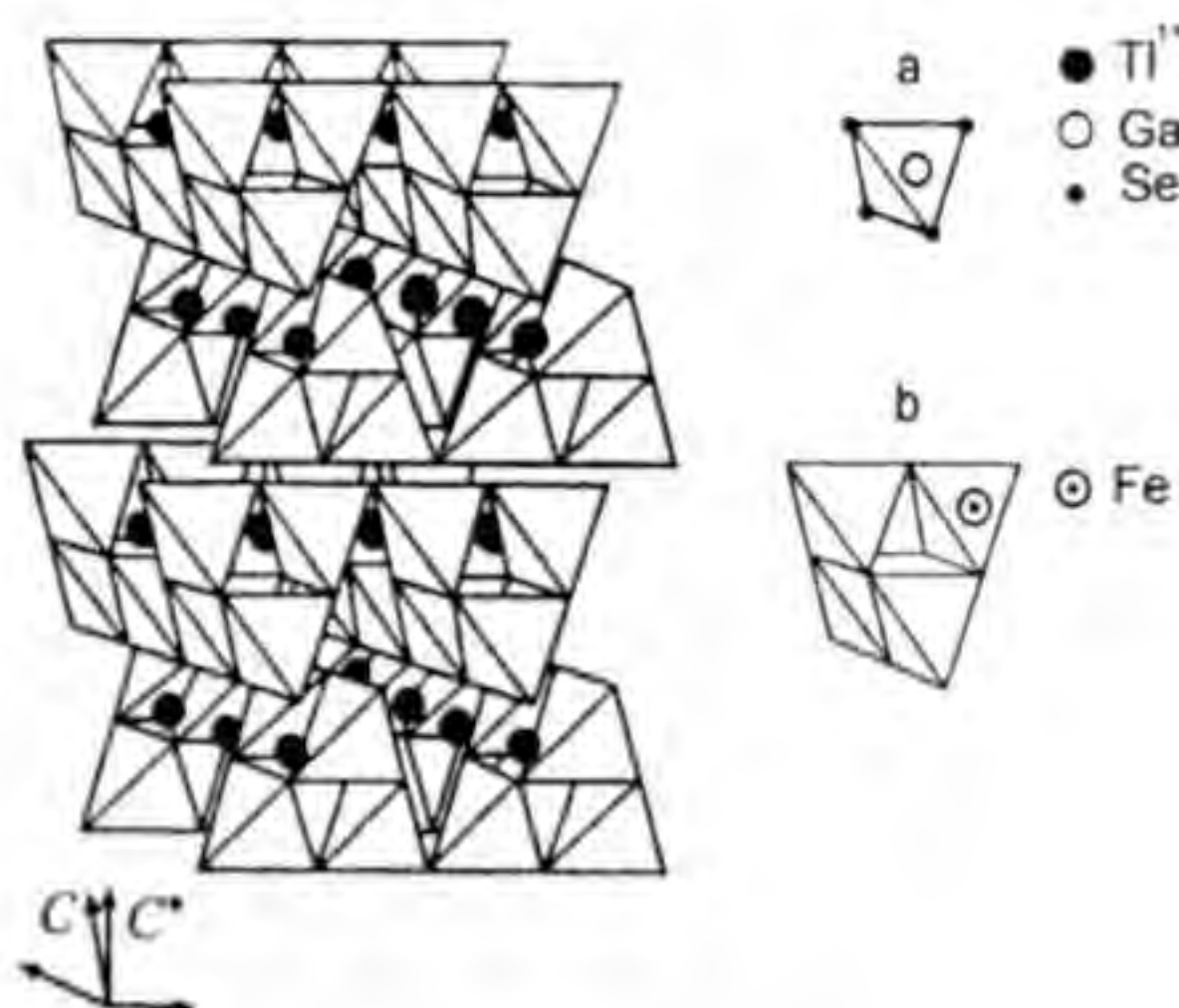


Рис. 3. Структурні елементи кристалів $TlGaSe_2$: а) тетраедр $GaSe_4$; б) тетраедричний комплекс Ga_4Se_{10} , який складається із чотирьох тетраедрів $GaSe_4$; C – кристалографічна вісь, C^* – псевдотетрагональна вісь

Стосовно ФП II роду, то підвищення його температури в легованих атомами Fe кристалах $TlGaSe_2$ можна пояснити, якщо вважати, що фізичні механізми утворення неспівмірних фаз в кристалах $TlGaSe_2$ і $TlInS_2$ є схожими. Як показано в [8], наявність атомів домішок, які створюють в кристалах $TlInS_2$ внутрішній тиск, подібно до дії зовнішнього гідростатичного тиску і призводить до підвищення температур ФП. Оскільки величина іонного радіусу Fe^{3+} ($R_{Fe} = 0,743 \text{ \AA}$) перевищує відповідну величину для Ga^{3+} ($R_{Ga} = 0,714 \text{ \AA}$), то наявність атомів домішки Fe в кристалах $TlGaSe_2$ створює внутрішній тиск, який, у свою чергу, і призводить до підвищення температури ФП II роду, так само, як і зовнішній тиск [23]. (Іонні радіуси хімічних елементів визначені, з урахуванням координаційного числа, за таблицею Шеннона-Прюїтта).

Висновки

Виявлено, що у кристалах $TlGaSe_2$ ФП I

роду, який відбувається при температурі $T_c = 108 \text{ K}$, супроводжується не тільки мультиплікацією елементарної комірки вздовж осі C , але і стрибкоподібною зміною параметра c ($\Delta c = 0,007 \text{ \AA}$). ФП II роду, зумовленому утворенням при температурі $T_c = 119 \text{ K}$ неспівмірної фази, відповідає злам на температурній залежності $c(T)$. Легування кристалів $TlGaSe_2$ атомами Fe в концентрації $0,5 \text{ mol \%}$ не змінює температурного положення структурного ФП при $T_c = 108 \text{ K}$ і не впливає на величину зміни параметра c елементарної комірки. В той же час, для зразків $TlGaSe_2<Fe>$ спостерігається зсув зламу на залежності $c(T)$ у бік вищих температур на $\Delta T = 4 \text{ K}$, що свідчить про розширення для них температурної області існування неспівмірної фази. Аналіз отриманих експериментальних даних, проведений з урахуванням особливостей будови кристалічної решітки $TlGaSe_2$, структурних позицій, зайнятих в ній атомами домішки Fe , а також специфіки хімічних зв'язків між атомами цього з'єднання, сві-

дчить на користь того, що структурний ФП I
роду, що відбувається при температурі $T_c = 108$
K, зумовлений зміщеннями іонів Tl^+ .

Список використаних джерел

1. Kashida S. Neutron Scattering Study of the Structural Phase Transitions in $TlGaSe_2$ / S.Kashida, Y. Kobayashi // Journal of Korean Physical Society. – 1998. – V. 32. – P.40.
2. Gallium and thallium NMR study of phase transitions and incommensurability in the layered semiconductor $TlGaSe_2$ / A.M. Panich, D.C. Ailion, S. Kashida [et al.] // Physical Review B. – 2004. – V. 69. – P.245319.
3. Особенности поведения слоистых кристаллов $TlInS_2$ и $TlGaSe_2$ вблизи фазовых переходов в постоянном электрическом поле / К.Р. Аллахвердиев, Н.Д. Ахмед-заде, Т.Г. Мамедов [и др.] // Физика низких температур. – 2000. – В. 26. – С.76.
4. Сулейманов Р.А. Модель последовательности структурных фазовых превращений в слоистом кристалле $TlInS_2$. / Р.А. Сулейманов, М.Ю. Сеидов, Ф.М. Салаев // Физика твердого тела. – 1991. – В. 33. – С.1797.
5. Влияние внешних воздействий на эффект термической памяти несоизмеримой фазы в сегнетоэлектриках-полупроводниках $TlGaSe_2$ / Ю. Сеидов Мир-Гасан, Р.А. Сулейманов, С.С. Бабаев [и др.] // Физика твердого тела. – 2008. – В. 50. – С.105.
6. Акустическая эмиссия и эффекты памяти в кристаллах $TlGaSe_2$ / Ю.П. Голлобов, В.М. Перга, И.Н. Саливонов [и др.] // Физика твердого тела. – 1992. – В. 34. – С.115.
7. Relaxor properties of Fe-doped $TlInS_2$ / Р.М. Сардарлы, О.А. Самедов, И.Ш. Садыхов [и др.] // Физика твердого тела. – 2003. – В. 45. – С 1067.
8. Влияние катионных примесей на фазовые переходы в соединении $TlInS_2$ / Р.М. Сардарлы, О.А. Самедов, А.И. Наджафов [и др.] // Физика твердого тела. – 2003. – В. 45. – С.1085.
9. Сардарлы Р.М. $TlInS_2$, легированный Cr и Mn – новый релаксорный сегнетоэлектрик / Р.М. Сардарлы, О.А. Самедов, И.Ш. Садыхов // Физика твердого тела. – 2004. – В. 46. – С.1852.
10. The effect of impurities on the phase transitions in the ferroelectric semiconductors $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$ / S.S. Babaev, E. Basaran, T.G. Mammadov [et al.] // Journal of Physics.: Condens. Matter. – 2005. – V. 17. – С.1985.
11. Самедов О.А. Релаксорные сегнетоэлектрики на основе $TlInS_2$ и $TlGaSe_2$. / О.А. Самедов // Автореф. дис. доктора ф.-м. наук: 01.04.10/ МО Азербайджанской Республики БГУ. – Баку. – 2005. – С.46.
12. Исследование влияния частичного замещения галлия железом на сегнетоэлектрический фазовый переход в монокристаллах $TlGaSe_2$ методом анализа

- края Урбаха. / А.И. Гасанов, Э.М. Керимова, Н.З. Гасанов [и др.] // Сборник трудов межд. конф. «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, Розсип. – 21-25 сент. 2004. – С.131.
13. О сегнетоэлектрическом фазовом переходе в политипах кристаллов β - TlInS_2 / Н.А. Боровой, Ю.П. Гололобов, А.Н. Горб [и др.] // Физика твердого тела. – 2008. – В. 50, № 10. – С.1866-1870.
14. Сегнетоэлектричество и структурные фазовые переходы в кристаллах семейства TlInS_2 / В.А. Алиев, К.Р. Аллахвердиев, А.И. Баранов [и др.] // Физика твердого тела. – 1984. – В. 26. – С.1271.
15. The structure of the paraelectric and incommensurate phase of TlGaSe_2 / D.F. McMorrow, R.A. Cowley, P.D. Hatton [et al.] // Journal of Physics C: Condens. Matter. – 1990. – V. 2. – P.3699.
16. Боровой Н.А. Особенности поведения структуры кристаллов TlGaSe_2 при периодическом изменении температуры / Н.А. Боровой, Ю.П. Гололобов // Физика твердого тела. – 1997. – В. 39. – С.1652.
17. Влияние политипии на структурные фазовые превращения в кристаллах TlGaSe_2 . / Н.А. Боровой, Ю.П. Гололобов, Г.Л. Исаенко [и др.] // Физика твердого тела. – 2009. – В. 51, №11. – С.2229-2232.
18. Structural phase transitions in Fe^{3+} -doped ferroelectric TlGaSe_2 crystal / M. Asikgoz, S. Kazan, F.A. Mikailov [et al.] // Solid State Communications. – 2008. – V. 145. – P.539.
19. EPR study of the structural phase transitions in chromium doped thallium indium disulphide / F.A. Mikailov, B.Z. Rameev, A.M. Kulibekov [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2003. – V. 258-259. – P.419.
20. Квадрупольные эффекты и фазовый переход в TlGaSe_2 / С.П. Габуда, С.Г. Козлова, Н.Т. Мамедов [и др.] // Физика твердого тела. – 1990. – В. 32. – С.1707.
21. EPR spectra of Fe^{3+} centers in layered TlGaSe_2 single crystal / F.A. Mikailov, B.Z. Rameev, S. Kazan [et al.] // Solid State Communications. – 2005. – V. 133. – P.389.
22. Electron paramagnetic resonance investigations of Fe^{3+} doped TlInS_2 single crystal / F.A. Mikailov, B.Z. Rameev, S. Kazan [et al.] // Solid State Communications. – 2005. – V.135, №.1-2. – P. 114-118.
23. Барична поведінка діелектричної проникності в кристалах TlGaSe_2 / О.О. Гомоннай, М.Ю. Риган, І.Ю. Роман [и др.] // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології. – 2008. – №4. – С.36-40.

Надійшла до редколегії 26.01.10

УДК 577.3

Броварець О.О., аспірантка
Говорун Д.М., доктор біолог. наук, професор,
член-кореспондент НАН України

Чи продукує 5-бромурацил та його аналоги точкові помилки реплікації ДНК? Результати квантово-механічного аналізу

Вперше квантово-механічним дослідженням на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) досліджено вплив галоген-похідних урацилу (Ura) – $^3\text{BrUra}$, $^3\text{ClUra}$ та $^3\text{FUra}$ – на виникнення помилок реплікації ДНК.

Встановлено, що галогенізація Ura, з одного боку, знижуючи бар'єр переходу у середньому на 2,4 ккал/моль, разом із тим збільшує заселеність пар $\text{Ade}^*\text{-}^3\text{XUra}$ та $\text{Ade-}^3\text{XUra}^*$ ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}, \text{F}$), продукуючи точкові помилки реплікації, а саме – транзиції $\text{Ade-Thy} \rightarrow \text{Gua-Cyt}$ з частотою, що перевищує частоту аналогічних спонтанних помилок у 2,85 рази (для $^3\text{ClUra}$ та $^3\text{FUra}$) та 4,20 раз (для $^3\text{BrUra}$).

Ключові слова: галогенізація, урацил, помилки реплікації ДНК, частота мутацій.

*E-mail: brovarets@list.ru

Вступ. 5-Бромурацил ($^3\text{BrUra}$) та його аналоги – 5-хлор ($^3\text{ClUra}$) та 5-фторурацил ($^3\text{FUra}$), – класичні мутагени – похідні нуклеотидних основ, для яких на ДНК досконало вивчена молекулярно-біологічними та генетичними методами [1–6]. В той же час у літературі так і не викристалізувалися внутрішньонепротивні фізичні уявлення щодо молекулярних механізмів мутагенної дії цих сполук та їхнє належне квантово-механічне обґрунтування (див., наприклад, [7, 8] та наведену і детально проаналізовану там бібліографію). Такий стан речей пояснюється, на наш погляд, тим, що аналогічна ситуація має місце і щодо механізмів спонтанного точкового мутагенезу.

Грунтуючись на якісно нових фізичних уявленнях [9] про елементарне походження

Brovarets O.O., research student
Hovorun D.M., dr. of biol. sciences, prof.,
corresponding member of NAS of Ukraine

Whether 5-bromouracil and its analogues produce DNA point replication errors? Results of quantum-chemical analysis

For the first time using quantum-chemical methods of investigation on the MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory it is studied the halogenic derivatives of the uracil (Ura) influence – $^3\text{BrUra}$, $^3\text{ClUra}$ and $^3\text{FUra}$ – on the DNA replication errors arising.

It is established that Ura halogenization, from the one side, decreases the transition barrier on the 2,4 kcal/mol, at the same time increases the $\text{Ade}^*\text{-}^3\text{XUra}$ and $\text{Ade-}^3\text{XUra}^*$ ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}, \text{F}$) base pairs population and in such a way producing point replication errors, exactly – transitions $\text{Ade-Thy} \rightarrow \text{Gua-Cyt}$ with frequency that exceeds the frequency of appropriate spontaneous point mutations in 2,85 times (for $^3\text{ClUra}$ and $^3\text{FUra}$) and 4,20 (for $^3\text{BrUra}$).

Key words: halogenization, uracil, DNA replication errors, frequency of mutations.

спонтанних точкових помилок включення, нещодавно нами було встановлено, що $^3\text{BrUra}$ продукує помилки включення з частотою, яка перевищує у 39 разів частоту аналогічних спонтанних помилок, помітно знижуючи бар'єр перетворення зміщеної (воблівської) пари $\text{Gua-}^3\text{BrUra}$ у пару за участі мутагенного таутомера Gua (позначено зірочкою) $\text{Gua}^*\text{-}^3\text{BrUra}$, квазіізоморфну Вотсон-Криківським.

Ця робота покликана відповісти на біофізично важливе запитання – чи може $^3\text{BrUra}$ і його аналоги – $^3\text{ClUra}$ і $^3\text{FUra}$ – продукувати точкові помилки реплікації ДНК. Її теоретичним підґрунтям є описаний нами раніше новий фізичний механізм таутомеризації Вотсон-Криківської пари Ade-Thy [10].

Таблиця 1

Електронно-топологічні, геометричні, спектрально-коливальні та енергетичні характеристики міжмолекулярних водневих зв'язків у досліджених парах основ ДНК за участі Ade, ⁵XUra (X=Br, Cl, F) та їхніх мутагенних таутомерів і в перехідних станах TS їхнього взаємного перетворення (див. також рис.)

рис.)

Пари основ та їхні перехідні стани	H-зв'язок АН...В	ρ , ат.од.	$\Delta\rho$, ат.од.	$100 \cdot$	$d_{A \dots H}$, Å	$d_{H \dots B}$, Å	$\angle AN \dots B$, град	Δd_{AN} , Å	$-\Delta\nu$, см ⁻¹	E_{NH} , ккал/моль
Ade- ⁵ BrUra	N6H...O4	0,026	0,092	4,48	2,949	1,929	173,3	0,014	209,9	4,30
	N3H...N1	0,040	0,093	0,65	2,881	1,835	178,7	0,033	663,4	8,24
	C2H...O2	0,004	0,014	3,34	3,972	2,886	132,4	0,00022	-7,1	0,88
Ade*- ⁵ BrUra	N3H...N6	0,043	0,095	6,17	2,851	1,798	173,5	0,040	788,0	9,03
	N1H...O6	0,033	0,112	4,39	2,857	1,828	176,5	0,017	286,4	5,18
Ade- ⁵ BrUra*	O4H...N1	0,055	0,100	5,21	2,706	1,692	171,4	0,044	1016,6	10,31
	C2H...N3	0,009	0,026	0,78	3,707	2,622	129,0	-0,00062	-20,9	1,26
TS _{5BrUra}	N6H...O4	0,020	0,064	18,2	3,114	2,082	152,8	0,024	344,2	2,69*
	N6H...N3	0,023	0,076	7,67	3,091	2,058	141,2	0,024	344,2	3,07*
	N1H...N3	0,021	0,074	57,5	3,145	2,099	139,5	0,032	471,4	2,41*
	N1H...O2	0,034	0,101	4,05	2,892	1,847	150,7	0,032	471,4	4,44*
Ade- ⁵ ClUra	N6H...O4	0,024	0,088	4,25	2,969	1,951	172,1	0,012	210,2	4,31
	N3H...N1	0,043	0,094	6,35	2,856	1,806	179,7	0,038	657,0	8,20
	C2H...O2	0,005	0,016	1,80	3,888	2,803	133,4	0,00012	-5,7	0,84
Ade*- ⁵ ClUra	N3H...N6	0,047	0,096	6,02	2,820	1,761	174,2	0,046	788,2	9,03
	N1H...O6	0,032	0,110	4,40	2,866	1,837	175,7	0,017	287,5	5,19
Ade- ⁵ ClUra*	O4H...N1	0,063	0,097	4,93	2,665	1,641	170,5	0,054	1037,0	10,42
	C2H...N3	0,008	0,023	2,51	3,761	2,676	127,3	-0,00068	-20,4	1,28
TS _{5ClUra}	N6H...O4	0,020	0,064	17,0	3,111	2,081	153,2	0,022	343,7	2,68*
	N6H...N3	0,022	0,073	9,09	3,110	2,080	141,1	0,022	343,7	3,07*
	N1H...N3	0,021	0,072	59,2	3,155	2,111	139,9	0,030	471,6	2,43*
	N1H...O2	0,033	0,099	3,86	2,900	1,856	150,8	0,030	471,6	4,42*
Ade- ⁵ FUra	N6H...O4	0,025	0,089	4,21	2,964	1,945	172,4	0,012	208,4	4,28
	N3H...N1	0,042	0,094	6,37	2,862	1,812	179,4	0,037	658,6	8,21
	C2H...O2	0,005	0,015	2,18	3,910	2,825	133,1	0,00014	-6,5	0,84
Ade*- ⁵ FUra	N3H...N6	0,047	0,096	6,03	175,3	1,763	174,245	0,046	797,5	9,08
	N1H...O6	0,032	0,111	4,40	2,864	1,835	175,9	0,017	293,0	5,25
Ade- ⁵ FUra*	O4H...N1	0,063	0,097	4,93	2,665	1,640	170,7	0,055	1048,1	10,48
	C2H...N3	0,008	0,024	2,14	3,748	2,663	127,6	-0,00068	-19,8	1,29
TS _{5FUra}	N6H...O4	0,019	0,064	17,0	3,112	2,082	153,3	0,022	339,0	2,65*
	N6H...N3	0,022	0,073	9,12	3,111	2,081	141,0	0,022	339,0	3,05*
	N1H...N3	0,021	0,073	57,0	3,152	2,108	139,9	0,030	471,4	2,48*
	N1H...O2	0,033	0,099	3,97	2,902	1,858	150,7	0,030	471,4	4,37*

Примітка: ρ і $\Delta\rho$ – значення електронної густини і лапласіану електронної густини у критичній точці відповідно; ϵ – еліптичність; E_{NH} – енергія H-зв'язку, розрахована за методом Йогансена [11]; $d_{A \dots B}$, $d_{H \dots B}$ – відстань між атомами А і В та Н і В, відповідно, які беруть участь у H-зв'язку; $\angle AN \dots B$ – кут H-зв'язування; $-\Delta\nu$ – зсув частоти валентного коливання $\nu(AN)$ при втягуванні групи АН у H-зв'язок; Δd_{AN} – подовження хімічного зв'язку АН при утворенні H-зв'язку АН...В. Енергію біфурактивних H-зв'язків та зв'язків, позначених зірочкою (*), розраховували враховуючи формулу [12].

Об'єкти, предмет та методи дослідження. Об'єкти дослідження – пари Ade-⁵BrUra, Ade-⁵ClUra і Ade-⁵FUra та пари за участі їхніх мутагенних таутомерів – Ade*-⁵BrUra, Ade-⁵BrUra*, Ade*-⁵ClUra, Ade-⁵ClUra*, Ade*-⁵FUra і Ade-⁵FUra*, а також перехідні стани їхнього взаємного перетворення перенесенням протону. Предмет дослідження – вплив заміни метильної (Me) групи Thy на галоген (Br, Cl, F) на енергетичні та кінетичні характеристики таутомеризації відповідних Вотсон-Криківських пар Ade-⁵BrUra, Ade-⁵ClUra і Ade-⁵FUra у порівнянні з парою Ade·Thy.

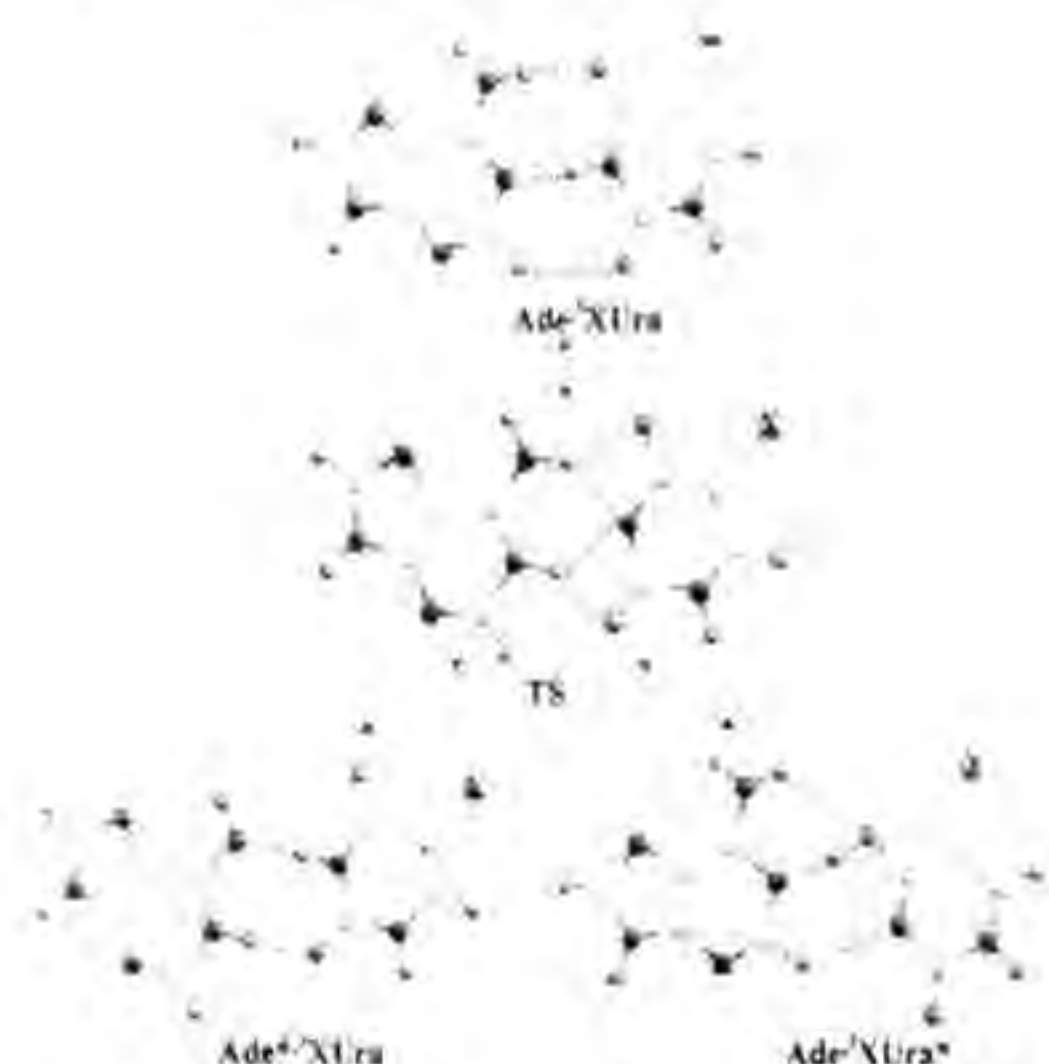


Рис. Геометрична структура досліджуваних пар основ за участі галоген-похідних $^5\text{XUra}$ ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}, \text{F}$) та низькоенергетичний перехідний станів їхньої таутомеризації. Пунктиром позначено Н-зв'язки

Квантово-механічні методи дослідження (MP2/6-311++G(2df,pd)/B3LYP/6-311++G(d,p)) детально описано в роботі [10].

Результати та їхнє обговорення. Отримані результати подано на рисунку та в таблицях 1-3.

таутомеризації: як і в канонічній парі [10] вона відбувається через спільний плоско-симетричний перехідний стан – іонну пару $\text{Ade}^+\cdot^5\text{XUra}^-$ ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}, \text{F}$), охоплену чотирма водневими (Н) зв'язками, структура якої близька до аналогічної у парі $\text{Ade}\cdot\text{Thy}$ (рис., табл.1). При цьому таутомеризовані стани $\text{Ade}^+\cdot^5\text{XUra}$ і $\text{Ade}\cdot^5\text{XUra}^*$ є динамічно стійкими, оскільки в усіх випадках величина зворотного бар'єру таутомеризації перевищує енергію стабілізації Гіббса таутомеризованих пар. Заслуговує на особливу увагу те, що не підвищуючи бар'єру таутомеризації, галогенізація спричиняє, з одного боку, зниження відносної енергії Гіббса таутомеризованої пари $\text{Ade}\cdot^5\text{XUra}^*$ (на 0,89, 0,65 та 0,66 ккал/моль для пар $\text{Ade}\cdot^5\text{BrUra}^*$, $\text{Ade}\cdot^5\text{ClUra}^*$ та $\text{Ade}\cdot^5\text{FUra}^*$ відповідно), підвищуючи, з іншого, відносну енергію на 0,17 ккал/моль пар $\text{Ade}^+\cdot^5\text{BrUra}$ і $\text{Ade}^+\cdot^5\text{ClUra}$. Це означає, що галогенові похідні урацилу $^5\text{XUra}$ ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}, \text{F}$) продукують точкові помилки реплікації, а саме - транзиції $\text{Ade}\cdot\text{Thy} \rightarrow \text{Gua}\cdot\text{Cyt}$ - з частотою, що перевищує за кімнатної температури частоту аналогічних спонтанних помилок у $k=\exp(0,65/0,62)=2,85$ рази, причому

Таблиця 2

Енергетичні характеристики (у ккал/моль за стандартних умов) досліджених пар нуклеотидних основ $\text{Ade}, ^5\text{XUra}$ ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}, \text{F}$) та їхніх мутагенних таутомерів і перехідних станів їхнього взаємного перетворення

Комплекси	$\sum E_{\text{HB}}$	$-\Delta E_{\text{int}}$	$-\frac{\sum E_{\text{HB}}}{E_{\text{int}}}, \%$	$-\Delta G_{\text{int}}$
$\text{Ade}\cdot^5\text{BrUra}$	13,43	15,61	85,98	2,18
$\text{Ade}^+\cdot^5\text{BrUra}$	14,21	18,81	75,52	6,81
$\text{Ade}\cdot^5\text{BrUra}^*$	11,57	15,41	75,07	3,56
TS_{BrUra}	12,61	117,53	10,73	103,51
$\text{Ade}\cdot^5\text{ClUra}$	13,35	15,58	85,68	2,21
$\text{Ade}^+\cdot^5\text{ClUra}$	14,22	18,84	75,47	6,83
$\text{Ade}\cdot^5\text{ClUra}^*$	11,70	15,41	75,97	3,37
TS_{ClUra}	12,61	117,99	10,68	104,00
$\text{Ade}\cdot^5\text{FUra}$	13,33	15,54	85,83	2,09
$\text{Ade}^+\cdot^5\text{FUra}$	14,33	19,07	75,17	7,07
$\text{Ade}\cdot^5\text{FUra}^*$	11,77	15,47	76,11	3,53
TS_{FUra}	12,56	118,89	10,56	104,73

Позначення: $\sum E_{\text{HB}}$ - сумарна енергія міжмолекулярних Н-зв'язків; $-\Delta E_{\text{int}}$ - електронна енергія взаємодії основ у парах; $-\Delta G_{\text{int}}$ - енергія Гіббса взаємодії основ у парах; ΔG - відносна енергія Гіббса.

Заміна Me-групи Thy на галоген у Вотсон-Криківській парі $\text{Ade}\cdot\text{Thy}$ не змінює характеру її

Таблиця 3

Відносні енергії Гіббса (у ккал/моль за стандартних умов) досліджуваних комплексів та перехідних станів їхнього взаємного перетворення

Комплекси	X=Me	X=Br	X=Cl	X=F
Ade ⁵ XUra	0,00	0,00	0,00	0,00
Ade* ⁵ XUra	9,94	10,11	10,11	9,72
Ade ⁵ XUra*	12,43	11,54	11,78	11,77
TS	17,39	15,21	15,27	14,99

⁵BrUra виявляється найефективнішим у цьому сенсі мутагеном, $k=4,20^1$.

Насамкінець доходимо висновку про те, що ⁵BrUra та ⁵ClUra перетворюючись у пари Ade⁵BrUra* та Ade⁵ClUra* продукують мутації з частотою, яка лише у 1,32 рази перевищує частоту аналогічних спонтанних транзицій, проте цей висновок не стосується ⁵FUra.

Висновок. Вперше встановлено, що галогенові похідні урацилу ⁵XUra (X=Br, Cl, F) продукують точкові помилки реплікації, а саме – транзиції Ade·Thy→Gua·Cyt з частотою, що ненабагато перевищує частоту спонтанних мутацій, які виникають аналогічним шляхом.

Беручи до уваги результати роботи [9], можна надійно думати, що основним механізмом мутагенного тиску на ДНК ⁵BrUra та його аналогів є точкові помилки включення. При цьому на протигаву ⁵BrUra, 2-амінопурин продукує аналогічні транзиції у 330 разів частіше, що повністю узгоджується з експериментальними даними [1].

Список використаних джерел

1. Litman R., Pardee A.B. The induction of mutants of bacteriophage T2 by 5-bromouracil. III. Nutritional and structural evidence regarding mutagenic action // Biochim. Biophys. Acta. – 1960. – 42. – P.117-130.
2. Rudner R., Shapiro H., Chargaff E. Distribution of 5-bromouracil among the pyrimidine clusters of the deoxyribonucleotide acid of E.coli // Nature. – 1962. – 195, N4837. – P.143-146.
3. Kramer G., Wittmann H.G., Schuster H. Die Erzeugung von Mutanten des Tabakmosaikvirus durch den Einbau von Fluorouracil in die Virusnukleinsäure // Z.Naturf. – 1964. – 19b. – P.46-51.

4. Cooper P.D. The mutation of polivirus by 5-fluorouracil // Virology. – 1964. – 22, N2. – P.186-192.
5. Hamus M., Kabelá M., Nachtigallová D., Hobza P. Mutagenic properties of 5-halogenuracils: correlated quantum chemical ab initio study // Biochemistry. – 2005. – 44, N5. – P.1701-1707.
6. Orozco M., Hernandez B., Luque F.J. Tautomerism of 1-methyl derivatives of uracil, thymine, 5-bromouracil. Is tautomerism the basis for the mutagenicity of 5-bromouridine? // J. Phys. Chem. B. – 1998. – 102, N26. – P.5228-5233.
7. Броварець О.О., Говорун Д.М. Стабільність мутагенних таутомерів урацилу та його галогенових похідних: результати квантово-механічного дослідження // Biopolymers and Cell. – 2010. – N3. – (in press).
8. Danilov V.I., van Mourik T., Kurita N., Wakabayashi H., Tsukamoto T., Hovorun D.M. On the mechanism of the mutagenic action of 5-bromouracil: a DFT study of uracil and 5-bromouracil in a water cluster // J. Phys. Chem. A. – 2009. – 113, N11. – P. 2233-2235.
9. Броварець О.О., Говорун Д.М. Новий фізико-хімічний механізм мутагенної дії 5-бромурацилу // Ukrainica Bioorganica Acta. – 2009. – 8, N2. – P.19-23.
10. Броварець О.О., Говорун Д.М. Новий фізико-хімічний механізм спонтанного перетворення Вотсон-Криківської пари основ ДНК Ade·Thy у пари за участі мутагенних таутомерів Ade*·Thy і Ade·Thy* // Ukrainica Bioorganica Acta. – 2010. – N1. – (in press).
11. Jorgensen A.V. Direct proportionality on the hydrogen bonding energy and the intensification of the stretching $\nu(XH)$ vibration in infrared spectra // Spectrochim. Acta. Part A. – 1999. – 55. – P. 1585-1612.
12. Espinosa E., Molins E., Lecomte C. Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities // Chem. Phys. Lett. – 1998. – 285. – P.170-173.

¹ Параметр k розраховано за формулою $k=\exp[(\Delta G(\text{Ade} \cdot \text{Thy}^*) - \Delta G(\text{Ade}^5 \text{XUra}^*)) / kT]$, тут ΔG – відносна енергія Гіббса, T – абсолютна температура, k – стала Больцмана.

УДК 519.9

П.В. Бурлій., Є.Є. Мельничук*, Жабітенко О.М.,
В.В. Козаченко.

Фототермоакустичний ефект в п'єзоелектричній пластині

Теоретично і експериментально досліджено фототермоакустичний ефект в п'єзоелектричній пластині з метою виявлення можливості визначення фізичних параметрів речовини п'єзоелектрика за допомогою фототермоакустичного методу і умов за яких це можливо. Теоретично задача розв'язувалась для кристалу класу бтт у вигляді тонкої пластини. Розрахована різниця потенціалів в довільному шарі п'єзоелектричної пластини як функція частоти модуляції світлового потоку, її фізичних і геометричних параметрів. Аналіз отриманої залежності показав, що якщо використовувати шаруваті пластини, то з амплітудно-частотних і фазово-частотних залежностей можна визначити деяку комбінацію п'єзоелектричних, піроелектричних, теплових та пружних параметрів п'єзоелектрика.

Ключові слова: Фототермоакустичний, п'єзоелектрик, шарувата структура.

*E-mail: lab_ph@ukr.net

Останнім часом знаходять все більше поширення методи, що базуються на фототермоакустичному ефекті (ФТА) [1,2]. Головним в них є використання теплових хвиль як носіїв інформації про властивості досліджуваної речовини. Дослідами ФТА ефекту в речовинах різних класів показано, що він має певні особливості [3-7]. Так, в п'єзоелектриках [5] може бути використаний п'єзоэффект самої досліджуваної речовини. В цій роботі розглянуто випадок відносно високих частот, коли довжина акустичних хвиль менша лінійних розмірів досліджуваного зразка. Експериментальні ж дослідження частіш за все проводяться при відносно низьких частотах, коли довжина акустичних хвиль набагато більша лінійних розмірів зразка. Тому дослідження ФТА ефекту в п'єзоелектрику у вигляді тонкої пластини, на наш погляд, є важливою задачею. Дана робота присвячена дослідженню ФТА ефекту в тонкій п'єзоелектричній пластині з метою з'ясування можливості визначення ФТА методом фізичних

P.V. Burliy, Ye.Ye. Melnychuk*, O.M. Zhabitenko,
V.V. Kozachenko

Photothermoacoustic effect in a piezoelectric plate

The photothermoacoustic effect in a piezoelectric plate was explored theoretically and experimentally. The purpose of examination was definition of an opportunity of a finding of parameters of a piezoelectric plate by a photothermoacoustic method. Theoretically problem was solved for crystal of 6mm class symmetry. The sample was a thin piezoelectric plate. The potential difference in an arbitrary layer of a piezoelectric plate as function of light stream modulation frequency of physical and geometrical parameters was carried out. From amplitude-frequency and phase-frequency dependence it is possible to define some combination of piezoelectric, pyroelectric, thermal and elastic parameters of a piezoelectric, the analysis of obtained dependences has shown.

Key Words: photothermoacoustic, piezoelectric, layered structure

параметрів речовини п'єзоелектрика та умов, за яких це можливо.

Розглянемо п'єзоелектрик класу бтт у вигляді тонкої пластини товщиною h (рис1). Будемо вважати його ізотропним відносно термopужних властивостей. Поверхня пластини ($z=0$) рівномірно опромінюється модульованим за інтенсивністю світлом:

$$P = (1/2)P_0(1 + \cos \omega t) \quad (1)$$

де P_0 – інтенсивність світла, ω – циклічна частота. Зразок поглинає модульоване за інтенсивністю світло, в ньому виникає змінне температурне поле, тобто генеруються теплові хвилі. За рахунок термopужного ефекту в зразку збуджуються акустичні коливання. Розглянемо випадок відносно низьких частот модуляції, коли довжина акустичних хвиль набагато більша лінійних розмірів пластини (квазістатичне наближення). В цьому випадку відмінними від нуля будуть тільки компоненти тензора напруг

T_{11} і T_{22} , причому $T_{11}=T_{22}=0$. Вони можуть бути представлені у вигляді [8]:

$$T_{11} = T_{22} \equiv T = E_s(C_1 - C_2 z - \alpha_T \theta) \quad (2)$$

де $E_s = E/(1-\sigma)$, α_T і θ – зведений модуль

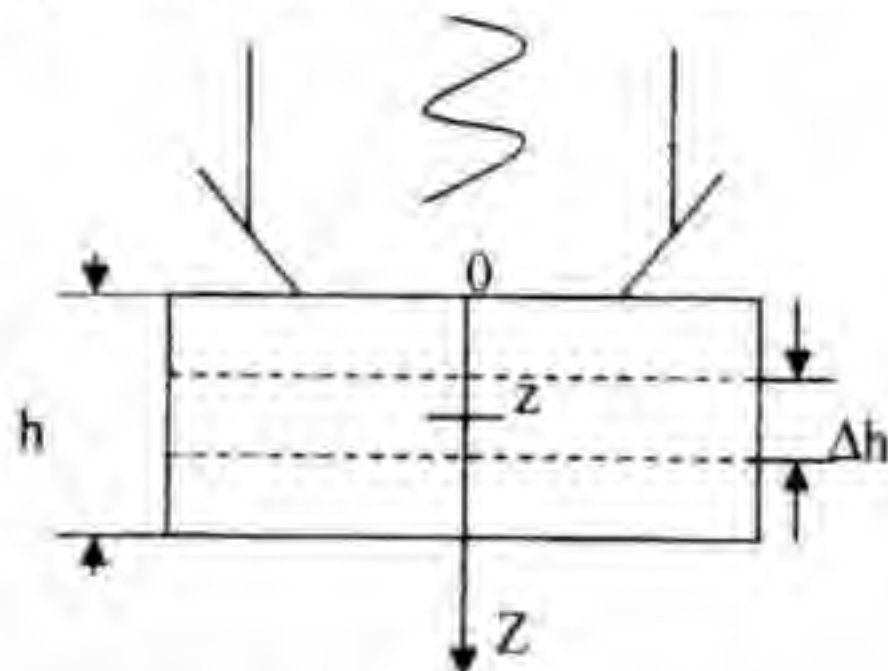


Рис.1. Геометрія задачі

Юнга (E – модуль Юнга, σ – коефіцієнт Пуассона), лінійний коефіцієнт теплового розширення і температура зразка, відповідно; C_1 та C_2 – сталі, які визначаються з граничних умов. Під дією термопружних напруж за рахунок прямого п'єзоефекту в зразку виникає п'єзоелектричне поле. Оскільки кристали класу *бтп* мають яскраво виражені піроелектричні властивості, то температурне поле теплових хвиль призведе ще й до виникнення піроелектричного поля. Розрахуємо різницю потенціалів U в шарі зразка товщиною Δh з координатою z :

$$U = - \int_{z-\frac{\Delta h}{2}}^{z+\frac{\Delta h}{2}} E_z dz \quad (3)$$

Індукція D_z електричного поля для випадку, який розглядається, запишеться:

$$D_z = \epsilon_{33} E_z + 2d_{31} T + p\theta \quad (4)$$

де ϵ_{33} , d_{31} , p – діелектрична проникність, п'єзомодуль та піроелектричний коефіцієнт, відповідно; θ – змінна складова температури.

Розглянемо випадок, коли світло поглинається в приповерхневому шарі зразка і на найнижчій частоті модуляції теплова хвиля повністю загасає в зразку (поверхні $z=h$ не досягає). Тоді, нехтуючи тепловим потоком в оточуюче зразок повітря, для розподілу температури по товщині зразка можна записати:

$$\theta = \theta_0 e^{-\gamma z} \quad (5)$$

де $\theta_0 = P_0/(2\chi\gamma)$, $\gamma = \sqrt{\omega/(2D_T)}(1+i)$, $D_T = \chi/(c\rho)$ – коефіцієнт теплової дифузії, χ , c , ρ – коефіцієнт теплопровідності, питома теплоємність та густина зразка, відповідно. Вважаємо, що вся енергія світла, яка поглинається зразком, перетворюється в тепло.

Оскільки зовнішні електричні поля відсутні, то за межами зразка індукція електричного поля дорівнює нулю, а нормальна складова індукції неперервна, звідки знаходимо:

$$E_z = - \frac{2d_{31} E_s \theta_0}{\epsilon_{33}} (C_1 - C_2 z - \alpha_T \theta) - \frac{P}{\epsilon_{33}} \theta \quad (6)$$

Підставляючи (6) в (3), для отримаємо $\hat{U}$:

$$\hat{U} = \frac{2d_{31} E_s \theta_0}{\epsilon_{33} \gamma} \left(\frac{\gamma}{\theta_0} (C_1 - C_2 z) \Delta h - \left(2\alpha - \frac{P}{d_{31} E_s} \right) e^{-\gamma h} \text{sh} \left(\gamma \frac{\Delta h}{2} \right) \right) \quad (7)$$

Сталі C_1 і C_2 знаходяться з граничних умов: рівність нулеві повних зусиль і повних моментів механічних напруж [8]:

$$\int_0^h T dz = 0, \quad \int_0^h T z dz = 0 \quad (8)$$

Підставляючи в (8) значення T з (2), знаходимо:

$$C_1 - C_2 z = \frac{6\alpha_T \theta_0}{\gamma h} \times \left(\left(Z - \frac{1}{2} \right) \frac{2}{\gamma h} - \left(Z - \frac{2}{3} \right) \right), \quad Z = z/h \quad (9)$$

І остаточно для U , маємо:

$$\hat{U} = U_m \left(3 \left(\left(Z - \frac{1}{2} \right) \frac{2}{\gamma h} - \left(Z - \frac{2}{3} \right) \right) - P_1 e^{-\gamma h} \text{sh} \left(\gamma \frac{\Delta h}{2} \right) \right) \quad (10)$$

$$\Delta H = \Delta h/h, \quad U_m = 4d_{31} \alpha_T E_s \theta_0 / \epsilon_{33} \gamma,$$

$$P_1 = 1 - p/(2d_{31} \alpha_T E_s)$$

Розглянемо шарувату структуру з п'єзоелектрика.

1. П'єзоперетворювач складається з двох однакових шарів товщиною $\Delta h/2$. Розрахуємо різницю потенціалів на кожному з шарів користуючись (10). На верхньому шарі:

$$\hat{U}_1 = U_m \left(5 - 6/(\gamma h) - 8P_1 (1 - e^{-\gamma \Delta h/2}) \right) / 8 \quad (11)$$

На нижньому шарі:

$$\hat{U}_2 = -U_m (1 - 6/(\gamma h) + 8P_y e^{-\gamma/2})/8 \quad (12)$$

Для відношення напруг, отримаємо:

$$\frac{\hat{U}_1}{\hat{U}_2} = -\frac{5 - 6\gamma h - 8P_y (1 - e^{-\gamma/2})}{1 - 6\gamma h + 8P_y e^{-\gamma/2}} \quad (13)$$

Для товщин шарів $h/2$, в яких в досліджуваному інтервалі частот теплова хвиля повністю загасає в першому шарі ($\gamma h/2 \gg 1$), маємо:

$$\frac{\hat{U}_1}{\hat{U}_2} = -\frac{5 - 6/(\gamma h) - 8P_y}{1 - 6/(\gamma h)} \quad (14)$$

З (14) знаходимо відношення амплітуд та різницю фазових зсувів

$$\frac{U_1}{U_2} = -\sqrt{\frac{((5 - 8P_y)/3 - 1/\sqrt{F})^2 + 1/F}{(1/3 - 1/\sqrt{F})^2 + 1/F}} \quad (15)$$

$$\lg(\varphi_1 - \varphi_2) = (2P_y - 1)/((5 - 8P_y)\sqrt{F}/12 - (3/2 - 2P_y) + 3\sqrt{F}/2) \quad (16)$$

де $F = \pi h^2 f / D_T$, $f = \omega/(2\pi)$ - лінійна частота модуляції потоку світла.

З (15) видно, що напруги, які знімаються з окремих шарів, мають протилежні знаки. При збільшенні частоти відношення амплітуд зменшується і прямує до постійної величини, яка дорівнює:

$$(U_1/U_2)_\infty = 8P_y - 5 \quad (17)$$

Вимірявши експериментально $(U_1/U_2)_\infty$, за (17) можна розрахувати P_y . А знаючи P_y , з фазово-частотної залежності (16), можна визначити коефіцієнт теплової дифузії D_T .

2. Зразок складається з 3-х шарів однакової товщини $\Delta h = 1/3$. Розрахуємо різницю потенціалів на кожному з шарів. Різниця потенціалів U_1 на першому від поверхні $z=0$, що опромінюється світлом шарі ($Z_1 = 1/6$) дорівнює:

$$U_1 = U_m (1 - 4/(3\gamma h) - P_y (1 - e^{-\gamma/3}))/2 \quad (18)$$

Різниця потенціалів на другому від поверхні $z=0$ шарі ($Z_2 = 1/2$) дорівнює:

$$U_2 = U_m (1 - 3P_y e^{-\gamma/3} (1 - e^{-\gamma/3}))/6 \quad (19)$$

Різниця потенціалів на третьому від поверхні $z=0$ шарі ($Z_3 = 5/6$) дорівнює:

$$U_3 = U_m (4/(\gamma h) - 1 - 3P_y e^{-2\gamma/3})/6 \quad (20)$$

Для випадку, коли теплова хвиля повністю загасає в шарі товщиною $h/3$, вирази для $\hat{U}_1$, $\hat{U}_2$ та $\hat{U}_3$ суттєво спрощуються і вони наступні:

$$\hat{U}_1 = U_m (1 - 4/(3\gamma h) - P_y)/2 \quad (21)$$

$$\hat{U}_2 = U_m/6 \quad (22)$$

$$\hat{U}_3 = U_m (4/(\gamma h) - 1)/6 \quad (23)$$

Для відношення напруг $\hat{U}_1/\hat{U}_2$ і $\hat{U}_3/\hat{U}_2$ отримуємо

$$\hat{U}_1/\hat{U}_2 = 3 - 4/(\gamma h) - 3P_y \quad (24)$$

$$\hat{U}_3/\hat{U}_2 = 4/(\gamma h) - 1 \quad (25)$$

З (24) і (25) знаходимо амплітудно-частотні та фазово-частотні залежності для відношення амплітуд U_1/U_2 і U_3/U_2 та різниці фаз $(\varphi_1 - \varphi_2)$ і $(\varphi_3 - \varphi_2)$ сигналів, що знімаються з окремих шарів зразка:

$$\frac{U_1}{U_2} = 3\sqrt{\left(1 - \frac{2}{3\sqrt{F}} - P_y\right)^2 + \left(\frac{2}{3\sqrt{F}}\right)^2} \quad (26)$$

$$\lg(\varphi_1 - \varphi_2) = 2/(3(1 - P_y)\sqrt{F} - 2) \quad (27)$$

$$\frac{U_3}{U_2} = 3\sqrt{\left(\frac{2}{3\sqrt{F}} - \frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{2}{3\sqrt{F}}\right)^2} \quad (28)$$

$$\lg(\varphi_3 - \varphi_2) = 2/(\sqrt{F} - 2) \quad (29)$$

З (26) і (28) видно, що відношення амплітуд U_1/U_2 і U_3/U_2 при збільшенні частоти прямують до постійних величин, які дорівнюють:

$$(U_1/U_2)_\infty = 3(1 - P_y) \quad (30)$$

$$(U_3/U_2)_\infty = 1 \quad (31)$$

Різниця фаз, при зростанні частоти, для обох випадків прямує до нуля. З (30) видно, що і в 3-х шаровій структурі, експериментально вимірявши $(U_1/U_2)_\infty$, можна визначити величину P_y , а з фазово-частотної залежності (29) - коефіцієнт теплової дифузії.

Експериментальні дослідження були проведені на двошарових зразках з п'єзокераміки

ЦТС-19. Зразки мали вигляд шайб діаметром 15 мм. Товщина окремих шарів дорівнювала 0.6 мм. Поверхня зразків рівномірно опромінювалась модульованим за інтенсивністю світлом від напівпровідникового лазера ($\lambda = 663 \text{ нм}$, $P = 300 \text{ мВт}$). Модуляція випромінювання лазера проводилась шляхом зміни струму, що проходив через нього. Дослідження проводились в частотному інтервалі 9-500 Гц. Досліджувались залежності (від частоти модуляції світлового потоку) амплітуди і фазового зсуву ФТА сигналів, що знімалися з окремих шарів п'єзоелектрика.

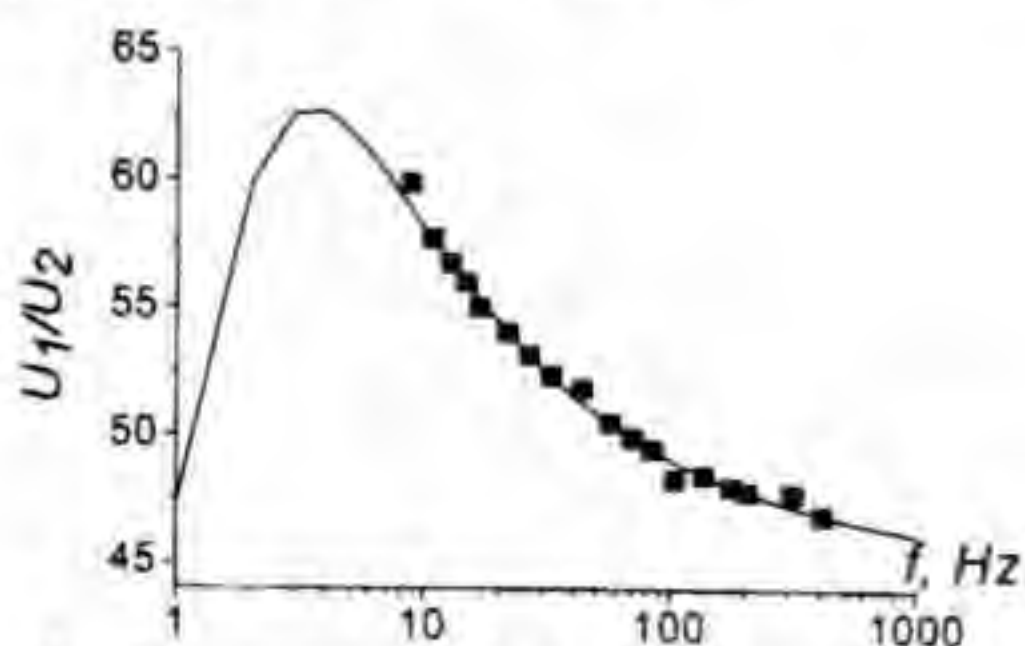


Рис.2 Відношення амплітуд сигналів, що знімалися з окремих шарів двошарової піроелектричної пластини. Лінія – теорія, квадратики – експеримент.

На рис.2 значками зображено відношення амплітуд сигналів, що знімалися з окремих шарів двошарової піроелектричної пластини. Як видно з рис.2, це відношення монотонно спадає з ростом частоти, що співпадає з характером теоретичної залежності (15).

На рис.3 приведено квадратами тангенс різниці фаз між сигналами, що знімалися з окремих шарів двошарової піроелектричної пластини. Як видно з рис.3 тангенс різниці фаз монотонно зростає з ростом частоти на всьому діапазоні, що співпадає з характером теоретичної залежності (16).

За методикою описаною в п.1 з експериментальних залежностей відношення амплітуд сигналів та тангенса різниці фаз між сигналами, що знімалися з окремих шарів двошарової піроелектричної пластини були визначені відносний піроелектричний коефіцієнт P_p , та коефіцієнт теплової дифузії D_T п'єзокераміки ЦТС-19: $P_p = -4.9 \pm 0.4$, $D_T = (4.3 \pm 0.3) \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

З врахуванням цих значень, за формулами (15) та (16) були розраховані теоретичні залежності відношення амплітуд сигналів, що знімалися з окремих шарів двошарової піроелектричної пластини та тангенс різниці фаз між сигналами, що знімалися з окремих шарів двошарової піроелектричної пластини, відповідно. Вони приведені на рис.1 та рис.2 суцільними лініями.

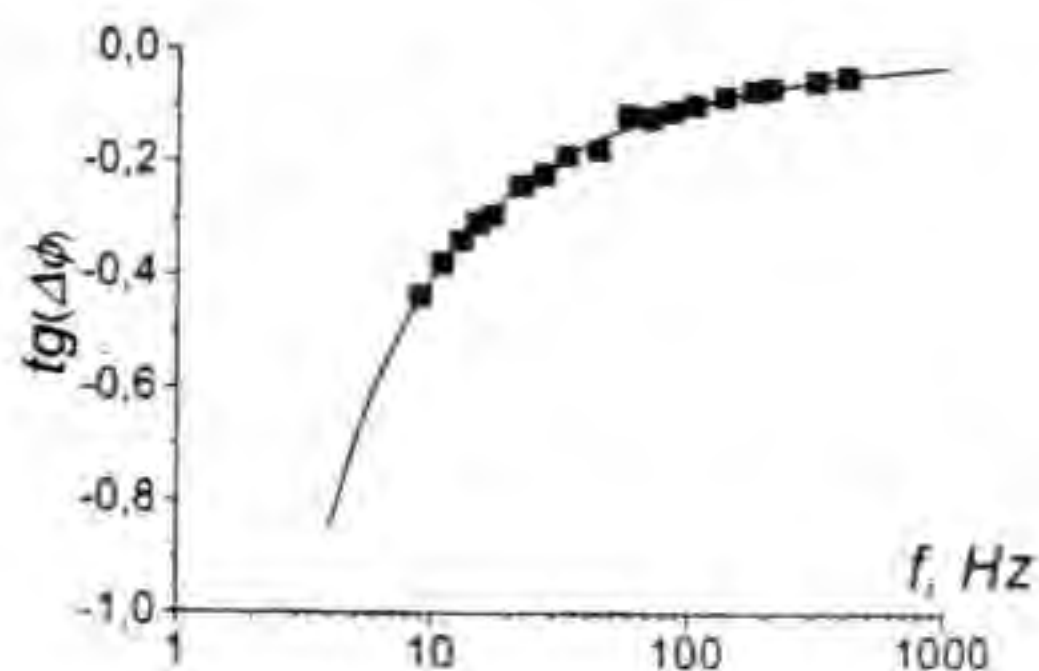


Рис.3 Тангенс різниці фаз між сигналами, що знімалися з окремих шарів двошарової п'єзоелектричної пластини. Лінія – теорія, значки – експеримент.

Як видно з рис.2 та рис.3 теоретичні криві добре узгоджуються з відповідними експериментальними залежностями.

Список використаних джерел

1. Fanting Kong, Y. C. Chen, Harriet O. Lloyd and all. Appl. Phys. Lett. **94**, 033902 (2009)
2. John F. McClelland. Rev. of Sci. Instrum. **78**, 050901 (2007).
3. А.Н.Васильев, В.А. Сабликов, В.Б. Изв. вузов. Физика, -1987, 30, вып. 6 - с.119-131.
4. H. Wada, H. Yoshioka, J. Morimoto and T. Miyakawa Jap. J. Appl. Phys. 1985, vol. 24, sup. 24-1 - pp.217-219.
5. Варданетян Р.П.//Акуст. Журн, 1989, т.35 - с.1026-1031.
6. Г.И. Булах, Р.М. Бурбело, О.В. Волчанский, И.Я. Кучеров УФЖ 1992, т.37, № 3 - с.411-415.
7. Андрусенко Д.А., Кучеров И.Я. ЖТФ, 1999, Вып.12 - с.1-5.
8. Коваленко А.Д. Термоупругость. - Киев: Вища школа 1975 - 216 с.

Надійшла до редколегії 1.06.10

УДК 539.22 ; 535.36; 535.37

Вакуленко О.В., д. ф.-м. наук, проф.,
Кондратенко С.В., канд. ф.-м. наук,
Головинський С.Л., аспірант,
Гринь І.А., студент.

**Повздожня фотопровідність та
фотолюмінесценція гетероструктур
 $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ з InGaAs квантовими
точками**

У даній роботі досліджена повздожня фотопровідність та фотолюмінесценція гетероструктур $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$. Проаналізовано отримані спектри фотопровідності та фотолюмінесценції, з їхньої форми визначено енергії міжзонних переходів основного стану квантової точки та змочувального шару. Проаналізовано вплив квантових точок з різними розмірами на енергетичні спектри фотопровідності та фотолюмінесценції гетеросистеми. Показано, що форма спектрів фотолюмінесценції визначається гаусовим розподілом розмірів. Користуючись процедурою опису оптичного спектра в умовах гаусового розширення смуги, одержано вираз для спектра поглинання міжзонного переходу між основними станами зони провідності та валентної зони $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ КТ.

Ключові слова: напівпровідникова наноструктура, поглинання, фотопровідність, фотолюмінесценція, квантова точка, оптичний перехід.

* e-mail: golovinskiy.serg@gmail.com.ua

Вступ

Квантові точки (КТ) та квантові нитки (КН) останнім часом є об'єктом інтенсивних досліджень завдяки їхнім унікальним фундаментальним властивостям та перспективам їхнього застосування в оптоелектроніці. Створено фотодетектори з InGaAs КТ, які фоточутливі в середньому (3 - 5 мкм) та дальньому (8 - 14 мкм) інфрачервоному діапазоні [1-3]. КТ InAs в GaAs матриці використані як активне середовище інфрачервоних лазерів [4], як матеріал для оптичних пристроїв збереження інформації [5] та новітніх одноелектронних [6] і квантово-інформаційних пристроїв [7]. Перспективним може бути також застосування

O. V. Vakulenko, Dr. Sci., Prof.,
S. V. Kondratenko, PhD,
S. L. Golovynskyi, PhD stud.,
I. A. Gryn, stud.

**Lateral photoconductivity and
photoluminescence of the $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$
heterostructure with InGaAs quantum dots**

Lateral photoconductivity and photoluminescence of the $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructures is investigated in this paper. The spectral dependencies of the photoconductivity and photoluminescence was analyzed, and energies of the ground state of the quantum dots and wetting layer was obtained used the form of the spectral shapes. The influence of the quantum dots that have different sizes to the photoconductivity and photoluminescence energy spectra of the heterosystem was analyzed. It was showed that the shape of the photoluminescence spectra is determined by Gaussian size distribution. The equation of the absorption spectra for interband transition between the ground states of $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ quantum dot conduction band and valence band was found, used the procedure of the description of the optical spectra under Gauss extension of the band.

Key Words: semiconductor nanostructure, absorption, photoconductivity, photoluminescence, quantum dot, optical transition.

$\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ багатошарових гетероструктур як фоторезисторів ближнього інфрачервоного діапазону.

Розробка ефективних фоточутливих пристроїв вимагає інформації щодо енергії, сили осциляторів, правил відбору міжзонних та внутрішньозонних переходів. Велика кількість публікацій була присвячена вивченню оптичних властивостей InGaAs КТ, зокрема спектрів поглинання [8,9] та фотолюмінесценції (ФЛ) [10,11]. Однак, при проходженні випромінювання через нанорозмірний шар або КТ поглинається лише його незначна ($\sim 10^{-4} - 10^{-5}$) частина. Тому, прямі вимірювання спектрів поглинання КТ є достатньо складною задачею,

яка вимагає застосування дуже чутливої техніки та великого часу вимірювань [12,13]. В той же час, спектроскопія ФЛ не відображає усіх переходів, можливих у неоднорідних за величиною деформацій та складом КТ [14]. До того ж, для спостереження випромінювальної рекомбінації за участю станів з $n > 2$ або станів змочувального шару слід використовувати великі інтенсивності збуджувального випромінювання, що спотворює електронний спектр системи [15].

Спектроскопія поздовжнього фотоструму є прямим, чутливим та відносно простим методом вивчення електронного спектра носіїв при різних температурах, а також енергій міжзонних та внутрішньозонних переходів, можливих у гетероструктурах з КТ.

Дана робота спрямована на вивчення поздовжнього транспорту нерівноважних носіїв заряду в низькорозмірних $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ гетероструктурах методом спектроскопії фотоструму. З аналізу форми отриманих спектрів латеральної фотопровідності (ЛФП) та ФЛ визначено енергії міжзонних переходів, можливих в таких структурах.

Матеріали і методи

Досліджувані багатошарові $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ низькорозмірні гетероструктури були вирощені методом молекулярно-променевої епітаксії. З метою усунення дефектів $\text{GaAs}(100)$ підкладка закривалася буферним шаром GaAs . Шар $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ товщиною $d_{\text{InGaAs}} = 4$ нм вирощувався на GaAs буфері і закривався тонким шаром GaAs товщиною $d_{\text{GaAs}} = 38$ нм. Дана операція повторювалася 17 разів (рис. 1). Структури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ були вирощені таким чином, що квантові точки розташовувалися ланцюгоподібно. З топограми (рис. 2) атомно-силового мікроскопа Ntegra (NT-MDT) отримано поверхневу густину КТ, яка складає величину порядку $3 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$, середню ширину КТ 40 нм та висоту близько 4 нм.

Для вивчення оптичних переходів ЛФП в даній роботі використано метод спектроскопії фотоструму при геометрії нормального падіння збуджувального випромінювання. Омічні контакти, 0,6 мм в діаметрі, були сформовані на основі евтектичного сплаву Au-Ge на поверхні зразка з епітаксіальними шарами на відстані 4 мм один від одного. В результаті, забезпечувався омічний контакт до кожного епітаксіального шару і GaAs підкладки (рис. 1). Вимірювання спектральних залежностей ЛФП проводились на інфрачервоному спектрометрі в діапазоні енергій від 0.58 eV до 1.6 eV при напрузі на зразку

$U = 15,5$ В. Вимірювання фотоструму проводились з використанням підсилювача струму та стандартної техніки детектування постійного фотоструму. Виміряні спектральні залежності фотоструму приводилися до сталої кількості квантів збуджувального випромінювання за допомогою неселективного піроелектричного приймача.

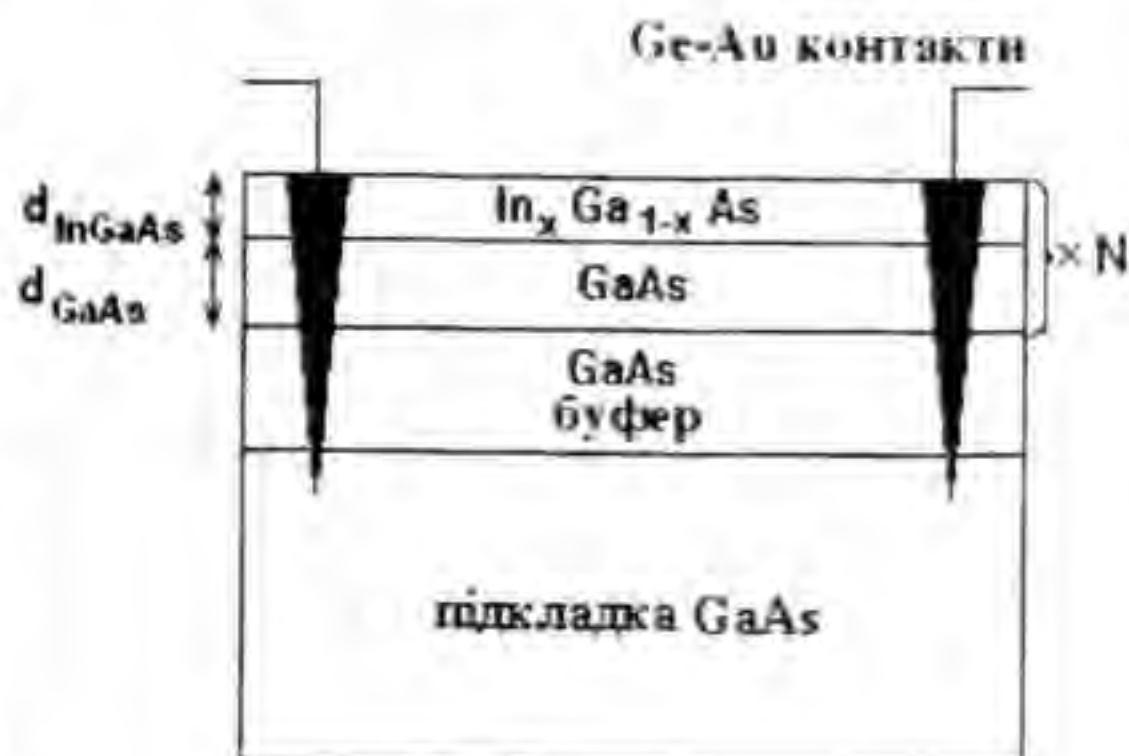


Рис.1. Схематичний вигляд досліджуваних зразків з квантовими точками InGaAs та геометрії евтектичних Ge-Au контактів.

ФЛ вимірювання проводились за стандартною методикою на інфрачервоному спектрометрі в тому ж діапазоні енергій $h\nu$ від 0.58 eV до 1.6 eV при збудженні лазером з довжиною хвилі 404 нм та потужністю 5 Вт/см^2 . Спектральна ширина щілини у даному діапазоні вимірювань становила 17 меВ. Температура зразка складала 77 К, як детектор використовувався Ge фотоприймач.

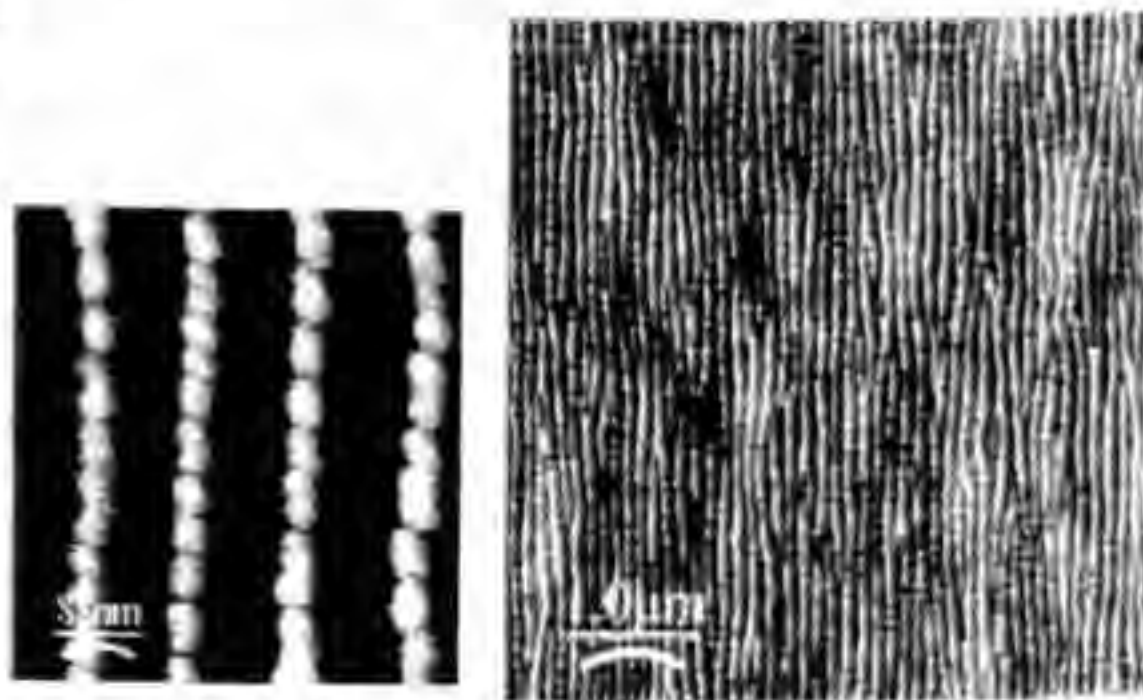


Рис. 2. ACM зображення верхнього шару гетероструктури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$.

Результати та обговорення

Спектральні залежності ЛФП $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ гетероструктури при кімнатній

температурі та 77 К наведено на рис. 3. Мінімальна енергія квантів, які зумовлювали фотострум складала 0.67 ± 0.01 еВ при кімнатній температурі та 0.58 ± 0.01 еВ при 77 К. В області спектра, де кристалічний GaAs є прозорим ($h\nu < 1.43$ еВ при 290 К та $h\nu < 1.51$ еВ при 77 К), нерівноважні носії заряду генеруються внаслідок міжзонних оптичних переходів за участі станів нанорозмірних InGaAs КТ або станів змочувального шару. В залежності від розмірів InGaAs КТ та вмісту In змінюється кількість та розташування рівнів у квантовій ямі [4]. За проведеними розрахунками досліджувана структура мала один рівень квантування для електронів у зоні провідності КТ (E_{cl}) та два рівні квантування для важких дірок (hh - heavy hole) у валентній зоні КТ (E_{hh1} та E_{hh2}). Енергія переходів, яка спостерігається на спектрах ЛФП і відповідає переходам за участю основних станів КТ, складає 1.14 ± 0.01 еВ при кімнатній температурі та 1.15 ± 0.01 еВ при 77 К (рис. 3). Сигнал фотоструму, менший за енергії переходу основних станів КТ, може бути пояснено внеском у фотострум носіїв заряду генерованих внаслідок переходів за участю станів оточення InGaAs/GaAs, яке має велику кількість поверхневих станів та дислокацій [16].

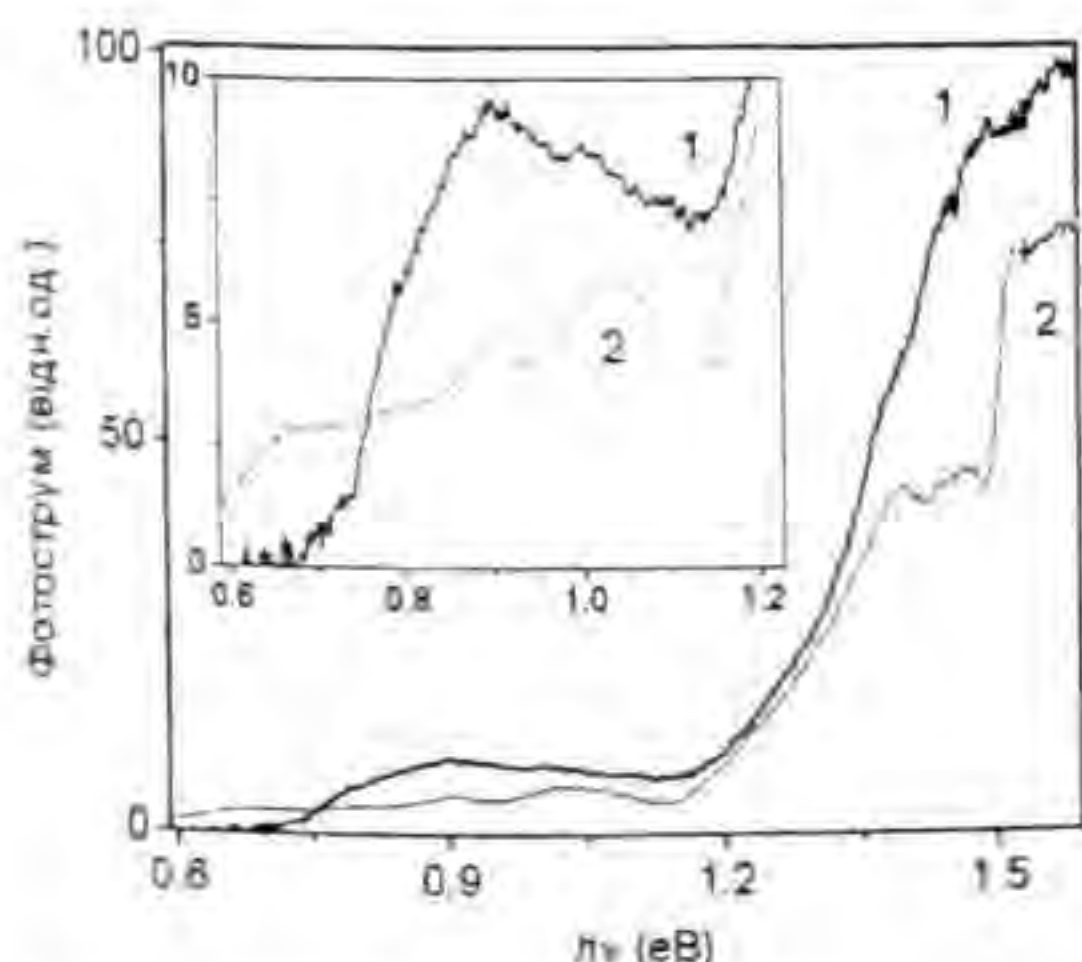


Рис. 3. Спектри фотопровідності структури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ при 290 К та 77 К (крива 1 та 2 відповідно).

На рис. 4 наведено спектр ФЛ гетероструктури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ з КТ при 77 К. У ФЛ дослідженні спостерігався випромінювальний рекомбінаційний перехід лише за участю основних станів E_{hh1} та E_{cl} КТ. Переходи за участю збуджених станів не спостерігалися, оскільки у нашому експерименті

використовувалися невеликі інтенсивності збуджувального випромінювання. Для спостереження переходів за участю станів з $n = 2$ та переходів у змочувальний шар використовують великі інтенсивності збудження (> 50 Вт/см²) [10]. З'ясування електронних спектрів при великих інтенсивностях методом спектроскопії ФЛ не є коректним, оскільки за таких відхилень від положення рівноваги електронні спектри зазнають суттєвих спотворень.

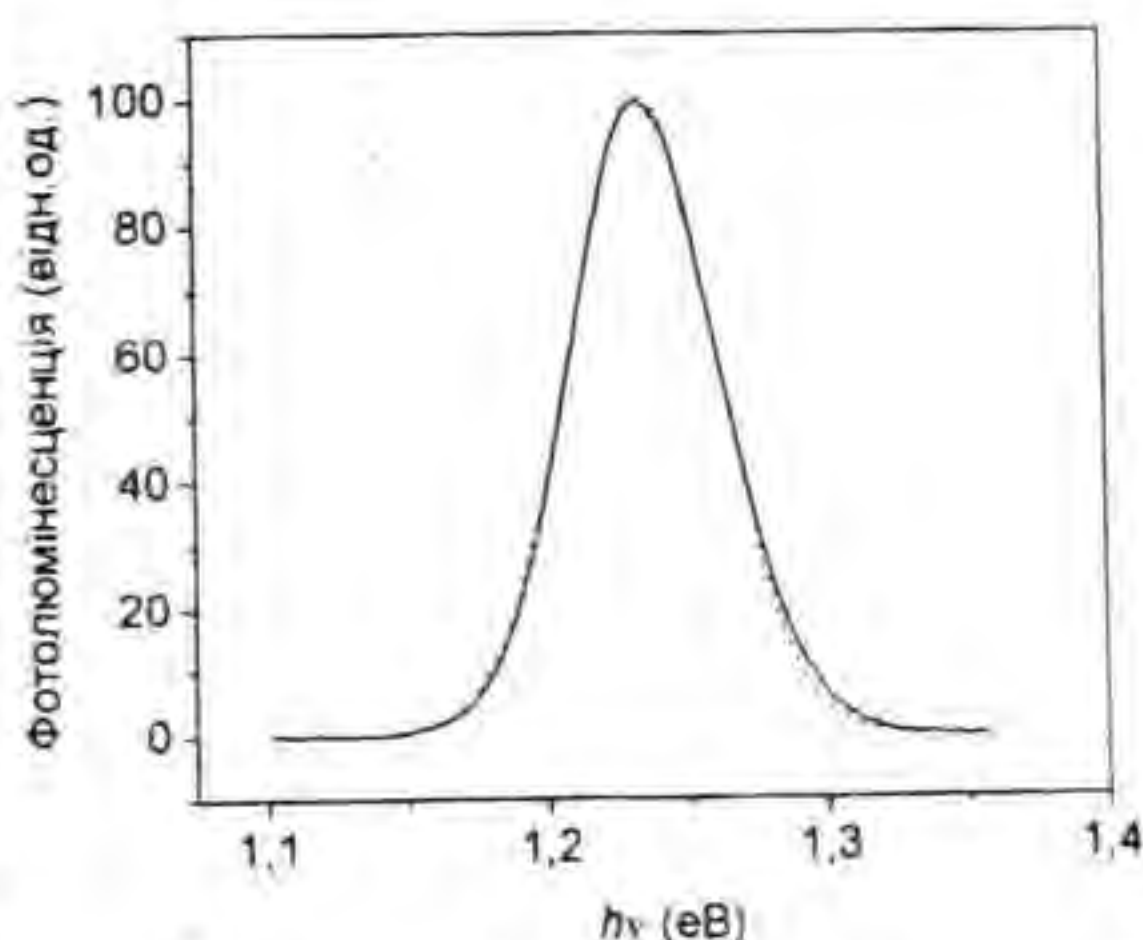


Рис. 4. Спектр фотолюмінесценції структури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ при 77 К та апроксимація контуром Гауса (суцільна та пунктирна крива відповідно).

На спектрі ФЛ структури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ спостерігається смуга шириною 61,4 меВ. Така ширина смуги є досить великою порівняно зі смугами у спектрах InGaAs/GaAs структур наведених у роботах інших авторів [12]. Найчастіше спостерігається ширина смуги 35 – 50 меВ. Розширення смуги до 61,4 меВ спричинено розкидом за розмірами КТ у гетероструктурі. Як відомо, енергетичне розташування та кількість рівнів у КТ залежить від розмірів та форми КТ. Для точок однакової форми із збільшенням розмірів, значення енергії переходу основного стану E_{hh1-cl} зменшується. Максимум піка ФЛ відповідає енергії 1.235 еВ. Це значення є енергією переходу основного стану для КТ, які мають середні розміри 4 нм. З топограм атомно-силового мікроскопа видно, що дисперсія розмірів КТ верхніх шарів гетероструктури складає 10 %. Крім того, існує деякі відмінності середніх висот КТ різних шарів. Енергія основного переходу E_{hh1-cl} КТ, з розмірами більшими за середній, менше енергії

максимуму ФЛ та такі точки дають вклад починаючи з 1.17 eV, а КТ менших розмірів мають більшу енергію E_{hh1-el} та дають вклад до 1.31 eV (рис. 4).

Форма спектра ФЛ описується кривою Гауса наступного вигляду:

$$f(h\nu) = A \cdot \exp\left(-\frac{4\ln 2(h\nu - h\nu_{max})^2}{\Delta_{1/2}^2}\right), \quad (1)$$

де A – константа, $h\nu_{max}$ – енергетичне положення максимуму спектра ФЛ, $\Delta_{1/2}$ – ширини смуги ФЛ на половині висоти. Крива ФЛ з великою точністю співпала з кривою апроксимації. Це свідчить про те, що розкид за розмірами КТ у структурі відповідає розподілу Гауса.

Розкид по розмірам КТ впливає також на форму спектрів ЛФП. При кімнатній температурі спостерігається різке зростання фоточутливості при 1.14 ± 0.01 eV, який відповідає енергії міжзонного переходу за участі основних станів КТ найбільших розмірів (рис. 3). При більших енергіях спостерігаються зростання сигналу фотоструму, що відповідає переходам у КТ менших розмірів. Подальше збільшення сигналу фотоструму при енергіях більших за 1.28 ± 0.01 eV відповідає переходам у КТ за участі збуджених станів. Зі спектра ЛФП можна отримати також значення ширини забороненої зони змочувального шару (*wetting layer*) $E_R^{WL} = 1.40 \pm 0.01$ eV при 290 K, яке відповідає початку області з більш різким зростанням сигналу ЛФП.

Форма спектра ЛФП при 77 K відрізняється від форми спектра при 290 K (рис. 3). В області енергії від 1.15 eV до 1.42 eV спостерігається два максимуми. Основному переходу при 77 K відповідає енергія 1.15 ± 0.01 eV. Таке значення збігається з початком спектру ФЛ, розширення якого спричинено розкидом по розмірам КТ у гетероструктурі. Відомо, що енергія основного переходу E_{hh1-el} при зниженні температури збільшується [4]. Зміщення енергії основного переходу E_{hh1-el} КТ при охолодженні до 77 K відносно 290 K складає 10 меВ. Зростання сигналу ЛФП починаючи з енергії 1.30 ± 0.01 eV відповідає переходам у КТ за участі збуджених станів. Різке зростання сигналу фотоструму, починаючи з енергії 1.48 eV відповідає переходам у змочувальному шарі КТ.

Енергетична густина станів, що відповідає енергетичному рівню E_c одновимірної 2-розмірної (2D) системи, описується сходянковою функцією [17]:

$$g(E, h\nu) = \frac{A}{\pi} \left(\frac{\mu}{\hbar^2} \right) \theta(h\nu - E), \quad (2)$$

де A – константа, $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_h^*} + \frac{1}{m_e^*}$, E – гранична енергія електронного переходу для окремої квантової ями без теплового розмиття енергетичних рівнів, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, θ – сходянкова функція.

Враховуючи розподіл Гауса (1) осциляторів переходу та використовуючи процедуру [18] опису оптичного спектра в умовах гаусового розширення смуги, одержимо вираз для спектра поглинання міжзонного переходу між основними станами E_{el} зони провідності та E_{hh1} валентної зони $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ КТ:

$$\sigma(h\nu) = B \cdot \int_0^\infty g(E, h\nu) \cdot \exp\left(-\frac{(E - h\nu_{max})^2 4\ln 2}{\Delta_{1/2}^2}\right) dE. \quad (3)$$

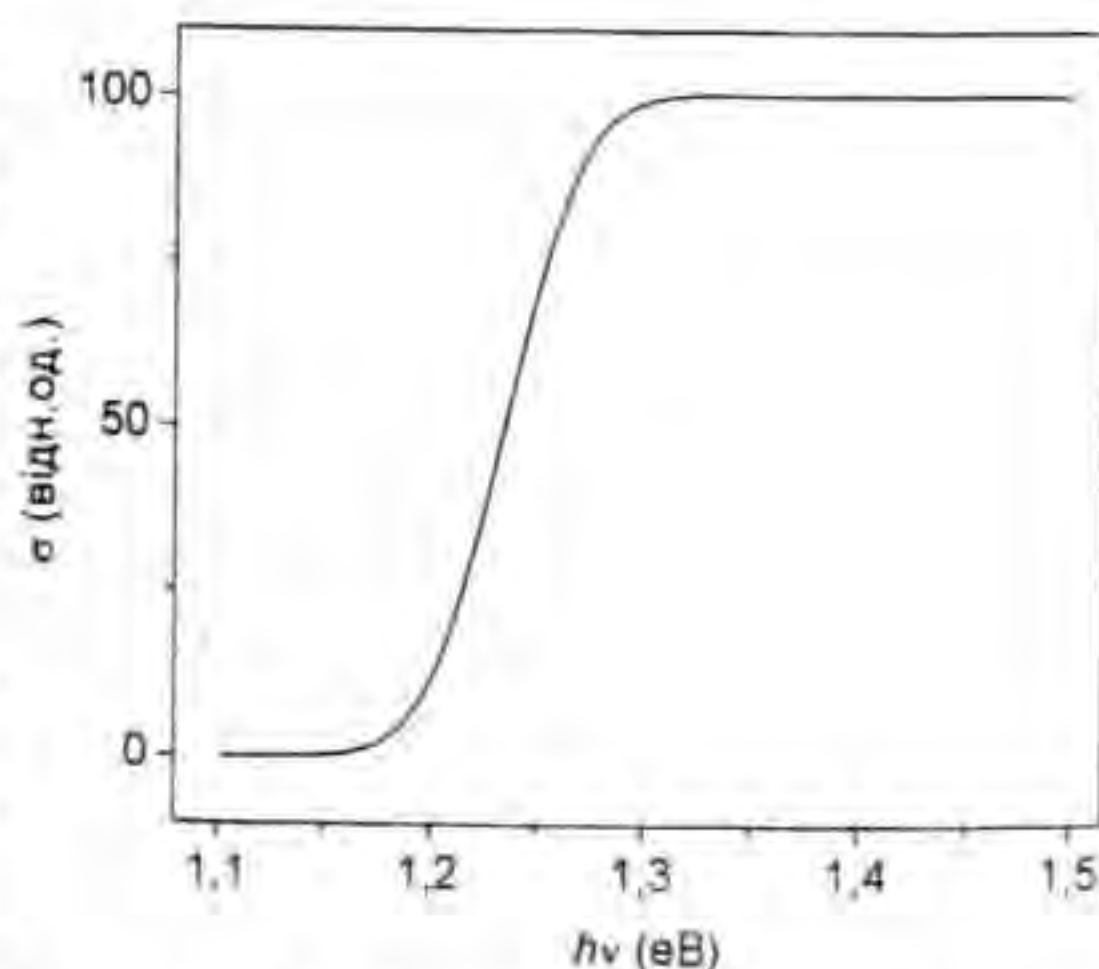


Рис. 5. Теоретично розрахований спектр поглинання міжзонного переходу між основними станами $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ КТ.

На рис. 5 зображено теоретично розрахований за виразом (3) спектр поглинання міжзонного переходу між основними станами для гетероструктури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$. З форми графіка видно суттєвий вплив розкиду за розмірами КТ у гетеросистемі, край поглинання є пологим та зміщеним у інфрачервону область відносно енергії 1.235 eV основного переходу для КТ середнього розміру.

Електрони та дірки, генеровані внаслідок міжзонних переходів в КТ, спочатку є локалізованими в КТ і не можуть брати участі в процесах переносу заряду. Ці носії можуть

давати внесок у фотострум, якщо перебувають в делокалізованих станах, опинитись в яких вони можуть лише внаслідок процесів термічного викиду [10]. Інакше кажучи, для того, щоб нерівноважні носії заряду, які з'являються в локалізованому основному стані шару InGaAs, давали внесок в фотострум вони мають спочатку подолати потенціальний бар'єр висотою E_a^e або E_a^{hh} і перейти у делокалізовані стани бар'єрних шарів, в яких відбувається перенос носіїв заряду (рис. 6). Враховуючи вже визначену енергію основного переходу $E_{hh \rightarrow el}$ у КТ та користуючись співвідношенням між розривами зони провідності та валентної зони для гетероструктур такого складу $\Delta E_c / \Delta E_v = 0.6$ [4], можна оцінити енергію активації для електронів чи дірок E_a у межах 60-200 меВ. Оцінена енергетична висота бар'єру співпадає з розрахованими енергіями E_a у роботах інших авторів, які досліджували подібні InGaAs/GaAs гетероструктури методом ФЛ досліджень у широкому температурному діапазоні. Така енергія бар'єру E_a є досить невеликою і нерівноважні носії заряду можуть її подолати.

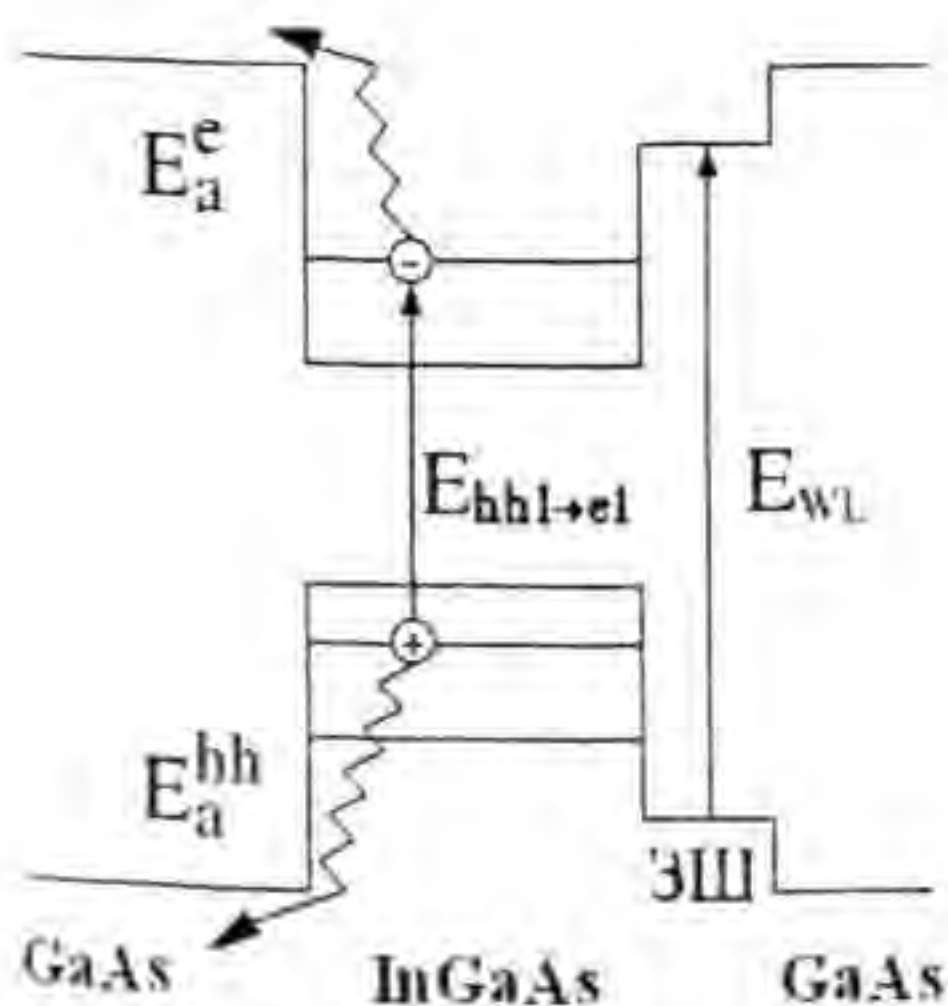


Рис. 6. Енергетична схема гетероструктури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$.

Сигнал ЛФП при 77 К виявився в 8 разів меншим, ніж при 290 К. Це пояснюється зменшенням кількості термічно активованих електронів та дірок у бар'єрних рівнях при зниженні температури.

Імовірно, що транспорт носіїв заряду у $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ структурах відбувається у площині змочувального шару, який має меншу ширину забороненої зони, ніж монокристалічний GaAs, а відповідно і менші висоти бар'єрів для

електронів та дірок. На такий процес переносу можуть істотно впливати процеси безвипромінювальної рекомбінації електрон-діркових пар за участі станів інтерфейсу та дислокацій змочувального шару. Ймовірність цього процесу, який зменшує величину сигналу фотоструму, залежить від температури.

Висновки

Гетероструктури $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ з КТ виявили фоточутливість в області енергій фотонів $h\nu > 0.58$ eV при 77 К та $h\nu > 0.67$ eV при 290 К, де монокристалічний GaAs є прозорим. Показано, що нерівноважні носії заряду генеруються внаслідок міжзонних переходів основного стану КТ, з рівнів E_{h2} у континіум зони провідності та переходів за участі оточення КТ. Методом спектроскопії латерального фотоструму визначено енергії цих переходів. У ФЛ дослідженнях спостерігався випромінювальний рекомбінаційний перехід лише за участю основних станів КТ, енергія переходу збігалася з енергією, визначеною зі спектрів ЛФП. Показано, що на форму спектрів ФЛ та ЛФП суттєво впливає розкид за розмірами КТ. Показано, що форма спектрів ФЛ визначається гаусовим розподілом розмірів. Користуючись процедурою опису оптичного спектра в умовах гаусового розширення смуги ФЛ, одержано вираз та побудовано графік для спектра поглинання міжзонного переходу між основними станами зони провідності та валентної зони $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ КТ.

Список використаних джерел

1. Li H.C., Duboz J.-Y., Durek R., Wasilewski Z.R., Fafard S., Finnie P. Quantum dot infrared photodetectors // *Physica E* – 2003. – 17 – P. 631-633.
2. Kim S., Mohseni H., Erdtmann M., Michel E., Jelen C., and Razeghi M. Growth and characterization of InGaAs/InGaP quantum dots for midinfrared photoconductive detector // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – 73 – P. 963-967.
3. Lin S.-Y., Tsai Y.-J., Lee S.-C. Near-Room Temperature Operation of InAs/GaAs Quantum Dot Infrared Photodetector // *Appl. Phys. Lett.* 2001. – 78, № 17 – P. 2428-2430.
4. Bimberg D., Grudmann M., and Ledentsov N.N. Quantum Dot Heterostructures. – Chichester: Wiley, 1999 – 303 p.
5. Lundstrom T., Schoenfeld W., Lee H., and Petroff P.M. Exciton Storage in Semiconductor Self-Assembled Quantum Dots // *Science* -1999. – 286 – 2312 - 2314.
6. Drexler H., Leonard D., Hansen W., Kotthaus J.P., and Petroff P.M. Spectroscopy of Quantum Levels in Charge-Tunable InGaAs Quantum Dots // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – 73 – P. 2252 - 2255.
7. Glazman L.I. and Ashoori R.C. Coupling Qubits by Waves on the Electron Sea // *Science* – 2004. – 304 – P. 524 - 525.
8. Zhuang Q.D., Li J. M., Zeng Y.P., Pan L., Chen Y.H., Kong M.Y. and Lin L.Y. Structural and infrared absorption properties of self-organized InGaAs/GaAs quantum dots multilayers // *Journal of Electronic Materials* – 1999. – 28, № 5 – P. 503-505.
9. Hussein M.L., Ma W.Q., and Salamo G.J. Normal incidence intersubband transitions in InGaAs/GaAs quantum dots with non-monotonic shift // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1999. – 776 – Q. 11.29.1-11.29.4.
10. Rubel O., Dawson P., Baranovskii S.D., Pierz K., Thomas P., and Göbel E.O. Nature and dynamics of carrier escape from InAs/GaAs quantum dots // *Phys. Stat. Sol. (c)* – 2006. – 3, № 7 – P. 2397-2401.
11. Mazur Yu.I., Wang Zh.M., Kissel H., Zhuchenko Z.Ya., Lisitsa M.P., Tarasov G.G. and Salamo G.J. Spectroscopy of sub-wetting layer states in InAs/GaAs quantum dot bi-layer systems // *Semicond. Sci. Technol.* – 2007. – 22 – P. 86-96.
12. Popescu D.P., Eliseev P.G., Stintz A. and Malloy K.J. Temperature dependence of the photoluminescence emission from InAs quantum dots in a strained $\text{Ga}_{0.85}\text{In}_{0.15}\text{As}$ quantum well // *Semicond. Sci. Technol.* -2004. – 19 – P. 33-38.
13. Антонов А.В., Гапонова Д.М., Данильцев В.М., Дроздов М.Н., Молдавская Л.Д., Мурель А.В., Туловчиков В.С., Шашкин В.И. Гетероструктуры InGaAs/GaAs с квантовыми точками для инфракрасных фотоприемников диапазона 3 – 5 мкм // *ФТП*. – 2005. – 39 – С. 96 – 99.
14. Monte A.F.G., Sales F.V., Morais P.C. Carrier transport investigation in short-wavelength InAs/AlGaAs quantum dots // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2009. – 21 – P. 1 -4.
15. Casas Espinola J. L., Dybiec M., Ostapenko S., Torchynska T.V. and Polupan G. Carrier dynamics in InAs quantum dots embedded in InGaAs/GaAs multi quantum well structures // *J. Phys. Conference Series* – 2006. – 61 – P. 180-184.
16. Mano T., Oshima M., Tateno T., Wakaki M., and Koguchi N. Temperature dependence of the photoluminescence of InGaAs $\bar{\text{O}}$ GaAs quantum dot structures without wetting layer // *Appl. Phys. Lett.* 2002. – 81, № 16 – P. 3067 - 3069.
17. Вакуленко О.В., Кондратенко С.В. Фотоелектричні ефекти в напівпровідниках. – К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2009. – 215 с.
18. Вакуленко О.В., Лисица М.П. Оптическая перезарядка примеси в полупроводниках. – К.: Наукова думка, 1992. – 206 с.

Надійшла до редколегії 6.04.10

УДК 538.61

Гаджилов М.В., асистент
Захаренко М.І., д.ф.-м. н., доц.

Граничні умови і повний топологічний заряд точкових особливостей в магнетиках

Проаналізований зв'язок граничних умов і значення повного топологічного заряду точкових особливостей в плоскому і об'ємному нескінченному магнетикі. Показано, що граничним умовам векторного поля далеко від особливостей може бути зіставлений топологічний заряд. Топологічний заряд граничних умов і повний топологічний заряд всіх особливостей усередині обмеженої області зв'язані між собою. Це веде до того, що за певних граничних умов на значення топологічного заряду накладаються правила заборони. Розглянуті елементарні комплекси особливостей, що відповідають таким правилам заборони.

Ключові слова: Топологічний заряд, комплекси особливостей, правила заборони.

E-mail:kmti@ukr.net

Вступ

Точкові особливості в топології характеризуються цілочисельним індексом [1], який називають також топологічним числом або зарядом [2]. У магнетизмі склалася традиція домножати це число на 2π для плоского і на 4π для просторового випадків [3]. У даній роботі використовується перший підхід. На рис.1 показані точкові особливості плоского поля намагніченості з одиничними топологічними зарядами. Особливості з вищими значеннями заряду спостерігаються рідко. Зміна знаку векторного поля або його плавна деформація не змінюють заряду особливості для

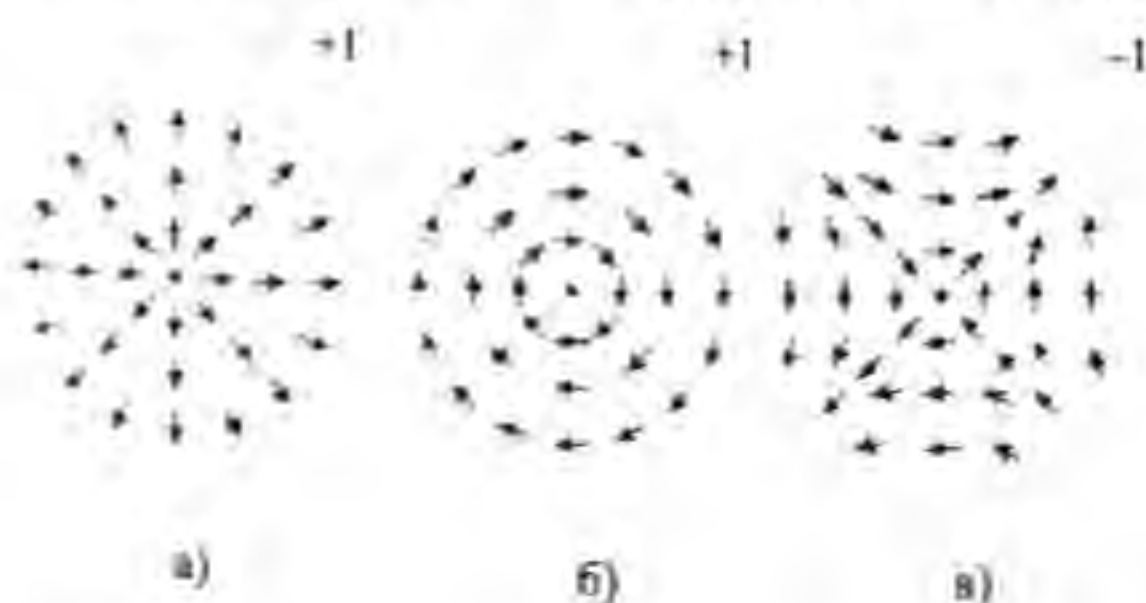


Рис.1. Можливі типи точкових особливостей в плоских ізотропних магнетиках. Цифри вказують значення топологічних зарядів точкових особливостей

Gadjilov M.V. assistant
Zaharenko N.I., Dr.Sci., assoc.prof.

Boundary conditions and full topological charge of point singularities in magnets

Communication of boundary conditions and values of a full topological charge of dot features in flat and volumetric infinite magnetic is analysed. It is shown, that far from features the topological charge can be compared to boundary conditions of a vector field. The topological charge of boundary conditions and a full topological charge of all features inside of the limited area are connected among themselves. It leads to that on values of a topological charge, under the certain boundary conditions, there are rules of an interdiction. Elementary complexes of the features corresponding such rules of an interdiction are considered.

Key Words: Topological charge, complexes of the features, forbidding rules.

плоского поля. Це істотно відрізняє плоске поле від просторового і поняття топологічного заряду від фізичного заряду.

Для просторового випадку можливі особливості з одиничними зарядами, показаними на рис.2.

Комплекси особливостей характеризуються сумарним топологічним зарядом, який можна визначити за співвідношенням, аналогічним теоремі Гауса в електростатиці [3]:

$$\int \vec{g} \cdot d\vec{S} = N \quad (1)$$

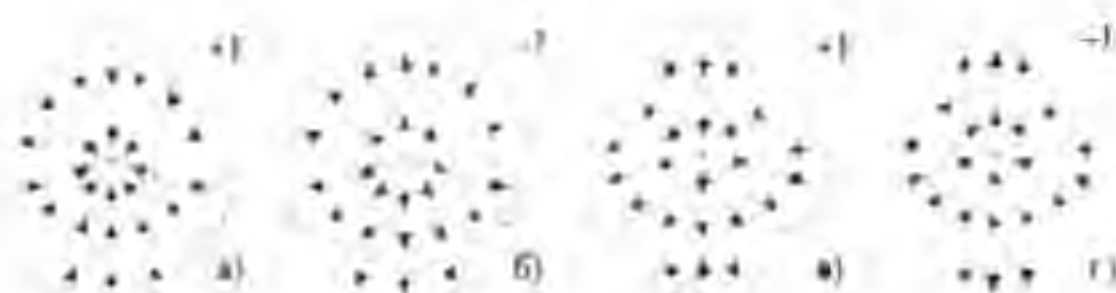


Рис. 2. Можливі типи точкових особливостей в об'ємних ізотропних магнетиках. Цифри вказують значення топологічних зарядів точкових особливостей

де $\vec{g} = -\sin\theta[\nabla\theta \times \nabla\varphi]$ - гіротропний вектор, θ, φ - сферичні координати вектора. Інтегрування здійснюється по поверхні диска D^2 , центр якого співпадає з точковою особливістю.

Безпосереднє інтегрування дає для одичних особливостей величини заряду $q = \pm 2\pi$, у той час, як для об'ємної особливості його значення дорівнює 4π . Сумарний заряд $N = N_+ - N_-$ дорівнює різниці N_+ числа особливостей з позитивним зарядом і N_- - з негативним зарядом. Поверхня інтегрування може вибиратися довільно, тому числа N, N_+, N_- можуть змінюватися залежно від цього вибору. Але, як показує великий експериментальний матеріал [4, 5] і теоретичний аналіз [6, 7], сумарний топологічний заряд всіх особливостей не може бути довільним і пов'язаний з граничними умовами далеко від особливостей. На інтегральні комбінації особливостей існують обмеження. Наприклад, дві особливості, що розходяться, не можуть існувати без особливості, що розділяє їх, з протилежним зарядом (рис.3).

Таким чином, можна сказати, що повний топологічний заряд і граничні умови далеко від комплексу особливостей зв'язані між собою. Цей зв'язок визначає правила заборони на повний топологічний заряд за даних граничних умов і навпаки. Дана робота присвячена обговоренню саме цих питань.

Метод аналізу заснований на наступних топологічних твердженнях:

1. n -мірна сфера S^n , з якої виколота одна точка (північний полюс), топологічно еквівалентна n -мірному простору R^n . Така відповідність безпосередньо впливає із стереографічної проекції, яка встановлює відповідність між точками сфери з виколотим полюсом P , точками на площині A' і граничними точками B' [1, 2] (рис.4).

2. Теорема про сумарний індекс (топологічний заряд) особливих точок на замкнутій поверх-

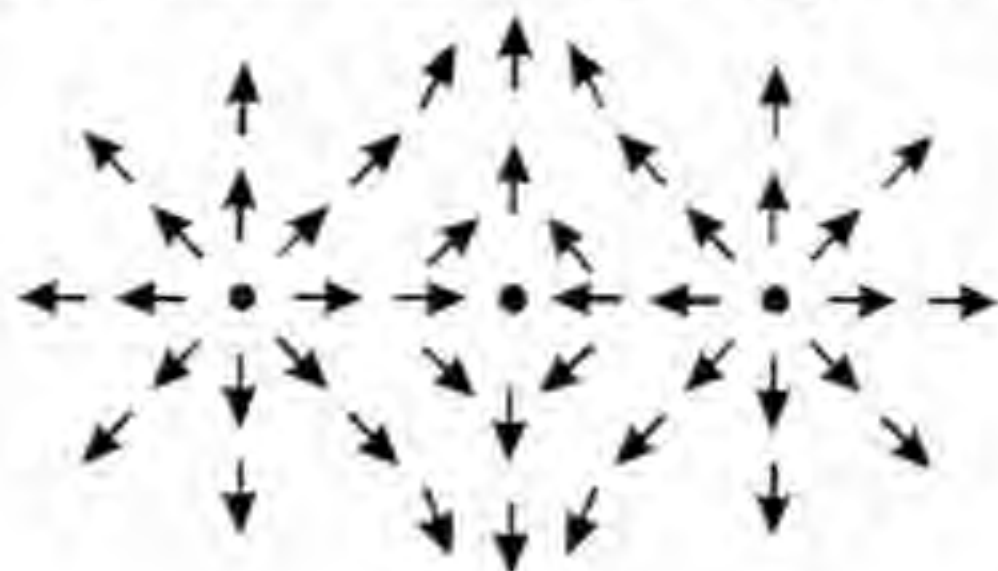


Рис.3. Дві розбіжні точкові особливості та їх хрестоподібна особливість

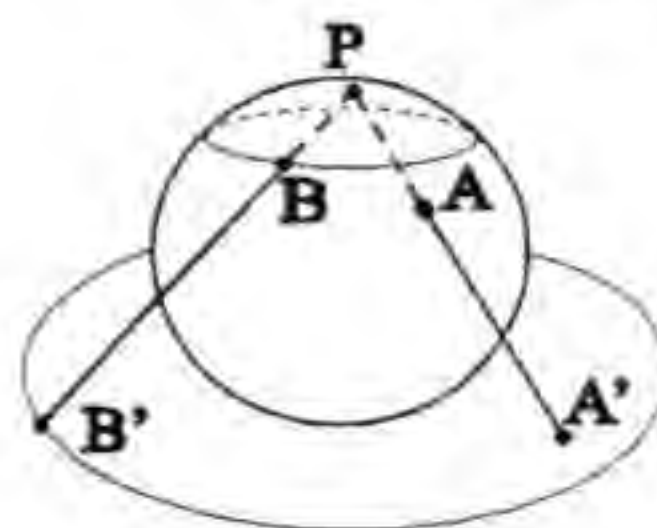


Рис.4. Стереографічна проекція

ні [1]. У загальному вигляді теорема складна і вимагає введення додаткових понять, які зазвичай не використовуються у фізиці. Для даної роботи нам достатньо використати лише два наслідки цієї теореми.

а) Для дотичного векторного поля на двовимірній сфері S^2 сума індексів особливих точок збігається з ейлеровою характеристикою сфери і дорівнює двійці.

б) Для тривимірної сфери S^3 сума індексів всіх особливостей дотичного векторного поля дорівнює нулю.

Необхідно проаналізувати питання про те, як зміниться сумарний індекс (друге твердження) векторного поля сфери S^n при його проектуванні в R^n згідно з першим твердженням. Оскільки відповідність між векторними полями на сфері S^n і в просторі R^n є повною за винятком виколотої точки P , то саме характер поля в цій точці визначає зміну повного індексу при проектуванні і тип граничних умов. Аналізуючи можливі варіанти, отримуємо універсальне правило для векторних полів будь-якої розмірності:

1) Якщо з сфери S^n виколується регулярна (неособлива) точка векторного поля, то сумарний заряд проектованого на R^n поля не змінюється.

2) Якщо з сфери S^n виколується особлива точка векторного поля з індексом $+i$, то сумарний заряд проектованого на R^n поля зменшується на i .

3) Якщо з сфери S^n виколується особлива точка векторного поля з індексом $-i$, то сумарний заряд поля проектованого на R^n збільшується на i .

4) Граничним умовам зіставляється індекс виколотої точки. Таким чином, прирости сумарного індексу при переході від векторного поля на сфері S^n до поля в просторі R^n можуть набувати значень

$$\Delta N = \{-i, 0, +i\}. \quad (2)$$

Застосуємо це правило для плоского і просторового векторного поля намагніченості.

Плоске ізотропне поле намагніченості

Згідно затвердженню 2,а повний індекс дотичного векторного поля на сфері S^2 завжди набуває значення $N_2 = 2$. Тоді згідно співвідношенню (2) отримуємо правило заборони:

сумарний топологічний заряд особливостей плоского поля намагніченості не може набувати значень відмінних від

$$N_{21}=2-i, N_{22}=2, N_{23}=2+i. \quad (3)$$

При $i=1$ маємо

$$N_{21}=1, N_{22}=2, N_{23}=3.$$

Значення N_{21} і граничні умови відповідає елементарному комплексу з однієї особливості (рис. 1, а, б). Значення N_{22} відповідає комплексу з двох особливостей з протилежними знаками намагніченості, а граничні умови мають «дипольний» характер (рис. 5, а, б). Значення N_{23} відповідає двом комплексам з трьох і п'яти особливостей (рис. 5, в, г). Приведені на рис.5 елементарні комплекси особливостей не є єдиними, а лише найбільш очевидними.

Просторове ізотропне поле намагніченості. Згідно затвердженню 2,б повний індекс дотичного векторного поля на сфері S^2 завжди набуває значення $N_3 = 0$. Тоді згідно співвідношенню (2) отримуємо правило заборони:

сумарний топологічний заряд особливостей просторового поля намагніченості не може набувати значень відмінних

$$N_{31}=-i, N_{32}=0, N_{33}=+i \quad (3)$$

Аналогічно, при $i=1$ значення N_{31} можливо для одиничних особливостей, що розходяться і зливаються (рис. 2, а, в). Значення N_{32} можливе для одиничних особливостей, що сходяться і розливаються (рис. 2, б, г). Значення N_{33} можливе для дипольної пари особливостей, що сходяться і розходяться, аналогічних плоскому випадку рис. 5, а. Граничні умови аналогічні полю точкового заряду при $i=\pm 1$ або мають «дипольний» характер при $i=0$.

Перераховані групи особливостей є мінімальними можливими комплексами особливостей для плоского і просторового поля намагніченості. Всяка група будь-якого числа особливостей топологічно еквівалентна цим комплексам, тобто може бути перетворена в них шляхом анігіляції

пар особливостей з протилежними індексами. Топологічна еквівалентність комплексів особливостей означає також і однакова асимптотична

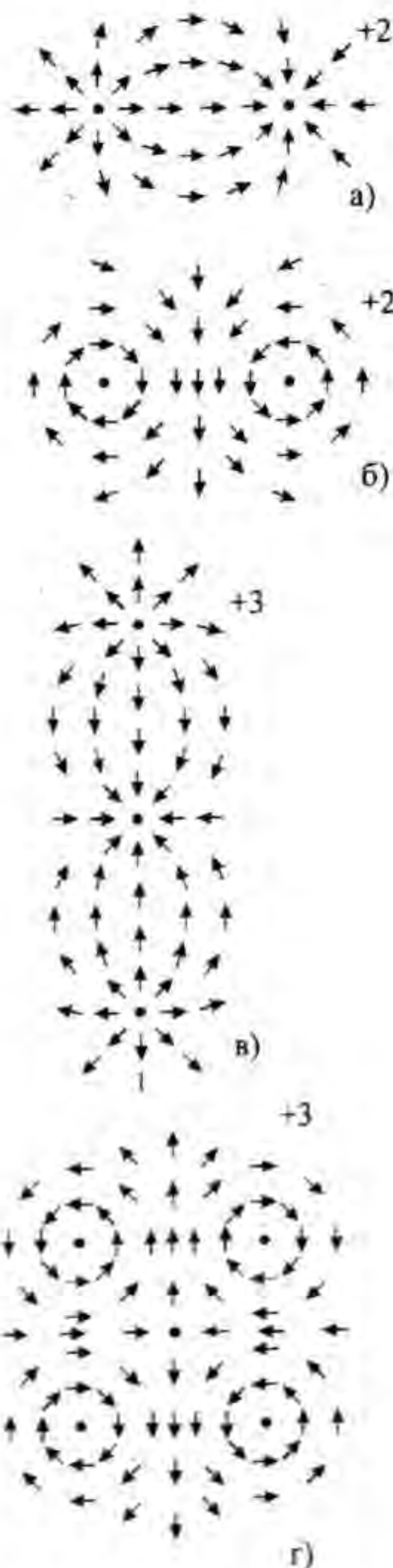


Рис.5 Елементарні комплекси особливостей плоского поля з зарядами +2 і +3

поведінка поля намагніченості на нескінченності (граничні умови).

Висновки

1. Топологічно стійкі структурні елементи діляться на абсолютні і відносні. У ядрах абсолютних елементів параметр порядку (намагніченість для магнетиків) має невизначене значення. У ядрах відносних елементів - певне значення, виняткове в малому околі елементу.

Нерозуміння цього наводить, наприклад, до нестрогого визначення блохівських ліній, аналогічного особливим лініям в магнетиках типу «легка площина».

2. Абсолютні елементи описуються абсолютними гомотопічними групами, а відносні - відносними. Структура абсолютних елементів визначається простором виродження параметра порядку.

Відносні елементи формуються конкуренцією основної взаємодії, що формує параметр порядку (змінної для магнетиків), і вторинних слабких взаємодій (анізотропія, поля розсіяння та ін.).

3. Залежно від простору виродження параметра порядку можливі точкові, лінійні і плоскі елементи. Вони утворюють складні комплекси із строгою геометричною ієрархією - магнетики розділяються на домени плоскими границями; границі поділяються на субдомени блохівськими лініями, а останні - діляться блохівськими точками. Такі комплекси надійно спостерігаються в кубічних магнетиках і магнетиках з циліндричними магнітними доменами.

4. Поверхня матеріалів може справляти двоякий вплив. По-перше, на ній може формуватися поверхневий магнетизм - тонкий

шар з новим параметром порядку, анізотропією, структурними елементами, тощо. По-друге, при врахуванні полів розсіяння, об'ємне поле параметра порядку релаксує з утворенням приповерхневих структурних елементів. У результаті створюється складний об'ємно-приповерхневий комплекс структурних елементів з чітко узгодженими топологічними характеристиками в об'ємі і на поверхні.

Отримані результати справедливі для будь-якого векторного поля, наприклад, електричного і магнітного. Для реальних магнетиків отримані результати необхідно узагальнити з врахуванням граничних умов на поверхні, анізотропії, наявності блохівських ліній і доменних границь.

Список використаних джерел

1. Б.А. Дубровин, С.П. Новиков. Современная геометрия. М.: Наука, 1998, 759.
2. А.С.Шварц. Квантовая теория поля и топология. М.: Наука, 1989, 398 с.
3. А.Малоземов, Дж.Слонзуски. Доменные стенки в материалах с цилиндрическими магнитными доменами. М.: Мир, 1982, 382 с.
4. В.Е.Зубов, Г.С.Кринчик, А.Д.Кудаков. Письма в ЖЭТФ 47, 3, 134 (1988).
5. В.Е.Зубов, Г.С.Кринчик, С.Н.Кузьменко. ЖЭТФ 99, 2, 551 (1991).
6. В.Е.Зубов, Г.С.Кринчик, С.Н.Кузьменко. ЖЭТФ 102, 235 (1992).
7. В.Е.Зубов, М.В.Гаджилов, Г.С.Кринчик, С.Н.Кузьменко. Письма в ЖЭТФ 69, 6, 443 (1999).

Надійшла до редколегії 24.03.2010.

УДК 577.3

Гречко Л.Г., докт. фіз.-мат. наук, проф.,
Гічан О.І., канд. фіз.-мат. наук
Лерман Л.Б., канд. техн. наук,
Білокриницька Л.М., канд. фіз.-мат. наук

Деякі фізико-математичні моделі розвитку онкологічних пухлин

У статті аналізуються математичні моделі, які описують розвиток пухлини як окремої популяції ракових клітин. За допомогою якісної теорії диференціальних рівнянь розглянуто моделі експоненціального та логістичного зростання чисельності таких популяцій. Також розглядається модель, в якій враховано обмін між активними і сплячими клітинами пухлини. Наведено результати якісного і кількісного дослідження відповідних диференціальних рівнянь.

Ключові слова: моделі розвитку пухлин, популяційні моделі, лінійний аналіз стійкості.

*E-mail: llerman@yandex.ru

Вступ

Як відомо [1], ракова клітина, яка виникає в результаті мутації, набуває можливість до необмеженого ділення. В більшості випадків зростання новоутворення обмежується, як тільки пухлина досягає міліметрового діаметру. Але в результаті подальшої мутації клітин відбувається виникнення так званих факторів зростання, які стимулюють проростання пухлини у напрямку кровоносних судин. При цьому ракові клітини не тільки забезпечуються киснем та поживними речовинами, але і отримують можливість поширення через кровоносні судини по всьому організму. Аналогічну роль відіграє і лімфосистема. Відомий також інший досить несподіваний для практичної медицини результат: навіть після «відключення» кровоносних судин пухлина то прогресує, то навпаки, зменшується. У роботах А.І. Агасєнко розвинуто загальну нову теорію канцерогенезу із врахуванням значної кількості експериментальних даних [2]. Згідно з експериментально встановленими результатами [3-5] ракову пухлину можна розглядати як популяцію з активних клітин, що спроможні до поділення, і сплячих клітин. Для математичного опису такого процесу можна використати відомі популяційні моделі, що представляють собою звичайні диференціальні рівняння [6 - 8]. Ці моделі і розгляда-

Grechko L. G., Dr. Sc., prof.,
Gichan O.I., PhD.,
Lerman L.B., PhD.,
Bilokrinistka L.M., PhD.

Some physical-mathematical models of tumour evolution

The paper presents some mathematical models for description of tumour evolution as local population of cancer cells. On the base of the qualitative theory of differential equations the models of exponential and logistic increment of such populations are concerned. A model taking into account exchange between active and sleep cells of tumour is also investigated. The results of qualitative and numerical analysis of the mentioned above differential equations are presented.

Key Words: tumour evolution models, population models, linear stability analysis

ються в роботі на основі методів лінійного аналізу стійкості [6 - 9]. Хоча вони мають обмежене застосування, оскільки не враховують взаємодію з імунною системою організму, вони досить повчальні і можуть бути використані для моделювання розвитку пухлин.

Динамічні моделі розвитку окремої пухлини без врахування відгуку імунної системи

1. Будемо розглядати пухлину як окрему популяцію онкологічних клітин, які самі себе відтворюють. Використаємо в якості моделі популяційну модель Мальтуса (1766 - 1834). Ця модель за відсутності факторів, які стримують зростання популяції, описує збільшення розмноження зі швидкістю, яка пропорційна її кількості. Записуючи її у вигляді диференціального рівняння, отримуємо модель експоненціального зростання чисельності популяції, яка добре відтворює зростання клітинних популяцій за умов відсутності будь-якого обмеження живильних речовин

$$\frac{dx}{dt} = rx, \quad (1)$$

де r – коефіцієнт (константа) власної швидкості зростання популяції, який віддзеркалює генетичні можливості та її генетичний потенціал.

Якщо врахувати природну або штучну загибель особин в популяції, то під r слід розуміти різницю $r = b - d$, де b – коефіцієнт відтворення (появи нових клітин), d – коефіцієнт їх загибелі. Отже параметр r може бути як додатним, так і від'ємним. Інтегруючи (1) за початкової умови $x(0) = x_0$, знаходимо, що

$$x = x_0 e^{rt}. \quad (2)$$

На рис.1 показані графіки моделі експоненціального зростання для додатного і від'ємного значень коефіцієнта r .

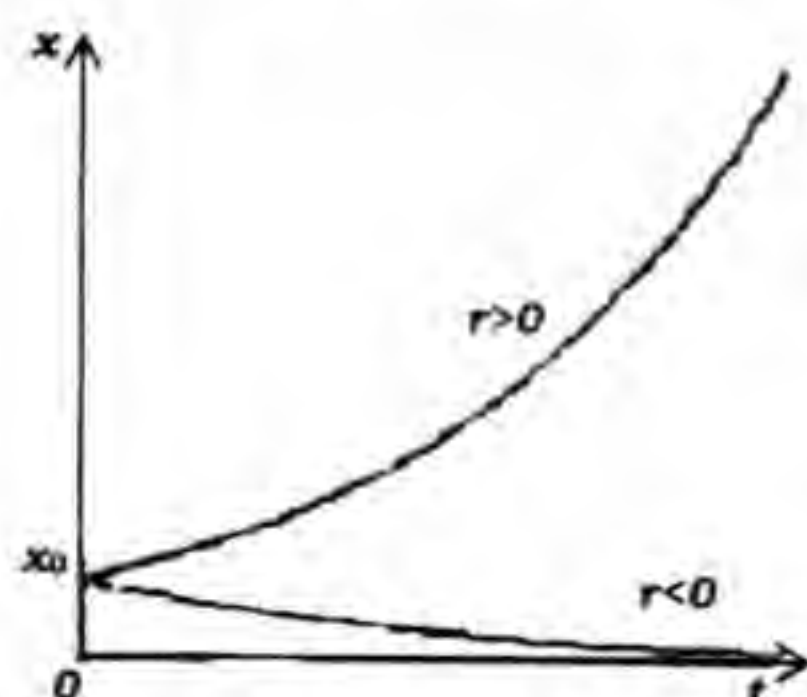


Рис. 1. Зміна чисельності популяції ракових клітин у часі за законом Мальгуса

2. Указана вище модель може бути застосована для опису розвитку пухлини при наявності необмежених джерел живлення на початкових стадіях розвитку пухлини. Але на практиці розміри пухлини мають певні обмеження за рахунок недостатньої кількості живильних речовин. Тому в цьому випадку зручно застосовувати рівняння, яке включає стримуючий фактор в розмноженні. Така класична модель розвитку популяцій була вперше запропонована Ферхюльстом у 1838 році, і в неперервному вигляді записується у вигляді

$$\frac{dx}{dt} = rx \left(1 - \frac{x}{K} \right) \text{ або } \frac{dx}{dt} = rx - \delta x^2, \quad (3)$$

де $r, K, \delta = r/K$ – деякі додатні константи. В порівнянні з рівнянням (1) маємо додатковий нелінійний (квадратичний) член в правій частині рівняння.

Це нелінійне рівняння має дві важливі властивості. При малих x чисельність популяції x зростає, а при великих – прямує до границі K . Отже рівняння описує обмежене зростання

популяції, і його ще називають рівнянням логістичного зростання.

Рівняння (3) неважко розв'язати аналітично. Відокремлюючи змінні, знаходимо його загальний розв'язок

$$\frac{x}{K-x} = Ce^{rt},$$

який із врахуванням початкових умов $x(0) = x_0$ набуває вигляду

$$x(t) = \frac{x_0 K e^{rt}}{K - x_0 + x_0 e^{rt}}.$$

З отриманої формули видно, що поведінка розв'язків залежить від початкових умов. Якщо початкова чисельність $x_0 > K$, то функція спадає. В протилежному випадку – зростає, і, якщо $x_0 < K/2$, функція чисельності популяції має точку перегину з координатами

$$\left(\frac{1}{r} \ln \frac{K - x_0}{x_0}; \frac{K}{2} \right).$$

Логістичні криві зростання за різних початкових умов наведені на рис. 2.

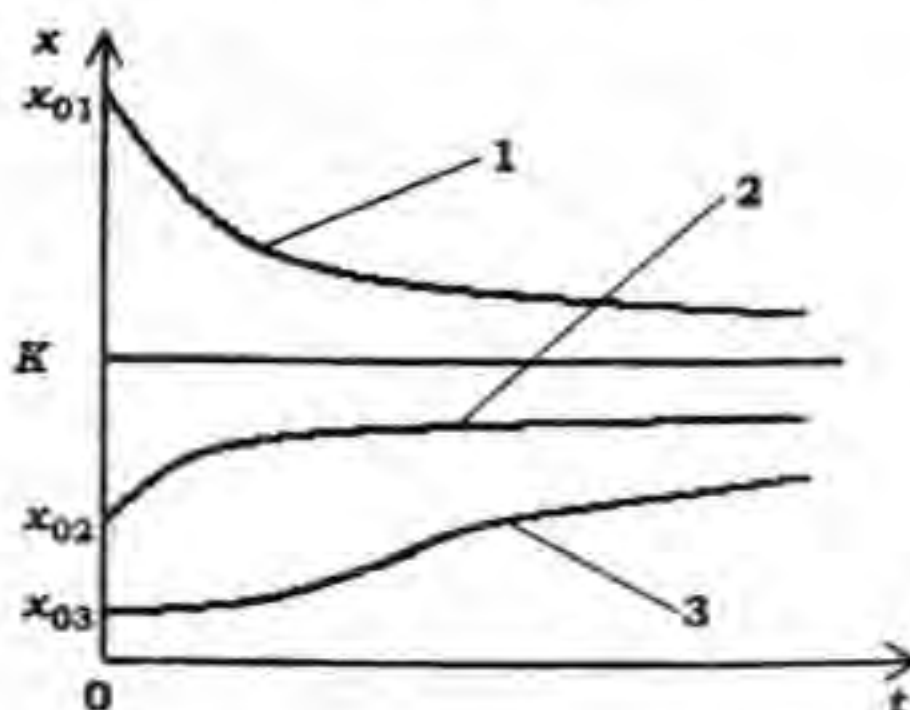


Рис. 2. Зміна чисельності популяції ракових клітин у часі за умови обмеженості живильних ресурсів при різних початкових умовах:

1 – $x_0 > K$, 2 – $K/2 < x_0 < K$, 3 – $0 < x_0 < K/2$

В даному випадку нас цікавлять відносно малі початкові значення чисельності ракових клітин x_0 , коли злоякісне утворення тільки виникло. Графіки на рис. 2 показують, що чисельність популяції (розмірів пухлини) буде обмеженою, а її кінцевий розмір залежить від значень параметрів r, K .

3. Згідно з експериментально встановленими результатами [4, 5] в популяції ракових клітин

існують активні клітини, тобто такі, які спроможні до поділу, і сплячі клітини. Позначимо через x_1 число активних клітин, а через x_2 – число сплячих клітин. Між цими групами відбувається неперервний обмін: частина активних переходить до сплячих, а частина сплячих перетворюється на активні. Будемо враховувати обмеженість джерел живлення, а також розглядати випадок відсутності зовнішнього втручання до пухлини і відсутності впливу імунної системи. Тоді модель можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= (\kappa_1 - \beta_1)x_1 - \frac{\beta_1}{K}x_1^2 + \gamma_1x_2, \\ \frac{dx_2}{dt} &= \beta_1x_1 - \gamma_1x_2, \end{aligned} \quad (4)$$

де додатні сталі мають такий зміст: коефіцієнт κ_1 визначає швидкість утворення нових клітин (із врахуванням їх природної загибелі), коефіцієнт β_1 визначає зменшення активних клітин за рахунок їх переходу у сплячі, а коефіцієнт γ_1 – їх збільшення за рахунок переходу сплячих клітин у активні. Обмеженість джерел живлення врахована квадратичним членом у першому рівнянні системи (4). При заміні $t^* = \beta_1 t$, $\gamma^* = \gamma_1 / \beta_1$, $\kappa^* = (\kappa_1 - \beta_1) / \beta_1$ та $\delta^* = 1 / K$ вона матиме вигляд

$$\frac{dx_1}{dt^*} = \kappa^* x_1 - \delta^* x_1^2 + \gamma^* x_2, \quad \frac{dx_2}{dt^*} = x_1 - \gamma^* x_2 \quad (5)$$

Ця система завжди має дві особливі точки: $P_1 = (0, 0)$ та $P_2 = ((\kappa^* + 1) / \delta^*, (\kappa^* + 1) / (\delta^* \gamma^*))$ (див. рис.3). За будь-яких фізичних значеннях параметрів $\kappa^*, \delta^*, \gamma^*$ точка $P_1(0, 0)$ є сідлом, бо власні значення матриці Якобі системи (5) у ній мають вигляд

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left[(\kappa^* - \gamma^*) \pm \sqrt{(\kappa^* + \gamma^*)^2 + 4\gamma^*(\kappa^* + 1)} \right].$$

Тоді точка $P_2((\kappa^* + 1) / \delta^*, (\kappa^* + 1) / (\delta^* \gamma^*))$ завжди буде стійким вузлом, бо у ній маємо

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left[-(2 + \kappa^* + \gamma^*) \pm \sqrt{(2 + \kappa^* + \gamma^*)^2 - 4\gamma^*(\kappa^* + 1)} \right].$$

Вираз під коренем в останньому випадку не може бути негативним ні за яких позитивних значень параметрів $\kappa_1, \beta_1, \gamma_1$. Він дорівнює нулю лише при $\gamma^* = \pm 2\sqrt{-1 - \kappa^*} + \kappa^*$. Ці значення параметра

γ^* є завжди уявними, бо параметр $\kappa^* = (\kappa_1 - \beta_1) / \beta_1 < 0$, коли $\kappa_1 < \beta_1$, але оскільки параметри κ_1, β_1 є позитивними, то завжди $\kappa^* \leq 1$.

Таким чином, лінійний аналіз системи (5) показує, що при будь-яких фізичних значеннях параметрів $\kappa^*, \delta^*, \gamma^*$ вона має одну стійку особливу точку P_2 , яка є вузлом, через неї проходять всі фазові траєкторії системи, та одну нестійку особливу точку P_1 , яка є сідлом, через яку проходять лише нулькліни системи $\kappa^* x_1 - \delta^* x_1^2 + \gamma^* x_2 = 0$, $x_1 - \gamma^* x_2 = 0$ (рис.3).

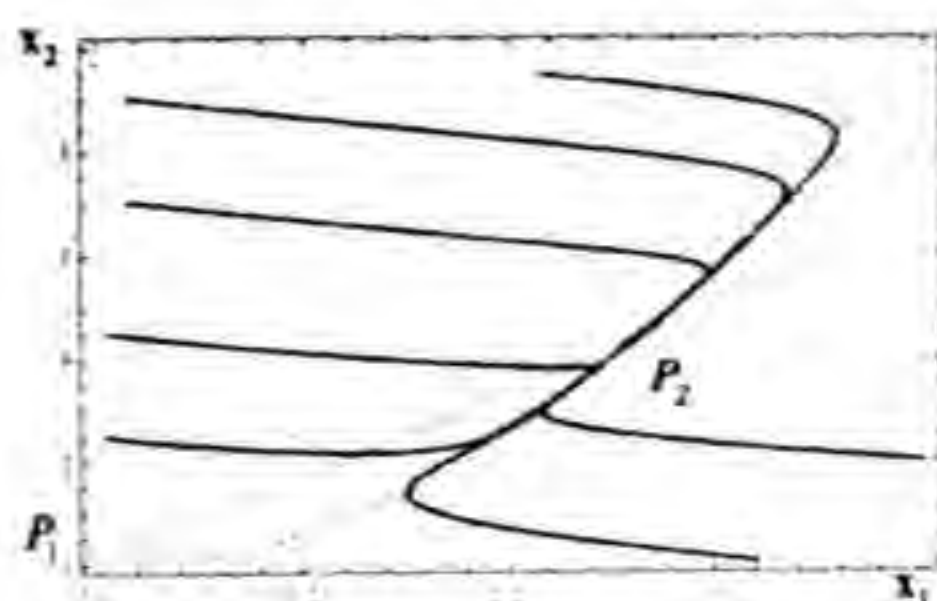


Рис. 3. Фазовий портрет системи (5) при значеннях параметрів $\kappa^* = 0,05$; $\delta^* = 0,8$; $\gamma^* = 0,3$.

Поведінка змінних x_1, x_2 в околі цих точок при різних початкових умовах та значеннях параметрів моделі з рис. 3 представлена відповідно на рис. 4 та рис. 5.

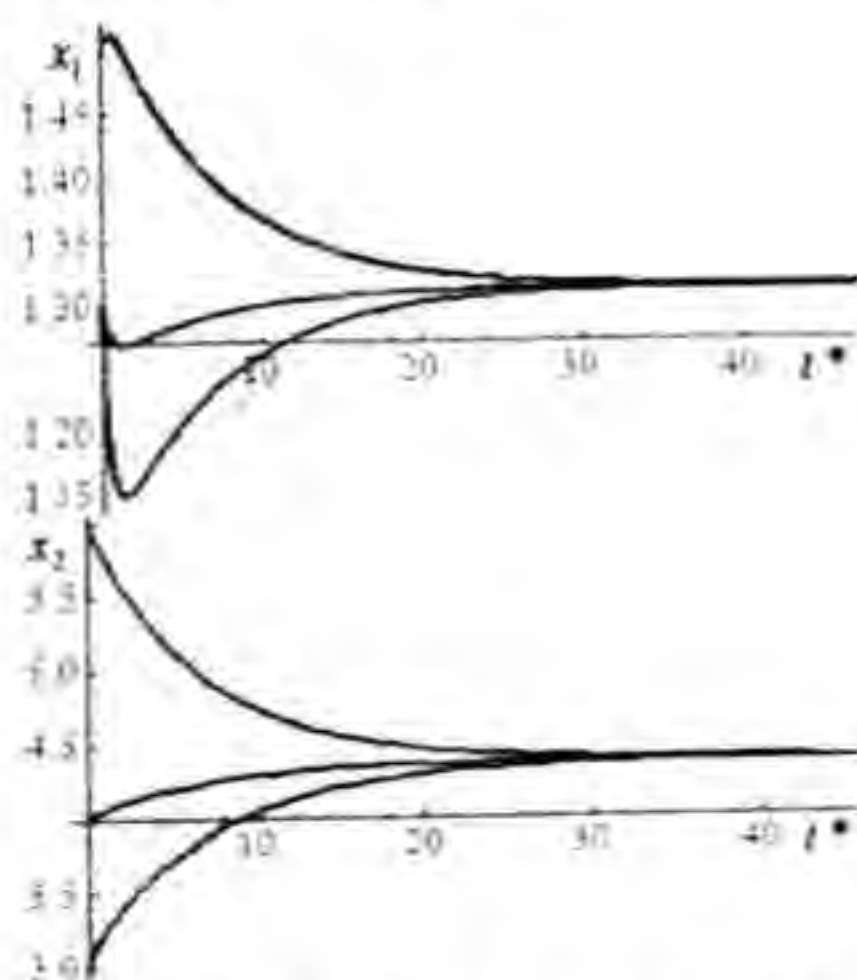


Рис. 4. Динаміка змінних x_1, x_2 системи (5) при різних початкових значеннях в околі стійкої особливої точки P_2

Як видно в обох випадках змінні прямують до своїх стаціонарних значень $x_1 = (\kappa^* + 1) / \delta^*$ та

$x_2 = (\kappa^* + 1)/(\delta^* \gamma^*)$, причому для однієї зі змінних ця еволюція завжди є немонотонною.

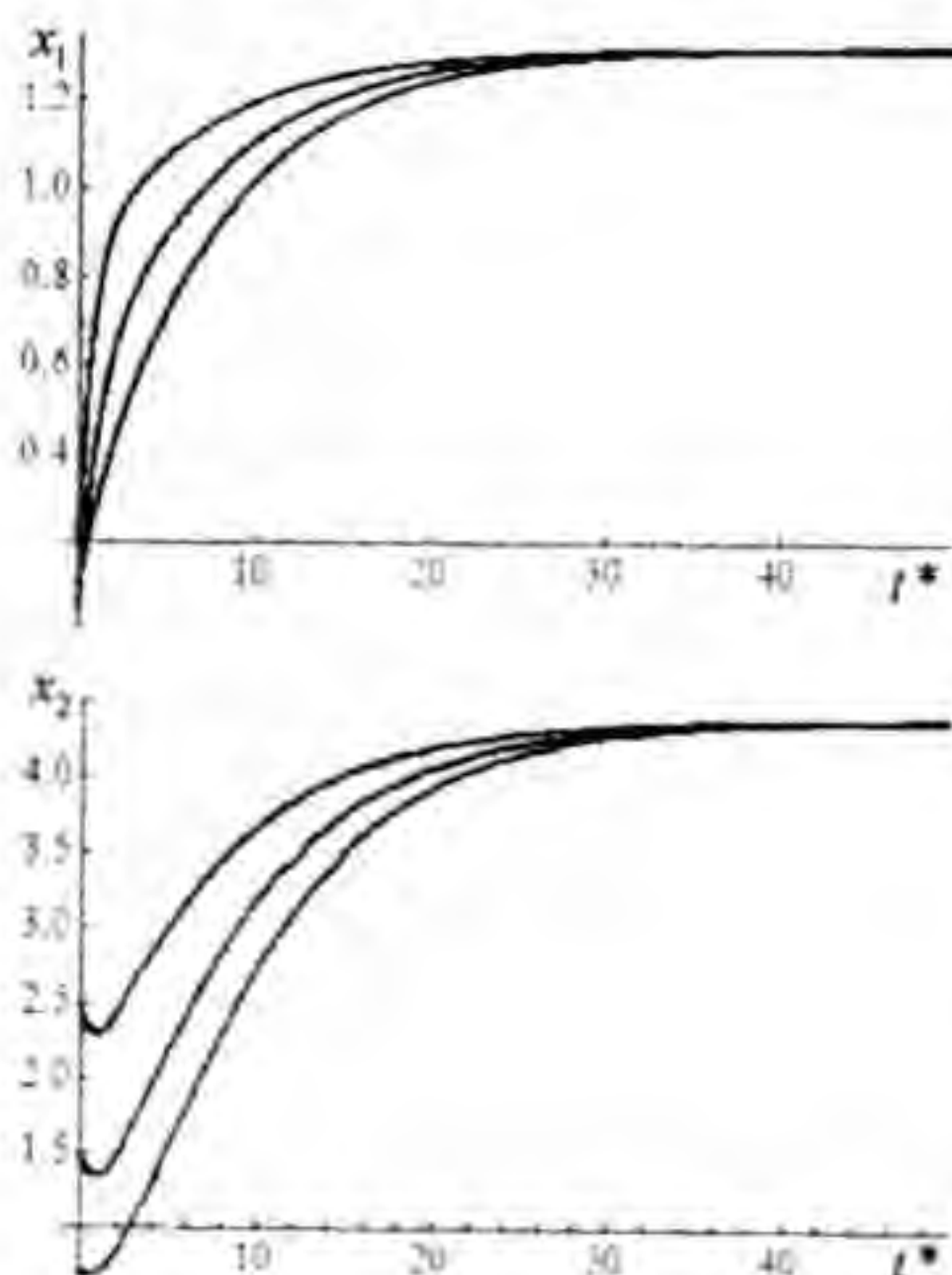


Рис. 5. Динаміка змінних x_1, x_2 системи (5) при початкових їх значеннях в околі нестійкої особливої точки $P_1(0,0)$ та значеннях параметрів з рис. 3.

Висновки

Застосовані у роботі математичні моделі для опису процесу розвитку пухлин, як окремих популяцій клітин, дали як їх монотонну еволюцію у часі так і немонотонну. Для відтворення більш складної динаміки, наприклад автоколивань, періодичного зростання та зменшення їх кількості, необхідно враховувати й інші процеси взаємодії організму з раковими клітинами [10-13]. Зокрема, врахування відгуку імунної системи, коли ракові клітини взаємодіють з лейкоцитами, корисною може виявитись відома в біології модель хижак-жертва [7, 8, 10].

Список використаних джерел

1. Wheldon T.E. Mathematical Models in Cancer Reseaserch, A. Hilger. – Briston and Philadelphia 1988, 245 p.
2. Агеенко А.И. Теоретические и практические аспекты новой общей теории канцерогенеза. – Институт регенеративной биомедицины, Москва.
http://regbiomed.com/jornal/natyr_age.slit

3. Кавецкий Р.Е. Взаимодействие организма и опухоли. – Киев: Наук. думка, 1977. – 235 с.
4. Ранняя онкологическая патология. /Под редакцией Б.Е. Петерсона и В.И. Чиссова. – М.: Медицина, 1985. – 320 с.
5. Казьмин С.Д. Биохимия митотического цикла опухолевых клеток. – Киев: Наук. думка, 1984. – 176 с.
6. Ризниченко Г.Ю. Лекции по математическим моделям в биологии. Часть I. –М.-Ижевск, 2002 г. – 231 с.
7. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. – М.: Наука, 1984. – 311 с.
8. Murray J.D. Mathematical Biology. – Springer, 1993.
9. Эрроусмит Д., Плейс К. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Качественная теория с приложениями. Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 238 с.
10. Колянова Т.В. Моделювання взаємодії інфекції та природженого імунітету // Вісник Київського університету. Серія фіз.-мат. науки. – 2007, 4. – С. 174-177.
11. Castiglione F., Piccoli B. Cancer immunotherapy, mathematical modeling and optimal control // J. Theor. Biol. – 2007. – V. 247, № 4. – P. 723-732.
12. Arakelyan L., Merbl Y., Agur Z. Vessel maturation effects on tumour growth: validation of a computer model in implanted human ovarian carcinoma spheroids // European Journal of Cancer. – 2005. – V. 41, № 1. – P. 159-167.
13. Quaranta V., Weaver A.M., Cummings P.T., Anderson A.R.A. Mathematical modeling of cancer: The future of prognosis and treatment // Clinica Chimica Acta. – 2005. – V 357, № 2, – P. 173-179.

Надійшла до редколегії 29.09.09

УДК 519.9

Леонід Г. Гречко*, д. ф.-м.н., проф.
Олена Ю. Гришчук, асп.

Поляризованість і коефіцієнт підсилення малої частинки з адсорбованим на її поверхні тонким шаром молекул

Розглядається вплив адсорбційного шару на
малі сферичні частинки на коефіцієнт
підсилення комбінаційного розсіяння світла
молекулами або атомами в зовнішньому
електричному полі.

Показано, що в зовнішньому електричному
полі поляризованість такої частинки може
зростати в 10^6 і більше разів на певних
комбінаційних частотах.

Ключові слова: комбінаційне розсіяння, малі
частинки, поляризованість, коефіцієнт
підсилення

Вступ

Розвинутий раніше метод було
використано для знаходження поляризованості
двошарової частинки, ядром якої є метал, а тонка
оболонка складається з шару адсорбованих на ядрі
молекул товщиною $|a| \ll R$ (R - радіус
металевого ядра) з поляризованістю α_k (k - номер
молекули) [1]. В наближенні тонкого
поверхневого шару та при виконанні умови
 $\omega R \ll 1$ (електростатичне наближення)
поляризованість такої частинки, поділена на $R^3 \epsilon$,
[1]:

$$\frac{1}{R^3} \alpha(\omega) = \frac{\nu(\omega)}{2} + \frac{u(\omega) \alpha_0(\omega)}{1 - \alpha_0(\omega) \nu(\omega)}, \quad (1)$$

В (1) введені наступні позначення

$$\nu(\omega) = \frac{S(\omega)}{1 - \frac{S^2(\omega)}{8}}, \quad u(\omega) = \frac{1 + \frac{S^2(\omega)}{8}}{1 - \frac{S^2(\omega)}{8}},$$

$$S(\omega) = \frac{2 \sum_k \alpha_k(\omega) N_k}{R^3}, \quad \alpha_0(\omega) = \frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2},$$

де N_k - число атомів або молекул сорту k , а
 $R^3 \alpha_0(\omega)$ - поляризованість малої частинки без
поверхневого шару.

Полюси поляризованості дають частоти
поверхневих збуджень кулі з адсорбційним

Leonid G. Grechko*, Dr. Sci.

Olena Yu. Grishchuk, post-grad.

Polarisation and factor of strengthening of a small particle with the thin layer of molecules adsorbed on its surface

Influence adsorptive layer on small spherical
particles on factor of strengthening of
combinational dispersion of light by molecules or
atoms in external electric field is considered.

It is shown, that polarisation of such particle can
increase in external electric field in 10^6 and more
times on certain combinational frequencies.

Keywords: Combinational dispersion, small
particles, polarisation, strengthening factor

*E-mail: lgrechko09@rambler.ru

шаром [1]. Їх спектр визначається (знаменник в
(1) покладається рівним нулеві) з рівняння

$$\operatorname{Re} \left[\frac{1}{\alpha_0(\omega)} - \nu(\omega) \right] = 0, \quad (2)$$

яке має більше коренів, ніж рівняння.

$$\operatorname{Re} \left[\frac{1}{\alpha_0(\omega)} \right] = 0, \quad (3)$$

яке дає спектр поверхневих збуджень кулі без
поверхневого шару.

Відмітимо, що знаючи $\alpha(\omega)$, можна
розраховувати діелектричну проникність МДС з
подібними включеннями (при малих ступенях
заповнення) за формулою Максвелл-Гарнетта
[2].

Отримані результати дозволяють також
визначати коефіцієнт підсилення комбінаційного
розсіяння світла на адсорбованих молекулах.
Фактор F більших, ніж 10^6 , і сильно залежить від
розміру частинок. Звичайно, сильну залежність
 F від розміру частинок пов'язують з
відхиленням форми частинок від сферичної.

Розглядається наступна модель
включення: метал (кульового ядра), обмежений
сферою радіусу R , описується діелектричною
проникністю $\epsilon(\omega)$, що виправдано для куль,
розмір яких перевищує 2 нм [3]. Атоми або
молекули поверхневого адсорбційного шару
описуються ефективною поляризацією $\alpha_k(\omega)$, де

(ω - частота, k - визначає сорт атомів або молекули); частинка знаходиться у вакуумі.

Коефіцієнт підсилення комбінаційного розсіяння світла молекулами на малій сферичній частинці можна подати у вигляді [4].

$$F(\omega_1, \omega_2) = \left[1 + 2(R/R_0)^3 \alpha(\omega_1) \right]^2 \left[1 + 2(R/R_0)^3 \alpha(\omega_2) \right]^2, \quad (4)$$

де ω_1 - частота лазерного випромінювання, ω_2 - частота комбінаційного розсіяння.

Якщо частоти поверхневих збуджень близькі до ω_1, ω_2 , обидва множники рівняння можуть бути великими і має місце значне збільшення коефіцієнта підсилення.

Зробимо оцінки впливу поверхневого адсорбційного шару на коефіцієнт підсилення $F(\omega_1, \omega_2)$, вважаючи, що метал кулі описується діелектричною проникністю в гідродинамічному наближенні з частотою плазмових коливань ω_p та частотою зіткнень електронів $\gamma\omega_p$; в адсорбційному шарі атоми або молекули одного сорту та описується ефективними поляризовностями в дворівневому наближенні з частотою переходу ω_0 та частотою затухання $\Gamma\omega_0$. В цьому наближенні без поверхневого шару куля має одне поверхнєве збудження з частотою $\omega_s = \omega_p / \sqrt{3}$. Частоти поверхневих збуджень кулі з поверхневим шаром знаходяться з рівняння:

$$\left[1 - 3 \left(\frac{\omega}{\omega_s} \right)^2 \right] \left[(1 - \alpha^2 + \beta^2)^2 + 4\alpha^2\beta^2 \right] = 2\sqrt{2}\alpha [1 - \alpha^2 - \beta^2], \quad (5)$$

де α, β - реальна та уявна частини виразу

$$\frac{1}{R^3} \frac{P}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 - 2i\Gamma \frac{\omega}{\omega_0}}, \quad (6)$$

де $\alpha(0)$ - поляризованість атомів чи молекул поверхневого шару на нульовій частоті, N - число атомів чи молекул в шарі, $p = N\alpha(0)/\sqrt{2}$.

Частоти поверхневих збуджень сильно залежать від радіуса частинки та характеристик поверхневого шару, що може забезпечити при певних умовах одночасний резонанс та значне зростання коефіцієнту підсилення F . На рис. 1 наведено залежність коефіцієнту підсилення $F(\omega_1, \omega_2)$ від різниці частот $\omega_1 - \omega_2$ на кулі без адсорбційного шару - I, з адсорбційним шаром при $P/R^3 = 0,01$ - II та при $P/R^3 = 0,05$ - III.

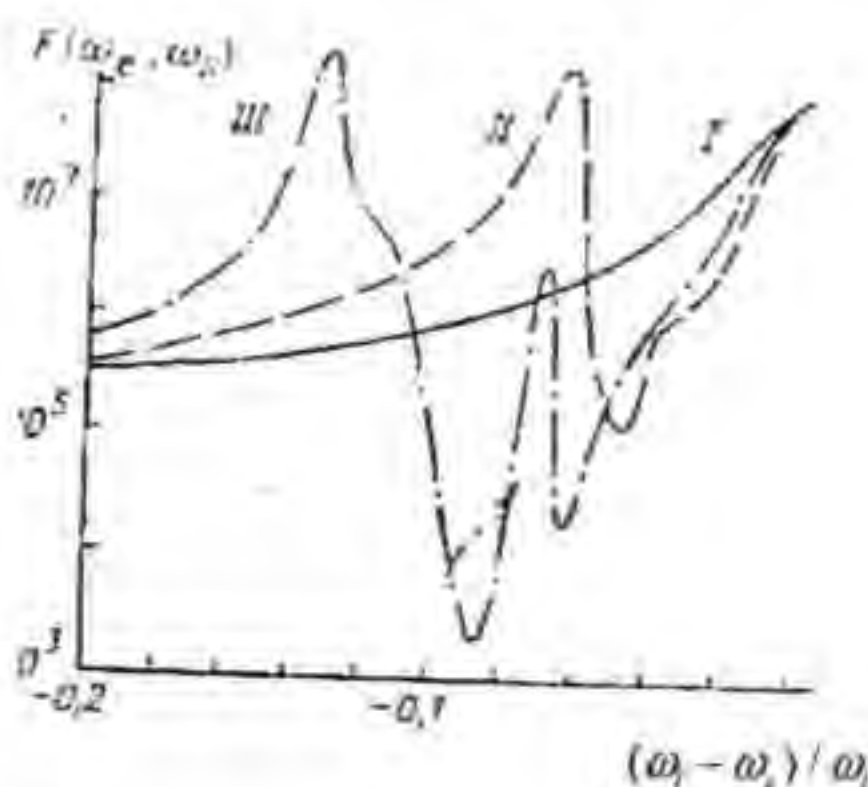


Рис 1. Залежність коефіцієнту підсилення $F(\omega_1, \omega_2)$ від різниці частот $\omega_1 - \omega_2$.

Наявність поверхневого адсорбційного шару може бути однією з причин, що обумовлюють коефіцієнти підсилення комбінаційного розсіяння більші за 10^4 , та сильну залежність коефіцієнту підсилення від радіусу частинки.

Висновки

З приведених розрахунків слідує, що інтенсивність комбінаційного розсіювання в розглянутій матричній системі може досягати значних величин, порядку $10^9 - 10^{10}$, на частотах ω_1, ω_2 . Величина коефіцієнту підсилення сильно залежить від розміру частинки, її радіуса та характеристик поверхневого шару.

Література

1. Гречко Л.Г. Влияние структуры и внешних воздействий на процессы взаимодействия электромагнитного излучения с гетерогенными системами // Автореферат диссертации на соискание ученой степени д.ф.-м.н., К., 1990.
2. Barrera R.G., Monsivais G., Mochan W.L. Renormalized polarizability in the Maxwell Garnett theory // Phys. Rev. B. - 1988. - 38, № 8. - P. 5371-5379.
3. Петров Ю.И. Физика малых частиц. М., 1982.
4. Гигантское комбинационное рассеяние // Под ред. Р. Ченга и Т. Фуртака. М., 1984.

Надійшла до редколегії 28.05.2010

УДК 519.9

Казо І.Ф., к. ф.-м. н., Мавланова О.Д., асп.,
Весна Г.В., к. ф.-м. н.

Морфологія поверхні керамік системи TiC-B₄C.

У роботі використаний метод Оже-спектроскопії для виявлення структури поверхні керамік, що утворюються при твердофазному високотемпературному синтезі в системі TiC-B₄C. Показано, що зразки мають розвинену неоднорідну структуру, що містить як зерна TiB₂, так і вуглець (фаза графіту, частково аморфна фаза). Досліджено залежності формування від режимів синтезу керамік.

Ключові слова: вуглець, кераміка, дифузія.

*E-mail: Anaskor@i.ua

Вступ

Сьогодні вивчення та отримання нових матеріалів займає значну частину обсягу наукового пошуку. Керамічні матеріали – це один із перспективних напрямків таких досліджень. В наших дослідженнях використовується метод твердофазного синтезу, реагентами в якому виступають порошкові механічні суміші. Як відомо з літератури [1] при спіканні та гарячому пресуванні (ГП) порошкових матеріалів, в їх структурі спостерігаються утворення різного фазового та хімічного складу (глобули, бакітьюби, фуллереноподібні кластери). Оскільки процеси, що протікають в такому виді синтезу споріднені, можна припустити, що певні утворення будуть спостерігатись і у досліджуваних керамік. Для перевірки цієї гіпотези нами були проведені дослідження поверхні зразків, отриманих при твердофазному синтезі бориду титану з карбиду титану й карбиду бора. Дана реакція добре відома, як спосіб одержання міцного, хімічно й термостійкого матеріалу. Формула хімічної реакції цього процесу синтезу може бути записана так:



© Казо І.Ф., Мавланова О.Д., Весна Г.В., 2010

Kazo I. F., PhD., Mavlanova O. D., PhD stud.,
Vesna G. V., PhD

The Morphology of Ceramics Surface of the System TiC-B₄C.

The Auger spectrometry method for detecting surface structure of ceramics, which formed during solid state high temperature synthesis, of the system TiC-B₄C has been used. It is shown: that samples have an unhomogendous extended surface, contained grains of TiB₂ and carbon (graphite phase, partially amorphous phase). The dependences of surface formation from ceramics synthesis condition have been investigated.

Key Words: carbon, ceramics, diffusion.

Методика дослідження й підготовки зразків

Виготовлення зразків проводилося згідно методики описаній в попередніх роботах[4]. Після ГП отримані масивні зразки розмелювали до величини зерен ≈ 1 мкм, та витримували в розчині (толуол) від 7-14 діб. Після цього зразки висувували при н/у тривалий термін, до утворення сухого порошку. На поверхні зразків були проведені Оже-сктроскопічні дослідження. Використовувалася монокристалічна кремнієва підкладка, орієнтації (111).

Серія складалась із чотирьох зразків наступного маркування:

Маркування зразків.

Таблиця 1.

№ п/п	T, C	t, c	P, МПа	Маркування
1	1100	2400	0	1100-2400-0
2	1200	2400	0	1200-2400-0
3	1300	240	0	1300-240-0
4	1400	240	0	1400-240-0

Результати й обговорення

За попередньо отриманими даними рентгенівського аналізу після гарячого

Представлено: член-кор. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Макара В.А

пресування в зразках на основі подвійної суміші $2\text{Ti} + \text{B}_4\text{C}$ не виявлено фаз Ti і B_4C , виявлена наявність тільки фази TiB_2 і графіту. Вуглець у вигляді графітної й рентгеноаморфної фаз в отриманих зразках перебуває в суміші із кристалічною фазою TiB_2 . Під час ГП суміші, у якій присутні сполуки Ti і B_4C відбувається реакція високотемпературного твердофазного синтезу бориду титану з виділенням вуглецю.

Як відомо, Оже-спектроскопія - галузь електронної спектроскопії, в основі якої лежать вимірювання енергії й інтенсивностей струмів Оже-електронів, а також аналіз форми ліній спектрів Оже-електронів, емітованих атомами, молекулами й твердими тілами в результаті Оже-ефекту. Енергія Оже-електронів визначається природою атомів, що випромінюють, з довколишніми атомами, що приводить до невеликих змін енергії Оже-електронів. Тому за Оже-спектрами можна визначити елементарний склад приповерхневих шарів твердих тіл, одержувати інформацію про міжатомні взаємодії, здійснювати хімічний аналіз газу. Аналіз елементного складу здійснюється шляхом зіставлення Оже-спектрів з табличними даними. Розташування піка в енергетичному спектрі Оже-електронів несе інформацію про хімічну природу атомів, його амплітуда - про їхні концентрації. Взаємодії атома з його оточенням проявляються у формі Оже-піків і їхніх енергетичних зсувів. Оже-електронна спектроскопія дає нам інформацію про елементний склад ділянки поверхні тіла, розміри якого в першому наближенні визначаються розмірами самого електронного зонда (пучка первинних електронів). Переміщуючи електронний зонд по поверхні, можна одержати дані про розподіл елементів на ній у різних точках. В Оже-спектрометрах першого покоління діаметр електронного пучка становив десятки (у найкращому разі соті) частки міліметра. Тому й просторовий дозвіл було того ж порядку. У наш час випускаються так звані скануючі Оже-спектрометри, у яких два прилади об'єднані разом. Основою такого

комплексу є скануючий (растровий) електронний мікроскоп (РЕМ), у якому електронний пучок дуже малого діаметра (кілька нанометрів) пересувається у двох перпендикулярних напрямках, освітлюючи певну ділянку поверхні. Величина виникаючих при цьому струму вторинних електронів залежить від різних властивостей поверхні. Таким чином, у кожний момент часу вторинні електрони несуть інформацію з ділянки, обумовленої розмірами електронного пучка. Візуалізація картини здійснюється за допомогою електронно-променевої трубки, у якій синхронно з електронним зондом рухається свій електронний пучок. Якщо сигнал, пропорційний струму вторинних електронів, подати на модулюючий електрод електронної гармати трубки, то на екрані ми побачимо зображення поверхні в так званому режимі вторинних електронів. Такий прилад дозволяє одержати картину, що відбиває емісійні властивості досліджуваного зразка [6].

Загальний вигляд структури на поверхні отриманий за допомогою Оже-спектроскопії має неоднорідний характер рис.1. Так перший зразок має найбільш гомогенну поверхню, що складається з великої кількості малих зерен. В наступних зразках 2,3 спостерігається тенденція до росту зародків нової фази та поява певних аморфних прошарків, що як зазначалось в [5] має відношення до вуглецю.

Дані зображення були проаналізовані щодо залежності відносної кількості зерен певного розміру в заданому інтервалі розмірів. За отриманими результатами були побудовані графіки наведені на рис.2. При розрахунку використовувалися наступні інтервали: 2-15 (інтервал №1), 15-30 (№2), 30-50(№3), 50-100(№4), 100-150 (№5), 150-1500 (№6), 1500-4500 (№7) мкм. Обґрунтування вибору таких інтервалів полягає в тому, що кількість дрібних зерен доволі значна, а кількість великих - мала, тому доцільним було нелінійне збільшення інтервалу. Згладжені криві рис.2 свідчать, що характер протікання реакції не змінюється в інтервалі даних 1100-1400°C температур, що

в свою чергу добре узгоджується з поясненням механізмів реакції на основі дифузії компонент, запропонованим в [5]. Крім того, спостерігається співпадіння характеру розподілу від режиму до режиму із збільшенням температури. Точка перетину кривих відповідає оптимальному інтервалу розмірів зерна, і для цього інтервалу $D = D_3$ див.табл.2.

вказаний в $\text{мкм}^2/\text{с}$. З таблиці видно, що розкид значень складає п'ять порядків, що в свою чергу, можна пояснити наявністю суттєвого розкиду температур в різних точках зразка; зерна починають рости не з нульового розміру, а з розміру зародків зерен; в різних об'ємах зразка для різних зерен неоднакові концентраційні умови росту зерен. В межах одного зразка розкид

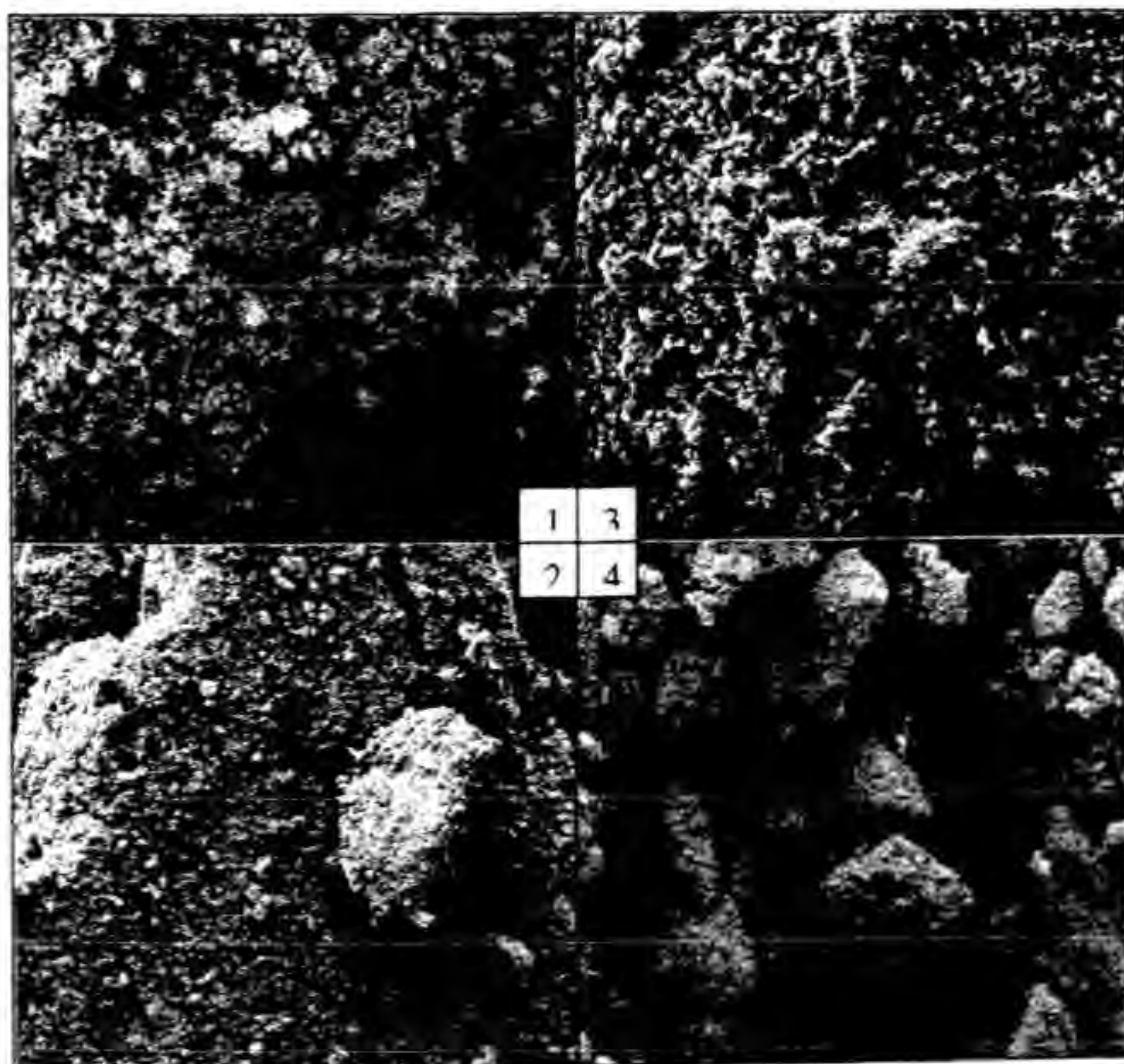


Рис. 1. Зображення поверхні зразків.(позначення згідно таблиці; збільшення відповідно: 1x100, 2x300, 3x70, 4x200)

В роботі було отримано оціночний коефіцієнт дифузії виходячи із емпіричної формули:

$$x^2 = 2Dt$$

де x – лінійний розмір зерна, D – коефіцієнт дифузії, t – час протікання реакції (ізотермічної витримки) [7].

Тоді, вважаючи, що зерна мають сферичну форму, маємо такі значення для D :

де D_1 , D_2 , D_3 відповідають різним розмірам зерен одного зразку; коефіцієнт

становить біля порядку. Крім того, в роботі наведено дані, які були обчислені, для досліджуваних зразків щодо енергії активації Q та дифузійного коефіцієнту D_0 , згідно наступних міркувань.

$$D_n = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT_n}\right),$$

де n – номер зразка, D_0 – передекспоненційний множник, Q – енергія активації, тоді для системи зразків однакового складу маємо:

$$Q = \frac{RT_{n+1}T_n}{T_{n+1} - T_n} \ln\left(\frac{D_n}{D_{n+1}}\right);$$

$$D_0 = \frac{D_{n+1}}{\exp\left(-\frac{Q}{RT_n}\right)}.$$

Отримані значення наведені в таблиці,

Розрахункові значення характеристик дифузії

Таблиця 2.

T	D ₁	D ₂	D ₃	D ₀	Q
1100	3,13E-04	1,56E-04	5,21E-05	3,41E+10	-220650
1200	1,04E-04	1,56E-04	2,50E-03	9,60E+03	-1403619
1300	1,86E+00	2,22E-01	5,20E-01	5,37E-01	891672
1400	3,13E-03	5,21E-03	9,38E-03		

літературні дані відповідно складають для нестехіометричного карбіду титану: для вуглецю $Q=398$ кДж/г*атом і $D_0=14$ см²/с, та для титану 735 кДж/г*атом і $4,36 \cdot 10^4$ см²/с відповідно [7]. Таку розбіжність можна пояснити тим, що досліджувані зразки - це суміш двох карбідів, а не чисті речовини; розміри зерен визначались із значними похибками, і враховувались зерна різного хімічного складу. Зважаючи на зазначені вище зауваження, виконані розрахунки можна вважати вірними в першому наближенні.

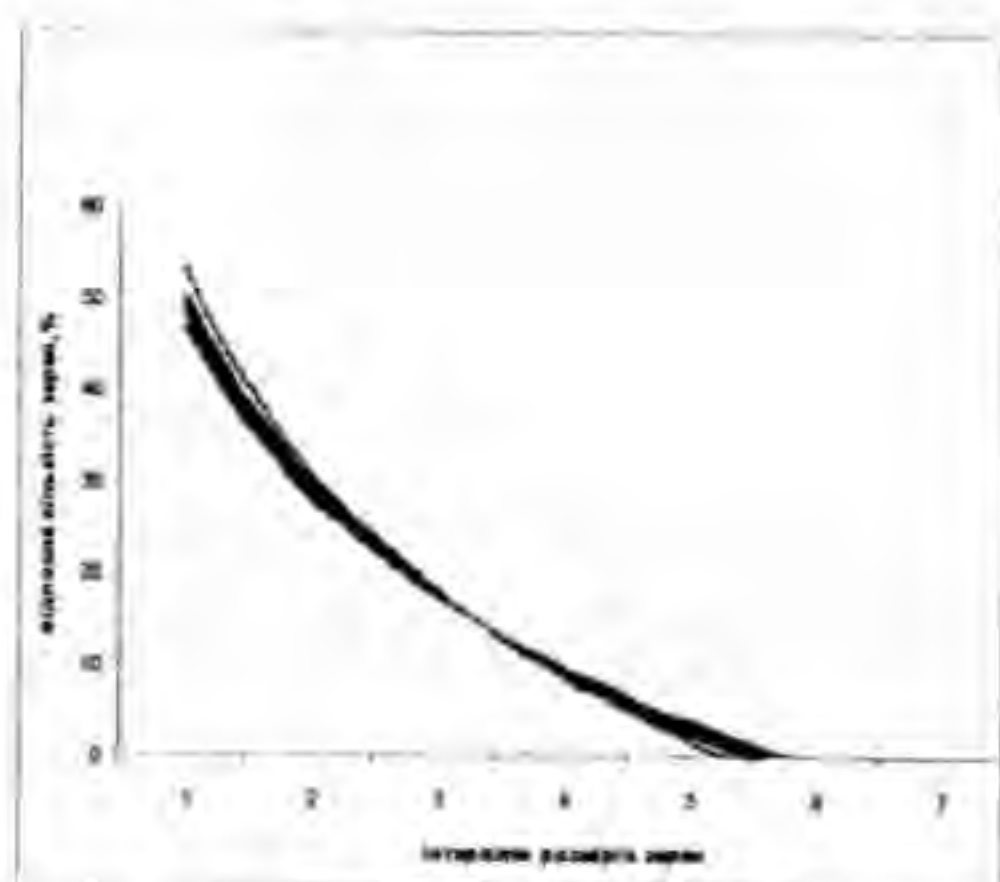


Рисунок 2. Залежність відносної кількості зерен від номеру інтервалу розмірів зерен.

Таким чином, в роботі показано, що досліджувані зразки кераміки системи мають неоднорідну розвинену структуру, що складається з кристалітів продуктів реакції та аморфної складової. Досліджено залежність

відносної кількості зерен від їх розміру, зазначено однаковий характер даного розподілу від температури синтезу. Підраховані коефіцієнти дифузії для різних режимів синтезу: $(1,86-5,21E-05)$ мкм²/с.

Список використаних джерел

1. Шпак А.П., Куницкий Ю.А., Карбовский В.А. Кластерные и наноструктурные материалы. – Киев: Академперіодика, 2001.
2. В. В. Скороход, І. В. Уварові, А. В. Рагуля. Фізико-хімічна кінетика в наноструктурних системах. Київ: Академперіодика, 2001 – 180 с.
3. Быков А. И., Гриднева И. В. Взаимодействие карбида бора с карбидами титана и циркония под давлением.// Порошковая металлургия, - 1998.- №1/2, – с.52-55.
4. Чорнобук С. В., Казо І. Ф., Макара В. А. Кінетика та механізми взаємодії в системі TiC + B₄C.
5. Макара В. А., Казо І. Ф., Мавланова О. Д., Чорнобук С. В., Ткач В. М. Структурний стан вуглецю в кераміці системи TiB₂ - C* отриманої методом твердофазного синтезу// Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки-2009-№3.- с.
6. <http://www.bestreferat.ru/archives/41/bestref-14341.zip> - 10/05/09, 11:31:41
7. Андриевский Р.А., Ланин А.Г., Рымашевский Г.А. Прочность тугоплавких соединений. М.: Металлургия. – 1974. – 232с.

Надійшла до редколегії 18.02.2010

УДК 535.015, 53.043

Конончук Г.Л. к. ф.-м.н., доц.,
Стукаленко В.В., к. ф.-м.н., м.н.с.,
Терентьєва Ю.Г., к. ф.-м.н., доц.

Скануючий інтерферометр Фабрі-Перо: інтерференція різночастотних коливань

Розглянуто два підходи, що дозволяють отримати результуючий розподіл випромінювання після скануючого інтерферометра Фабрі-Перо: традиційний, що ґрунтується на врахуванні дискретних положень рухомого дзеркала, та із врахуванням ефекту Доплера. Наведено приклад дослідження за допомогою такого інтерферометра частот мод газового лазера одночасно в двох ортогональних поляризаціях.

Ключові слова: скануючий інтерферометр, багатопроменевий інтерферометр, інтерферометр Фабрі-Перо, ефект Доплера, ортогонально поляризовані лазерні моди.

*E-mail: stu@univ.kiev.ua

Інтерферометр Фабрі-Перо (ІФП) використовується як спектральний прилад високої роздільної здатності [1-3]. Залежність результуючого розподілу спектру випромінювання після ІФП, як відомо, дається формулою Ейрі [3], її застосовують і для випадку скануючого інтерферометра. При цьому неперервний рухомий процес штучно замінюється дискретними квазістаціонарними положеннями дзеркал, кожному значенню товщини L інтерферометра ставлять у відповідність певну довжину хвилі λ , яка і реєструється детектором. Однак отримати інформацію щодо спектрального розподілу випромінювання саме у випадку скануючого ІФП можливо, використовуючи інший підхід, який, на наш погляд, більше відповідає фізичній суті. Остання полягає у тому, що у скануючому ІФП фактично маємо інтерференцію різночастотних коливань, повністю аналогічну тій, яка відбувається при генерації пікосекундних імпульсів в квантовому генераторі [4].

Спосіб використання ІФП зображено на рис. 1. Світло від досліджуваного джерела Σ за допомогою лінзи L_1 формується у систему паралельних пучків від сукупності локальних точкових джерел. Пучки світла, пройшовши дзеркальну систему ІФП (1, 2) та камерний об'єктив L_2 , в площині D створюють картину кільця, радіус яких в межах робочого діапазону визначається товщиною еталону і однозначно

G.L. Kononchuk PhD.,
V.V. Stukalenko, PhD, Sci. Res.,
Yu.G. Terentyeva, PhD, Prof.

Scanning Fabry-Perot interferometer: the interference of different frequency waves

We considered two approaches that allow for the resulting distribution of radiation after scanning Fabry-Perot interferometer: traditional, based on the discrete provisions of movable mirrors account, and another one - taking into account the Doppler effect. As an example of using this interferometer is given the research of radiation gas laser of frequency modes in two orthogonal polarization.

Key Words: scanning interferometer, multiple-beam interferometer, Fabry-Perot interferometer, Doppler's effect, the orthogonal polarization laser modes.

пов'язаний із довжиною хвилі λ у спектрі. Товщина L еталону 3 у найпростішому випадку, для забезпечення періодичності процесу, може змінюватись за допомогою п'єзокерамічного рушія 3 в межах $(1-2)\lambda$. Із усієї інтерференційної картини (ІК) в площині D реєструється через малий круглий отвір центральна частина її, світло з центрального порядку інтерференції попадає на ФЕП, сигнал якого у найпростішому випадку подається на вертикальний канал осцилографа або через аналого-цифровий перетворювач (АЦП) заноситься в пам'ять комп'ютера.

Синхронна зі зміною товщини розгортка дозволяє спостерігати безпосередньо на екрані осцилографа досліджуваний спектр, який змінюється в часі, причому частота оновлення інформації може складати декілька кілогерц.

Якщо незначну зміну відстані L виразити через швидкість руху дзеркала, то частота випромінювання ω при відбиванні від рухомого дзеркала мусить змінюватись на деяку величину Ω (доплерівське зміщення). В цьому випадку отримуємо спектральний розподіл випромінювання в центрі ІК залежно від часу, тобто, маємо одну незалежну змінну.

На рис. 2 показано послідовне відбивання хвилі у паралельних одне одному дзеркалах M_1 та M_2 , у результаті чого утворюється система джерел плоских хвиль, їхня швидкість і напрям руху позначені для відповідних площин цифрами

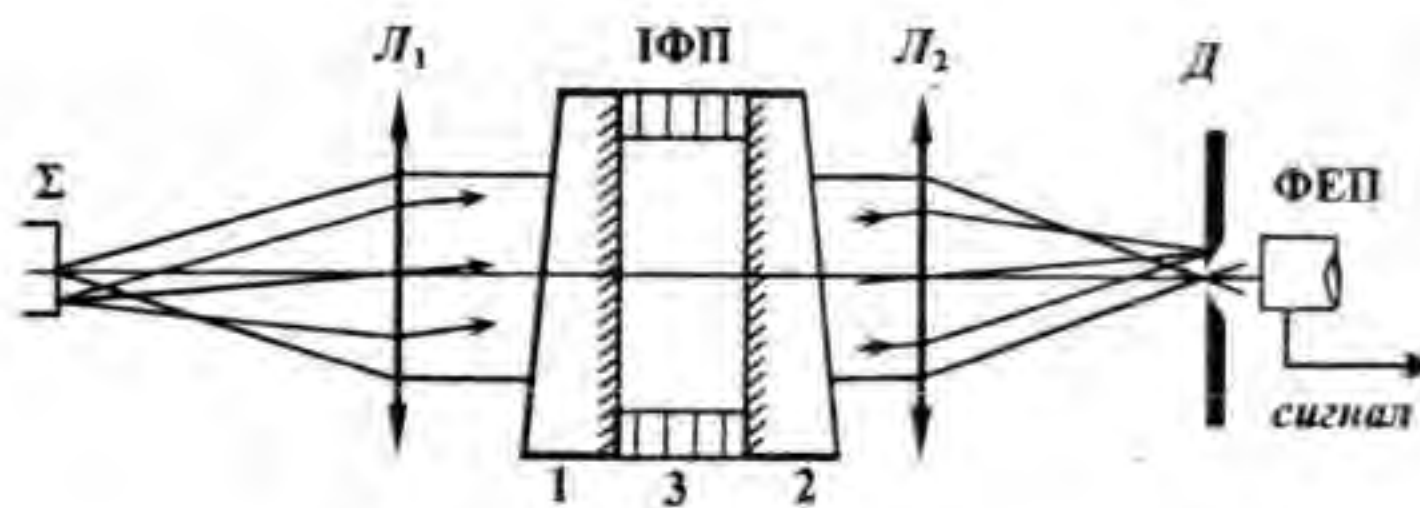


Рис. 1. Формування зображення у ІФП.

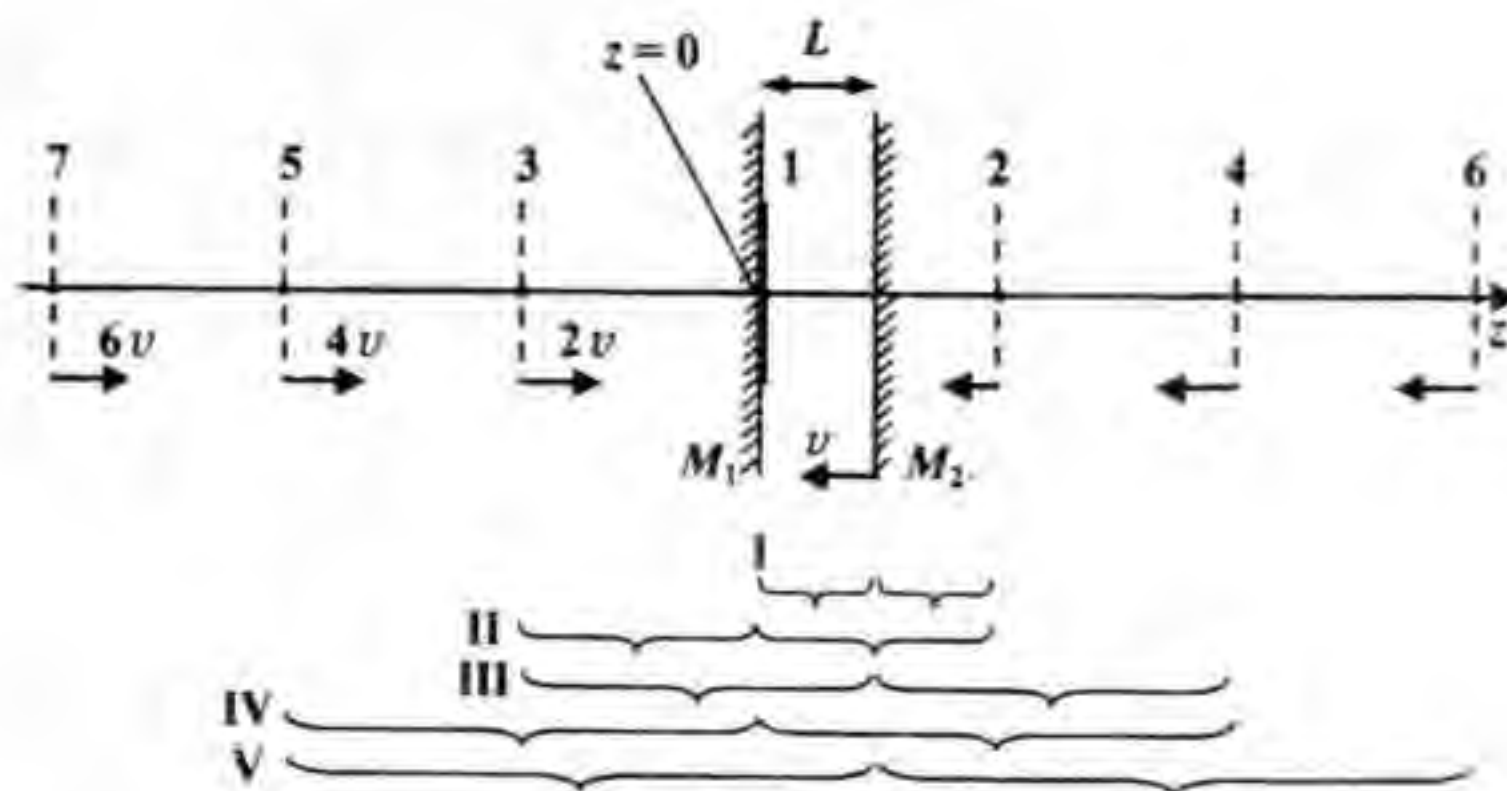


Рис. 2. Врахування ефекту Доплера у скануючому ІФП.

M_1 і M_2 – нерухоме та рухоме дзеркало відповідно, v – швидкість руху дзеркала, L відстань між дзеркалами, цифрами 2, 3...7 показано послідовні положення хвиль $U_2, U_3, \dots$; фігурними дужками (I - V) показано послідовність утворення уявних хвиль (2, 3...7).

1, 2, 3...7. Хвиля 2, наприклад, існує як відбиття хвилі 1 в дзеркалі M_2 , а хвиля 3 – як відбиття хвилі 2 в дзеркалі M_1 .

Вважаємо, що уявне джерело протягом часу t випромінює в напрямку осі z плоску електромагнітну (первинну) хвилю U_1 , амплітуда якої в площині I дорівнює U_0 , частота ω_0 , $k = 2\pi/\lambda$, λ – довжина хвилі:

$$U_1 = U_0 e^{i(\omega_0 t - kz)} \quad (1)$$

Щоразу після відбивання від рухомого дзеркала та подвійного проходу відстані між дзеркалами характеристики відповідної хвилі змінюються, причому врахувати ці зміни можливо двома способами.

При традиційному підході хвиля у положенні I ($z = 0$) має вигляд:

$$U_1 = U_0 e^{i\omega_0 t} \quad (2)$$

У наступних відповідних площинах (якщо швидкість дзеркала v , ρ – коефіцієнт відбивання для амплітуд) маємо:

$$U_3 = U_0 e^{i(\omega_0 t - kz_1)} \cdot \rho^2, \quad z_1 = 2L - 2vt = 2(L - vt);$$

$$U_5 = U_0 e^{i(\omega_0 t - kz_2)} \cdot \rho^4, \quad z_2 = 4L - 4vt = 2 \cdot 2(L - vt);$$

$$U_7 = U_0 e^{i(\omega_0 t - kz_3)} \cdot \rho^6, \quad z_3 = 6L - 6vt = 3 \cdot 2(L - vt)$$

$$U_{2n+1} = U_0 e^{i(\omega_0 t - kz_n)} \cdot \rho^{2n}, \quad z_n = n \cdot 2(L - vt); \quad (3)$$

Вираз для сумарної хвилі, що рухається зліва направо у порожнині між дзеркалами,

$$\begin{aligned} U_{sum} &= \sum_{n=0}^{\infty} U_{2n+1} = \\ &= U_0 e^{i\omega_0 t} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-ik \cdot n \cdot 2(L - vt)} \cdot \rho^{2n}, \end{aligned} \quad (4)$$

є геометричною прогресією, знаменник якої $q = e^{-ik \cdot 2(L-vt)} \cdot \rho^2$. Тому

$$U_{sum} = U_0 e^{i\omega_0 t} \frac{1}{1 - \rho^2 \cdot e^{-ik \cdot 2(L-vt)}}, \quad (5)$$

а результуюча інтенсивність хвилі

$$I = U_{sum} U_{sum}^* = U_0^2 \frac{1}{(1 - \rho^2)^2 + 4\rho^2 \sin^2(k \cdot (L - vt))}. \quad (6)$$

Максимальна інтенсивність спостерігається при виконанні умови ($m = 0, 1, 2, \dots$)

$$k(L - vt) = m\pi, \quad (7)$$

тобто, маємо однозначний зв'язок між довжиною хвилі і появою відповідного їй максимуму інтенсивності у певний момент часу.

Розглянемо інший підхід: кожна наступна хвиля відрізняється від попередньої [5,6], на однаковий частотний інтервал Ω . Хвиля у положенні 1 задана формулою (2), у наступних послідовних положеннях 3, 5, 7... хвилі описуються виразами:

$$\begin{aligned} U_3 &= U_1 \rho e^{i(\Omega t - kz)} = U_0 \rho^2 e^{i((\omega_0 + \Omega)t - k2L)}, \\ U_5 &= U_0 \rho^4 e^{i((\omega_0 + 2\Omega)t - k2 \cdot 2L)}, \dots \\ U_{2n+1} &= U_0 \rho^{2n} e^{i((\omega_0 + n\Omega)t - k2n \cdot 2L)}. \end{aligned} \quad (8)$$

Комплексні амплітуди хвиль (8) утворюють геометричну прогресію, знаменник якої

$$q = \rho^2 e^{i\varphi}, \quad \varphi = \Omega t - 2kL, \quad (9)$$

їхня сума визначається за формулою:

$$S = \sum_{n=1} U_{2n+1} = U_0 e^{i\omega_0 t} \frac{1}{1 - \rho^2 e^{i\varphi}}, \quad (10)$$

а інтенсивність $I(t)$ центральної моди інтерферометра – за формулою

$$I(t) = S \cdot S^* = U_0^2 \frac{1}{(1 - \rho^2)^2 + 4\rho^2 \sin^2(\varphi/2)}. \quad (11)$$

Величина φ є функцією часу, тому максимальна інтенсивність з'являється при умові

$$\Omega t - 2kL = 2m\pi. \quad (12)$$

Оскільки формули (7) і (12) описують одне і те ж явище, прирівнюючи почленно їхні ліві та праві

частини, отримуємо вираз для доплерівського зміщення частоти

$$\Omega_D = 2\pi\nu/\lambda, \quad (13)$$

де ν – швидкість руху дзеркала. Поява світла із довжиною хвилі λ_1 однозначно відбудеться у момент часу t_1 , а із λ_2 – відповідно у момент t_2 .

У реальних конструкціях скануючого ІФП еталон 3 (рис. 1) виготовлений із п'єзо-електричного матеріалу, затискається між дзеркалами 1 та 2, на нього подається пилкоподібна напруга розгортки осцилографа, завдяки чому товщина L періодично змінюється лінійно у часі з амплітудою 1–2 мкм. Цього досить для огляду спектру в області m -го порядку робочого інтервалу ІФП. Спектр можна спостерігати візуально у реальному часі, якщо сигнал ФЕП подати на вертикальні пластини того ж осцилографа, а при використанні комп'ютера можна представляти розвиток спектру в часі [7]. На рис. 3 наведено приклад такого дослідження за допомогою скануючого ІФП частот мод гелій-неонового лазера (без вікон Брюстера, база 24 см) одночасно в двох взаємно ортогональних поляризаціях П1 та П2. Реєстрування інтенсивності мод проводилось за допомогою двох ФЕП окремо у кожній з поляризацій. Положення мод у межах контуру підсилення лазера змінюється внаслідок теплового видовження резонатора. Показано результат послідовних сканувань тривалістю 1 сек кожне, повторюваних протягом 800 сек, ν – оптична частота (прозорості ІФП), вздовж вертикальної осі – сигнал ФЕП, для кожного лазера положення площин поляризацій П1 та П2 взаємно ортогональних мод – оригінальні. Цифрами позначено номер моди, яка генерується.

Подібний контроль за частотою лазера протягом тривалого часу дозволяє виявляти характер поведінки площини поляризації кожної з мод лазера у процесі проходження контуром підсилення. Наприклад, видно, як мода 2, пройшовши контуром підсилення, зникає на його низькочастотному краю, натомість на високочастотному краю виникає мода 4, проте, не дійшовши до низькочастотного краю, зникає у центрі контуру підсилення; одночасно виникає мода 4' у іншій поляризації. У той же момент мода 5

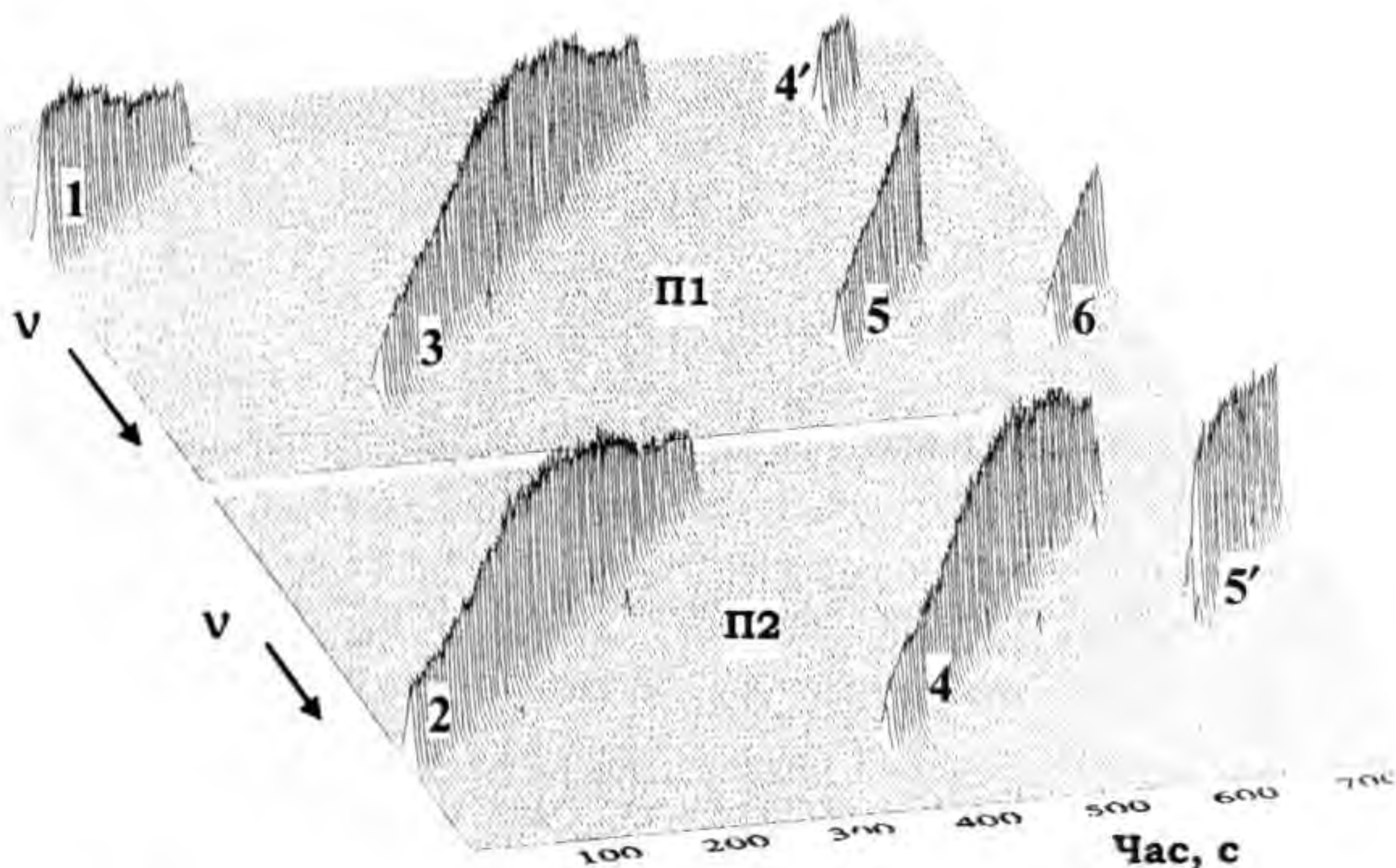


Рис. 3. Генерація двомодового гелій-неонового лазера. ν – частота прозорості ІФП, вздовж вертикальної осі – сигнал ФЕП. Парними та непарними цифрами позначено моди, які генеруються у відповідних ортогональних поляризаціях П1 та П2

також змінює площину поляризації на ортогональну. Повна вихідна енергія лазера при цьому майже не змінюється, видно, як вона перерозподіляється між модами. Отже, за досить складною динамікою генерації лазера можна прослідкувати, лише досліджуючи поведінку спектра.

Таким чином, врахування ефекту Допплера при поясненні роботи скануючого ІФП, на наш погляд, є фізично більш коректним порівняно з тим випадком, коли цей ефект не береться до уваги.

Список використаних джерел

1. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1973. – 719 с.
2. Жиглинский А.Г., Кучинский В.В. Реальный интерферометр Фабри-Перо. – Л.: Машиностроение. – 1983. – 176 с.
3. Шишловський А.А. Експериментальна оптика. – К.: Радянська школа, 1959. – 656 с.

4. Желтиков А.М. Сверхкороткие световые импульсы в полых волноводах//УФН, 2002, 172, № 7,–С. 744-775
5. Ринкевичус Б.С. Допплеровский метод измерения локальных скоростей с помощью лазеров// УФН, 1973, 111, № 2,–С. 305-330
6. Дубнищев Ю.Н., Павлов В.А. Фотодинамические эффекты в лазерной доплеровской анемометрии//Письма в ЖТФ.-1998.-Т.24, №17.-С.53-55.
7. Конончук Г.Л., Стукаленко В.В. Спектрально-поляризационная поведінка ортогонально поляризованих мод у He-Ne-лазері//УФЖ.-2003.-Т.48, №5.-С.417-423.

Надійшла до редколегії 15.12.09

УДК 537.32

Копань В.С., д.ф.-м. н., проф.
Хуторянська Н.В. пров. інж.
Копань Ю.В., пров. інж.

Термоелектричний адсорбційний ефект в порошку активованого вугілля

Виміряна різниця між термо-е.р.с. E_T сухого порошку активованого вугілля «Sorbex» і порошку після адсорбції ним різних рідин. Знайдено, що $E_T < 0$, і після часу адсорбції $t=1500$ хв 1% об.рідини $E_T=0,3-0,4-0,6-0,8-1,4$ мкВ/К для еталону, уайт-спірту, H_2O , $H_2O+3\% H_2O_2$, $H_2+9\%$, CH_3COOH , відповідно.

Термоелектричний адсорбційний ефект виникає завдяки тунелюванню зарядів через щілини між частинками порошку.

Ключові слова: термоелектрорушійна сила, адсорбція, активоване вугілля.

E-mail: @pulsary.com.ua

Вступ.

Адсорбція газів і рідин пористими матеріалами і плівками спричинює зміну їх багатьох властивостей, зокрема, електроопору. Це явище використовують поряд з іншими в аналізаторах газів і рідин [1]. Насипні порошки для цих цілей малопридатні, бо їх електроопір змінюється в результаті вібрацій, наприклад, під дією звуку. Тому використовують спечені порошки або композиції [7]. Але в них питома адсорбуюча поверхня менша, ніж в насипних порошках. Крім того, збільшений період циклу адсорбція – десорбція, що ускладнює швидкісний аналіз середовища на домішки. Термо-е.р.с. менш чутлива до вібрацій у порівнянні з електроопором, бо вібрації діють одночасно на обидві близько розташовані вітки термопар, відбувається взаємна компенсація коливань термострумів, якщо вітки виготовлені з однакових порошків.

Нам невідомі літературні джерела, в яких би повідомлялось про термоелектричний адсорбційний ефект (ТЕАЕ) у вуглецевих матеріалах, хоча вони широко використовуються як адсорбенти.

Мета роботи – вивчення природи термо-е.р.с., що виникає в порошку активованого вугілля при адсорбції різних рідин.

V.S. Kopan', Dr of Sci, Prof.
N.V. Hutoryanska, eng.
U.V. Kopan', eng.

Thermoelectric adsorption effect in powder of active carbon

The difference between the thermoelectric power (TEP) E_T of the dry carbon active powder "Sorbex" and of this powder after adsorption of different liquids was measured. The TEP $E_T < 0$, and after $t=1500$ min of adsorption 1% vol. liquid

$E_T=0,3-0,4-0,6-0,8-1,4$ $\mu V/K$ for alcohol, witespirit, H_2O , $H_2O+3\% H_2O_2$, $H_2+9\%$, CH_3COOH , accordingly.

The thermoelectric adsorption effect is owing to charges tunneling through chinks between particles of powder.

Key Words: Thermoelectric powder, adsorption, active carbon.

Методика експерименту

Схема пристрою для вивчення ТЕАЕ у порошках наведена на рис.1.

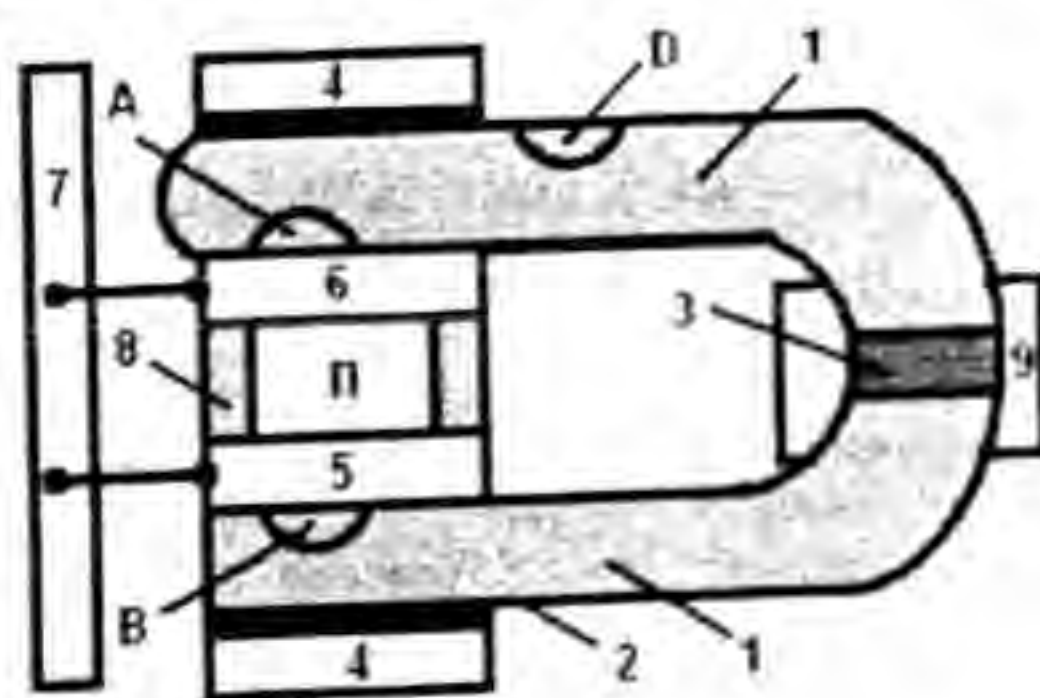


Рис. 1. Схема пристрою для вивчення термоелектричного адсорбційного ефекту в порошках.

Досліджувався порошок – адсорбент типу «Sorbex», що складається з гранул розміром 0,2-0,6 мм. Самі гранули містять нанокристаліти, розділені аморфними границями. Його склад і технологія виготовлення контролюються, бо він використовується для медичних цілей. Термо-е.р.с. порошку відносно високочистого (99,994%)

Представлено: член-кор. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

полікристалічного графіту мала (5 мкВ/К), що вказує на достатню для нашої мети його чистоту.

Порошок 1 засипали в еластичну пластмасову тонкостінну трубку («кембрик») 2 (до густини $0,012 \text{ г/см}^3$), зігнуту у вигляді літери V, порожнина якої посередині розділена графітовою пластиною 3. Кінці трубки 2 заварювали і притискали пружиною 4 до холодних мідних клем 5 і 6, що присдані до потенціометра 7 (ціна поділки 10^{-8} В , вхідний опір 20 Ом). Клеми 5, 6 ізольовані одна від одної гумовою маслостійкою прокладкою 8. У порожнині П між ними циркулює від термостату трансформаторне масло з температурою $T_{\text{ж}} = 20 \pm 0,1^\circ \text{C}$. Електроконтакт порошку з клемми здійснюється через отвори навколо точок А і В в трубці 2. Різниця температур між точками А і В $\Delta T \sim 0,0001^\circ \text{C}$. Цим виключаються паразитні термо-е.р.с. в контактах вугілля – мідь [5]. Згин трубки 2 поміщено у нагрівник 9 з температурою $T_{\text{г}} = 64 \pm 0,05^\circ \text{C}$. Довжина ділянок порошку, в яких створювався градієнт температури, становила 13-15 мм.

Спочатку вимірювали термо-е.р.с. $E_{\text{с}}$ сухого порошку, що генерувалась внаслідок випадкових термоелектричних відмінностей між вітками термопари. Потім в отвір D закапували у потрібній кількості вибрану рідину і вимірювали часову залежність термо-е.р.с. $E_{\text{T}}(t)$. На рис. 2-4. наведено $E_{\text{T}} = E_{\text{T}}(t) - E_{\text{с}}$, тобто, приріст термо-е.р.с., обумовлений адсорбцією рідини. При заміні рідини щоразу засипався у трубку 2 свіжий порошок.

Експериментальні результати та їх обговорення

Результати вимірів наведені на рис. 2-4. Відмічаємо наступні закономірності.

1. У перші хвилини адсорбції етанолу (рис.2), розчину оцту (рис.3в) і уайт-спіриту (рис.4) E_{T} зростає, потім плавно зменшується. Адсорбція води (рис. 3а) і розчину перекису водню (рис. 3а, 3б) призводить до спаду E_{T} в перші хвилини, після якого настає короткочасне зростання E_{T} і довготривалий спад.

2. В усіх випадках рідина поступово дифундує по всій вітці порошкової термопари і не реадсорбується через отвір D (рис. 1). На рис. 2-4 наведені експериментальні дані для $t \sim 50$ хв. Після $t \approx 1500$ хв. E_{T} досягає максимального від'ємного значення $E_{\text{T}} = 0,3-0,4-0,6-0,8-1,4$ мкВ/К для етанолу, уайт-спіриту, води, перекису водню і водного розчину оцтової кислоти відповідно. Усі рідини, окрім етанолу, додавались через отвір D

(рис.1) так, щоб концентрація становила у свіжому порошку 1% об. Етанол додавався по черзі після виміру чергового циклу адсорбції. Тому концентрація етанолу в порошку наростала від 1% об. до 6% об. При цьому поступове збільшення E_{T} у від'ємну сторону протягом $t = 50$ хв. (рис.2, світлі точки на графіку) описується приблизно лінійною залежністю від t . Це означає, що етанол, як і інші досліджувані рідини, не реадсорбується при $T \sim 40^\circ \text{C}$ через отвір D (рис. 1) з порошку. Якби активоване вугілля при $T \sim 40^\circ \text{C}$ починало реадсорбувати поглинуті ним отрути в кишкового хворого, наприклад, то воно б не використовувалось у медицині.

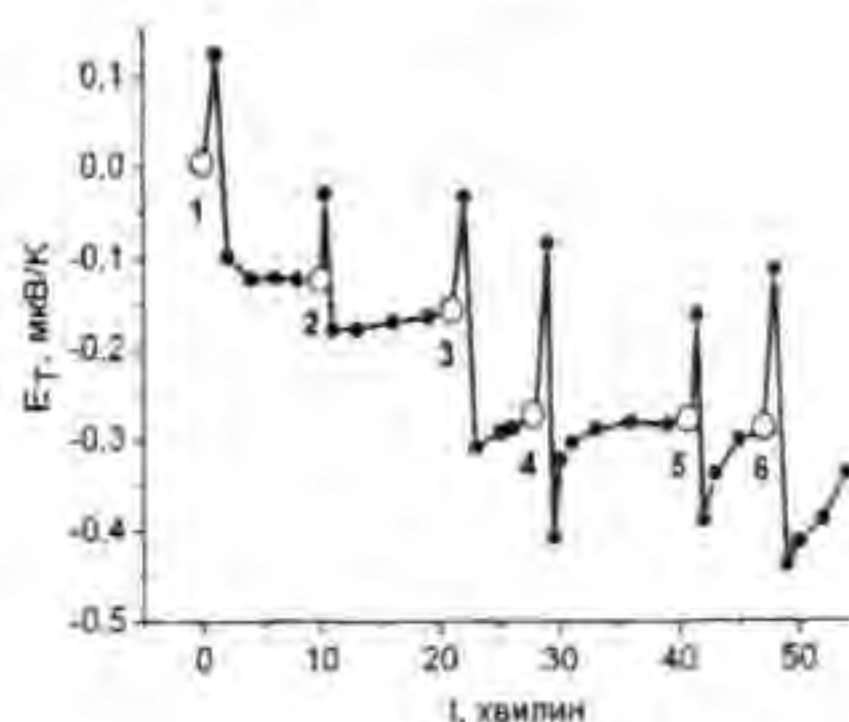


Рис.2. Залежність від часу приросту (внаслідок адсорбції етилового спирту) термо-е.р.с. E_{T} порошку активованого вугілля. Світлими точками вказано на початок чергового циклу адсорбції, коли в порошок додається 1% об. рідини.

Вода і водні розчини H_2O_2 та CH_3COOH є слабкими електролітами. Відомо, що електроліти не генерують термо-е.р.с. Вони дають електрохімічну е.р.с., коли заповнюють проміжок між хімічно неоднаковими частинками речовини. В наших експериментах при нульовому градієнті температур електрохімічні е.р.с. не відчувались потенціометром. Уайт-спірит не є електролітом, але спричиняє генерування E_{T} . Тому можна вважати, що E_{T} виникає внаслідок адсорбції.

Наявність термоелектричного адсорбційного ефекту у порошках можна пояснити наступним чином.

Термо-е.р.с. вуглецевих спечених матеріалів при $T > 100 \text{ K}$ обумовлена в кристалітах дифузією носіїв зарядів з гарячої області в холодну (як у металах) і їх дифузією по стрибковому механізму в аморфних ділянках [6].

В насипних порошках електропровідні частинки порошку розділені газом і

адсорбованими молекулами. Тому дифузії зарядів перешкоджають ці потенціальні бар'єри.

потенціальна енергія U_3 , з меншою густиною потоку I_3 . Тоді, згідно [3],

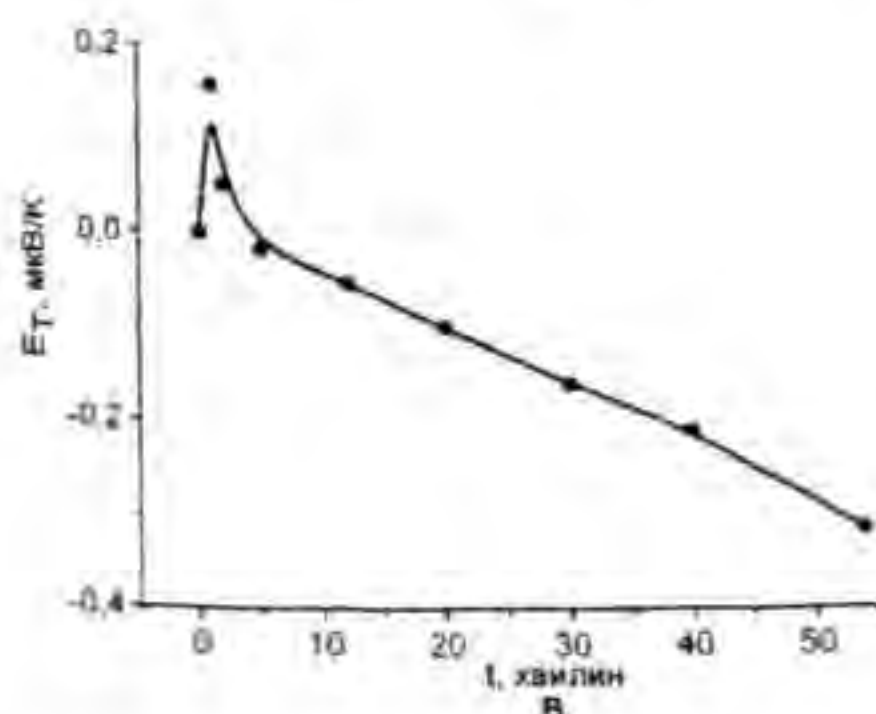
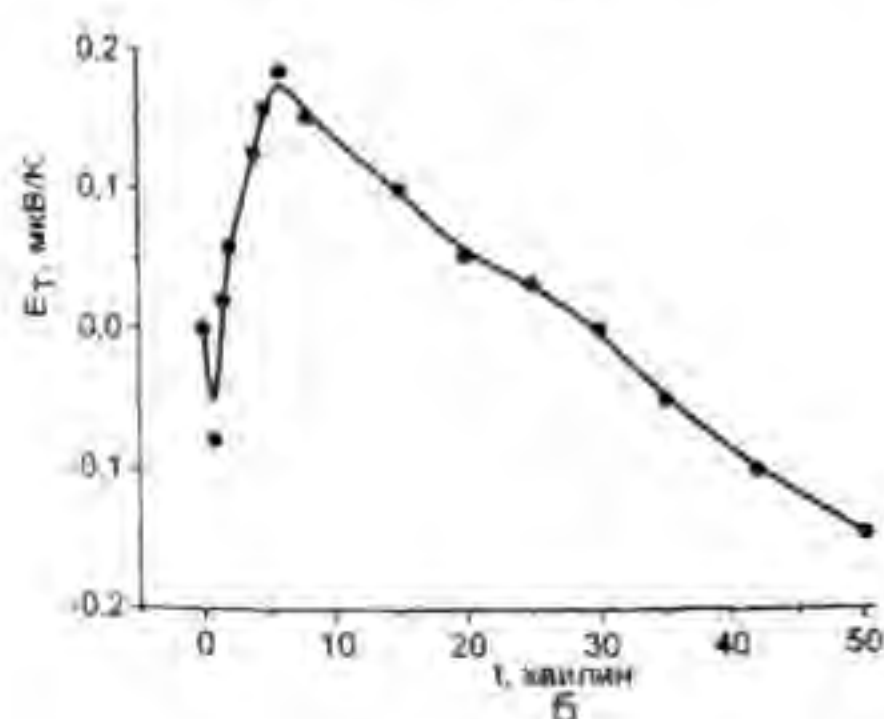
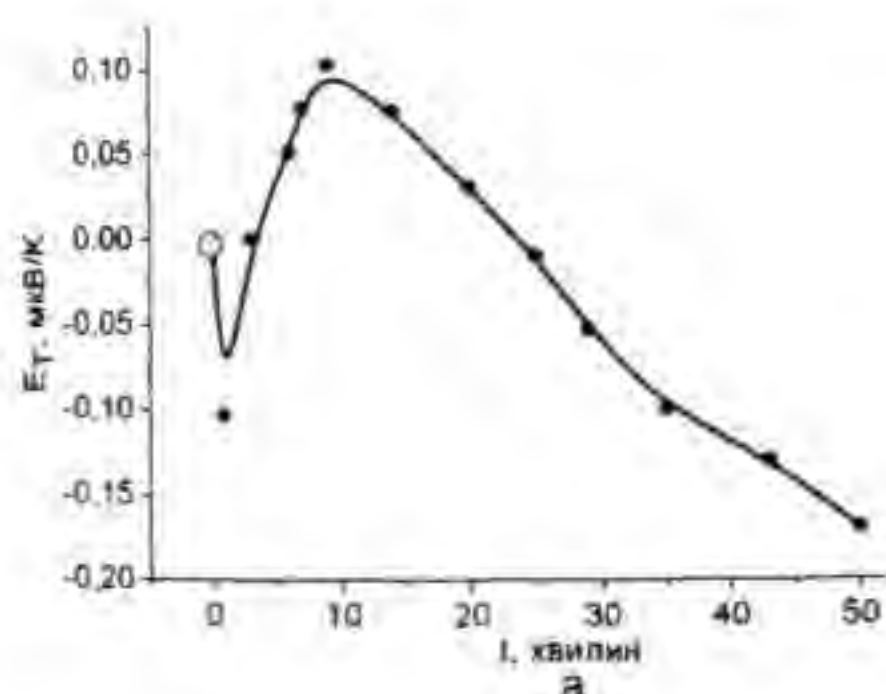


Рис.3. $E_T(t)$, обумовлена адсорбцією порошком 1% об. дистильованої води (а), 1% об. водного розчину (3%) H_2O_2 (б) та 1% об. водного розчину (9%) оцтової кислоти (в).

Проходження струму через структуру метал-діелектрик-метал вперше розглянуто в роботі [2] за допомогою моделі тунелювання зарядів через діелектрик. Використаємо для нашого випадку елементарну теорію тунелювання [3]. Нехай електрони, що мають кінетичну енергію E , потенціальну енергію $U_1=0$ і масу m з частинки порошку 1 налітають з густиною потоку I_1 на потенціальний бар'єр $U_2 > E$ шириною ω і тунелюють в холоднішу сусідню частинку 2, де

$$\frac{J_3}{J_1} = \frac{16K_1K_3\gamma^2}{(K_1^2 + \gamma^2)(K_3^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma\omega), \quad (1)$$

$$\text{де} \quad K_1 = \frac{1}{\hbar} (2mE)^{1/2}, \quad (2)$$

$$K_3 = \frac{1}{\hbar} [2m(E - U_3)]^{1/2} \quad (3)$$

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} [2m(U_2 - E)]^{1/2}. \quad (4)$$

До зразка не прикладається стороння електронапруга, а контактна різниця потенціалів – нульова, бо частинки однакові. Тому $U_1 = U_3 = 0$. При контакті двох металевих частинок $U_2 \sim 0,5-1$ еВ [3]. В порошок, що знаходиться в околі точки D (рис.1), $T=313$ К. Тому $E \approx kT = 0,024$ еВ. Отже, $U_2 > E$. Тому (4) можна переписати:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} [2m(U_2)]^{1/2}. \quad (5)$$

Підставивши (2), (3), (5) в (1), одержимо (6):

$$\frac{I_3}{I_1} = 16 \frac{E}{U_2} \exp(-2\gamma\omega). \quad (6)$$

Аби нашим приладом можна було вимірювати термострум, необхідно, щоб $I_3/I_1 \approx 10^{-7}$. Тоді, підставивши в (5) і (6) $\hbar, m, E, U_2$, одержимо

$$\omega \leq \frac{1}{2\gamma} \ln 3,3 \cdot 10^5 \leq 0,9 \text{ нм}. \quad (7)$$

Зрозуміло, що в насипному порошок є будь-які значення ω . Але здатні забезпечити вимірюваний термострум, як видно з наведеного розрахунку, $\omega \sim 0,9$ нм. Ширину бар'єру ω і його висоту можна зменшити, стискаючи порошок. Тоді зменшиться $\gamma\omega$, і зросте згідно (6), I_3/I_1 . До стискання порошки в обох вітках термоструми були, в ідеалі, однаковими, бо вітки не відрізнялись одна від одної. Тому при $t=0$ $E_T=0$, а при стисканні до $\varepsilon \sim 20\%$ E_T наростає (рис.5). На початкових етапах адсорбції (рис.2-4) E_T також зростає з часом. Це означає, що $\gamma\omega$

також зменшується. Подальше довготривале зменшення E_T у від'ємну сторону зобумовлене дифузією молекул рідини на всю довжину робочої вітки, внаслідок чого зменшується концентрація рідини.

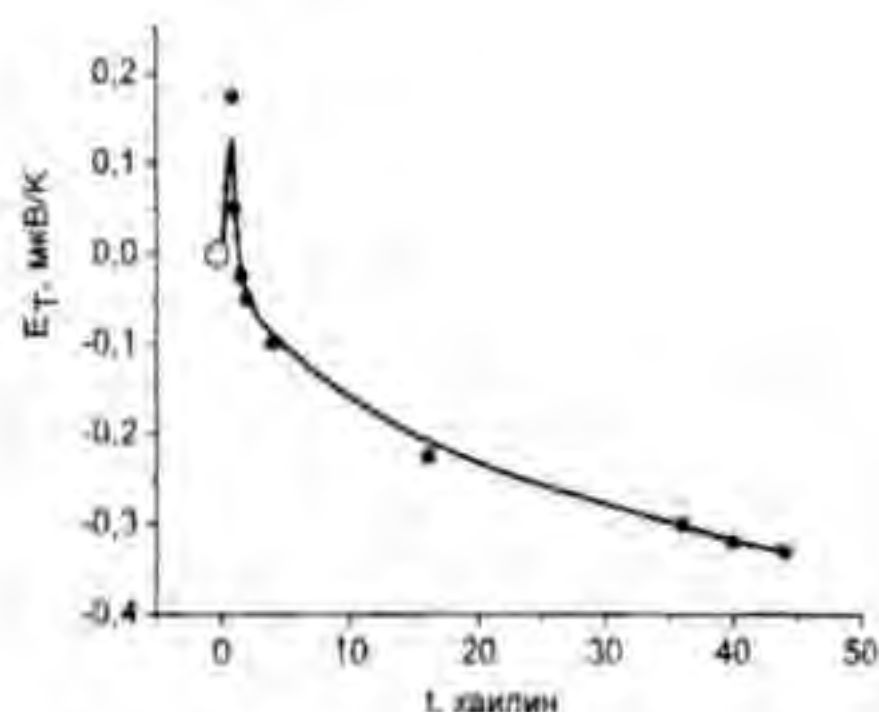


Рис.4. $E_T(t)$, обумовлена адсорбцією порошком 1% об. уайт-спіріту.

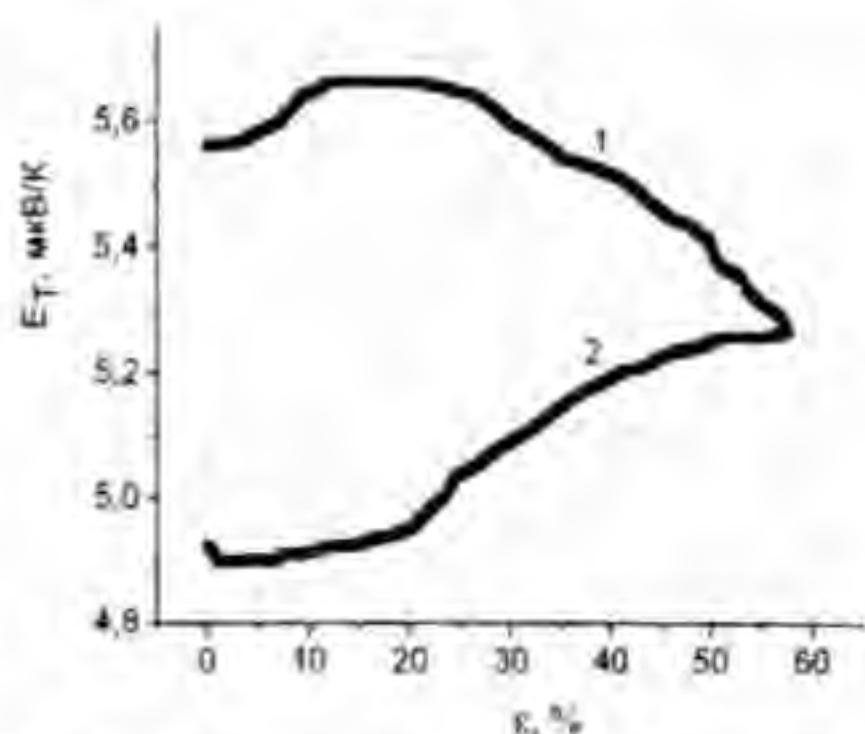


Рис.5. Залежність термо-е.р.с. E_T від деформації стискання ε порошку з активованого вугілля: 1 – вітка стискання, 2 – розвантаження.

Характерно, що $E_T < 0$ і при розвантаженні робочої вітки (рис.5). Це говорить про зростання u_0 як при розвантаженні порошку, так і внаслідок дифузії адсорбованої рідини.

Відомо [8, 4], що деформація металів сама по собі, без адсорбції домішок, змінює термо-е.р.с. Частинки активованого вугілля надзвичайно деформовані в процесі їх виготовлення. Вони містять нанокристаліти, вкраплені в аморфні ділянки. В нанокристалітах багато дефектів кристалічної будови. Ця нерівноважна за структурою суміш адсорбує рідини по складним механізмам, які на даному початковому етапі досліджень термоелектричного адсорбційного ефекту конкретизувати важко.

Висновки

1. В термопарі, обидві вітки якої виготовлені з насипного порошку активованого вугілля, генерується термо-е.р.с. $E_T(t)$, якщо в одній вітці відбувається адсорбція. Так виникає термоелектричний адсорбційний ефект (ТЕАЕ).

2. Після адсорбції протягом $t=1500$ E_T досягає максимального від'ємного значення $E_T=0,3-0,4-0,6-0,8-1,4$ мкВ/К для етанолу, уайт-спіріту, води, перекису водню і водного розчину оцтової кислоти, відповідно.

3. ТЕАЕ обумовлений зміною внаслідок адсорбції висоти внаслідок асорбції та ширини потенціального бар'єру між частинками порошку, крізь який тунелює терmostрум.

Список використаних джерел

1. Адсорбция из растворов на поверхностях твердых тел. Под. ред. Парфитта Г.Д. М.: Мир. 1986. 280 с.
2. Бете Г., Зоммерфельд А. Электронная теория металлов // М.-Л: ОНТИ: 1938.-380 с.
3. Л.Солитар. Туннельный эффект в сверхпроводниках и его применение.- М.: Мир, 1974. - 428 с.
4. А.А.Лухвич. Влияние дефектов на электрические свойства металлов.- Минск: Наука и техника, 1976. - 102 с.
5. Борисенко В.Д., Копань В.С., Бессонов В.Б. Термоэлектрическое устройство для контроля неоднородности материалов // Авт. св. СССР №750357. Бюллетень изобретений.- 1980.-№27.
6. Мацуї Л.Ю. Структура та електрофізичні властивості вуглеграфітових матеріалів і інтеркальованих сполук на їх основі. Автореферат доктор. дисертації (Київ: Київський національний університет імені Тараса Шевченка: 2005. - 40 с.
7. Семко Л.С., Кручек Е.И., Горбик П.П., Шевляков Ю.А. Влияние магнитного поля на сенсорные характеристики композиционных материалов на основе нанокристаллического никеля // Химия, физика и технология поверхности. - 2008.- вып.14.- С.398-406.
8. Герцриген С.Д., Новиков Н.Н., Копань В.С. О природе термо-э.д.с., возникающей в результате деформирования металла // Укр. физич. журнал. -1959.- 4, №3 - С.293-299.

Надійшла до редколегії 24.03.2010.

УДК 621.315.59

Мельниченко М.М., к.ф.-м.н., Лученко А.І.,
м.н.с., Кулик С.П., к.ф.-м.н., Свеженцова К.В.,
к.ф.-м.н.

Скануюча тунельна спектроскопія плівок наноструктурованого кремнію.

Методом скануючої тунельної спектроскопії на повітрі досліджена щільність електронних станів на поверхні наноструктурованого кремнію в залежності від товщини наноструктурованої плівки. Товщина плівки наноструктурованого кремнію визначалася методом електронної Оже спектроскопії і в залежності від параметрів технологічного процесу хімічної модифікації поверхні монокристалічного кремнію змінювалася від 3 нм до 60 нм. Локальна щільність електронних станів визначалася як нормована диференціальна тунельна провідність $(dI/dU)/(I/U)$. Вперше показано, що в процесі росту плівки наноструктурованого кремнію спектр електронних станів істотно змінюється. При цьому відбуваються немономоні зміни, як типу провідності, так і ширини забороненої зони в залежності від товщини досліджуваної наноструктурованої плівки та параметрів процесу їх формування.

Ключові слова: монокристалічний кремній,
наноструктурований кремній, скануюча
тунельна спектроскопія.

*E-mail: realcrystallab@univ.kiev.ua

Розвиток нанотехнологій стимулює величезний інтерес до вивчення наноструктурованих матеріалів, завдяки їх унікальним фізико-хімічним властивостям. Так при формуванні наноструктурованого кремнію на підкладках монокристалічного кремнію відбувається зміна не тільки структурних властивостей, що приводить до зміни ширини забороненої зони і появи квантово-розмірних ефектів, але й утворення на поверхні нових сполук кремнію з підвищеним вмістом водню й аморфного кремнію. В останні роки величезна увага була приділена дослідженню фотолюмінісцентних та електролюмінісцентних властивостей наноструктурованого кремнію, що обумовлено перспективою створення світло випромінюючих приладів, інтегрованих на єдиній кремнієвій пластині, а також

M. M. Melnichenko, Ph.D., A.I. Luchenko, j.
researcher, S.P. Kulik, Ph.D., K.V. Svezhentsova,
Ph.D.

Scanning tunnel spectroscopy of nanostructured silicon layers.

Research of local density of electronic conditions in the layers of nanostructured silicon depending on thickness of investigated layers has been carried out using a method of scanning tunnel spectroscopy on air. Thickness of nanostructured silicon layer was defined by means of Auger electronic spectroscopy and was changing from 3nm up to 60nm depending on parameters of technological process during chemical modification of single-crystal silicon surface. The local density of electronic conditions was defined as normalized differential tunnel conductivity $(dI/dU) / (I/U)$. For the first time it was shown, that during growth of a nanostructured layer of silicon the spectrum of electronic conditions essentially changes. At the same time there were nonmonotonic changes, both in type of conductivity, and in width of the forbidden zone depending on the thickness and parameters of growth of an investigated layer.

Key Words: single-crystal silicon,
nanostructured silicon, scanning tunnel
spectroscopy.

використанню цих матеріалів у біо та газових сенсорах [1-5]. Особливий інтерес з погляду практичного використання плівок наноструктурованого кремнію в мікро електроніці має питання про спектр електронних станів як про просторово змінну характеристику, що дотепер у літературі не розглядався. Відомо, що експериментально інформація про локальну щільність станів поблизу рівня Фермі може бути отримана за допомогою скануючої тунельної спектроскопії. У цьому методі зондується щільність як заповнених, так і вільних станів (валентна зона і зона провідності), і може бути визначена ширина забороненої зони [6].

Задача даної роботи полягала у використанні скануючої тунельної спектроскопії на повітрі для виміру локальної щільності станів у плівках

наноструктурованого кремнію і визначення, у якому ступені локальна щільність станів змінюється в залежності від параметрів процесу формування наноструктурованого кремнію, а також від товщини досліджуваних плівок.

Зразки і методи вимірів

Плівки наноструктурованого кремнію одержували методом хімічного травлення (stain etching) на підкладках монокристалічного кремнію (100) орієнтації, р-типа провідності з питомим опором 1 Ом·см. Хімічне травлення здійснювалося в розчині плавикової й азотної кислот при кімнатній температурі. Час травлення змінювався від 1 до 20 хвилин.

Елементний склад поверхні наноструктурованого кремнію вивчався методом електронної Оже спектроскопії (ОЕС). Для вивчення розподілу елементів по глибині наноструктурованого кремнію поверхня досліджуваних зразків піддавалася іонному травленню зі швидкістю 30 ангстрем за хвилину.

Тунельні вольт-амперні характеристики вимірялися на повітрі за допомогою скануючого тунельного мікроскопа в інтервалі напруги зсуву між зондом і зразком від -8 до +8В, при цьому позитивні напруги відповідали позитивному потенціалові на зразку. Як зонд використовувалося платинове вістря. Виміри проводилися при постійному зазорі. Здійснювалися багаторазові виміри вольт-амперних характеристик у кожній точці на різних ділянках поверхні плівки. Усереднені по 50 вимірам вольт-амперні характеристики додатково згладжувалися з використанням Фур'є фільтра, і розраховувалися нормована диференціальна провідність $(dI/dU)/(I/U)$. Згідно [6], залежність $(dI/dU)/(I/U)$ від напруги зсуву відбиває розподіл щільності електронних станів по енергії $E = eV$ (e -заряд електрона), при цьому $U = 0$ відповідає рівневі Фермі (E_F), негативні зсуви відповідають заповненим станам ($E < E_F$), позитивні зсуви відповідають вільним станам ($E > E_F$).

Результати та їх обговорення

Для вивчення розподілу локальної щільності електронних станів на поверхні наноструктурованого кремнію використовувалися зразки з різною товщиною шару наноструктурованого кремнію від 3 нм до 60 нм.

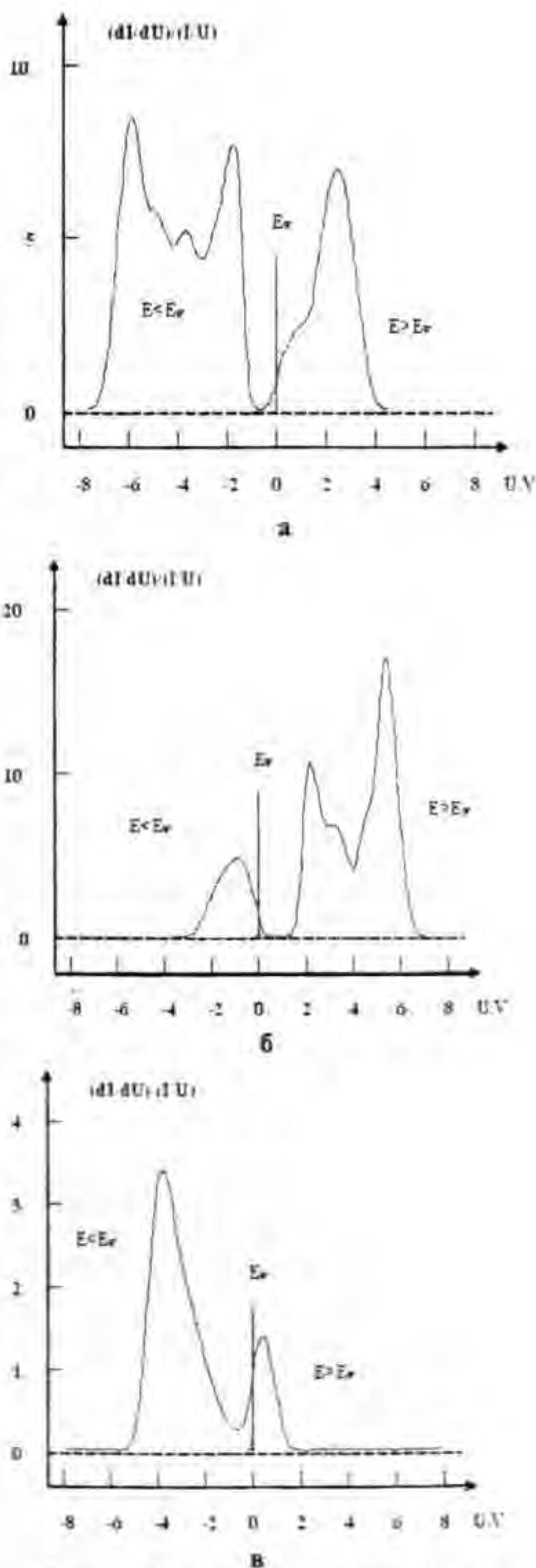
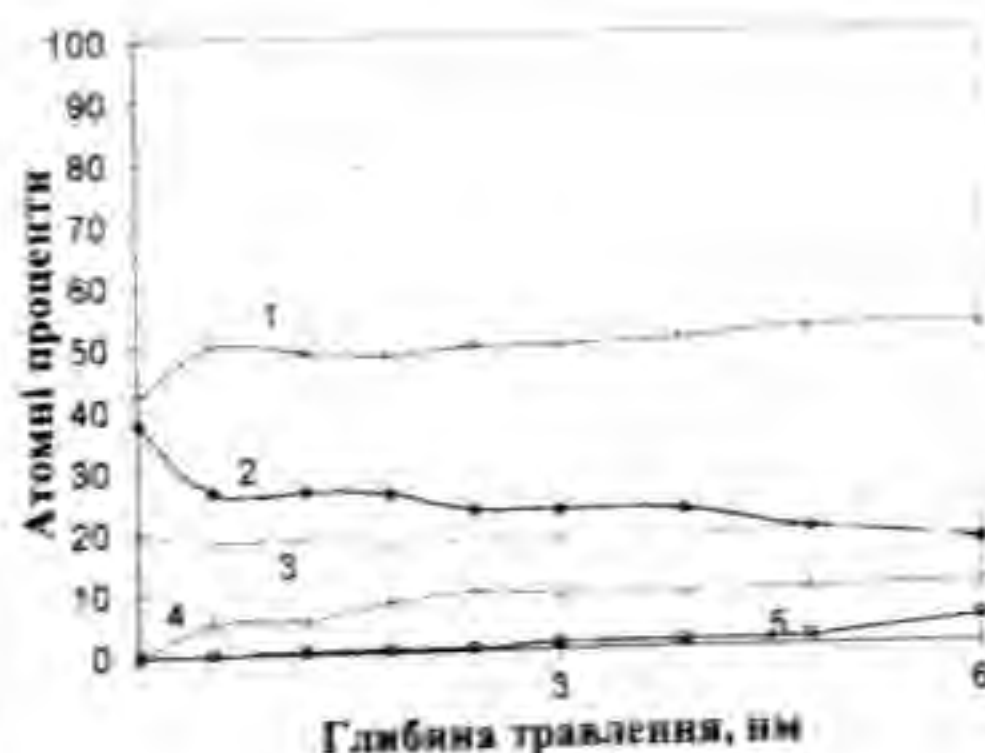


Рис.1. Характерні залежності величини нормованої диференціальної провідності $(dI/dU)/(I/U)$ від напруги зсуву U для плівок наноструктурованого кремнію різної товщини (а-3 нм, б-9 нм, в-60 нм).

Отримані вольт-амперні характеристики показали, що зміна вольт-амперної характеристики в залежності від товщини шару наноструктурованого кремнію носить не лінійний характер. Характерні залежності величини нормованої диференціальної провідності $(dI/dU)/(I/U)$ від напруги зсуву U для плівок наноструктурованого кремнію приведені на рис.1.

Як видно з рис.1 чітко спостерігається край заповнених станів і край вільних станів (умовно валентної зони і зони провідності). Якщо провести апроксимуючі прямі праворуч і ліворуч від рівня Фермі, то вони будуть мати той самий нахил. Останнє вказує на те, що розподіл електронних станів по енергії при $E < E_F$ і $E > E_F$ має однаковий характер. При цьому також спостерігається зсув рівня Фермі (E_F) щодо країв зон. Так для кривої рис.1а рівень Фермі зміщений до краю валентної зони, а для кривої мал.1б до краю зони провідності. Таким чином, спектр електронних станів для наноструктурованих шарів різної товщини змінюється істотно. Як видно з рис.1а,в перетинання умовної апроксимуючої прямої з лінією $(dI/dU)/(I/U) = 0$ для даних кривих дає близькі значення напруги відсічення, біля -1 В. Це означає, що спостерігається явна тенденція до стійкого розташування рівня Фермі на енергії ~ 1 еВ вище краю валентної зони. У той же час в області позитивних зсувів ($E > E_F$) на кривій рис.1б також спостерігається різка зміна величини $(dI/dU)/(I/U)$, яку можна ідентифікувати з краєм зони провідності. Перетинання з лінією $(dI/dU)/(I/U) = 0$ для цієї кривої дає близьке значення напруги відсічення, біля $+1$ В. При цьому рівень Фермі для наноструктурованих шарів кремнію виявився трохи ближче до валентної зони, ніж до зони провідності, що вказує про деяку перевагу р-типу провідності в шарах наноструктурованого кремнію (рис.1б). У той же час для наноструктурованих шарів кремнію іншої товщини рівень Фермі розташований трохи ближче до зони провідності, ніж до валентної зони (рис.1а,в), що свідчить про деяку перевагу n-типу провідності. Отже спостерігається явна тенденція зміни типу провідності при формуванні наноструктурованого шару кремнію в залежності від його товщини. Спочатку спостерігається n-типу провідність. Потім починаючи з товщини наноструктурованого шару ~ 9 нм спостерігається р-типу провідність. Надалі при товщині починаючи з 18 нм спостерігається знову n-типу провідність.

Використовуючи метод електронної Оже спектроскопії, у даній роботі, був вивчений хімічний склад отриманої наноструктурованої поверхні в залежності від параметрів формування. Основними елементами досліджених модифікованих поверхонь є кисень, вуглець, кремній, діоксид кремнію і SiO_x . За допомогою пошарового іонного травлення було проведено вивчення розподілу зазначених елементів по глибині наноструктурованих плівок кремнію (рис.2). Як видно з рисунка на поверхні спостерігається значна атомна концентрація кисню і вуглецю, а кремній знаходиться в комплексах діоксид кремнію та SiO_x . Слід зазначити, що на поверхні наноструктурованої плівки кремнію в залежності від параметрів формування спостерігається різне концентраційне співвідношення досліджуваних елементів (рис.2). Після травлення поверхні досліджуваних зразків в глибину 30 ангстрем, як спостерігається на рис.2, різниця між концентрацією досліджуваних елементів та їх комплексів практично стає несуттєвою. Отримані вольт-амперні характеристики показали, що зміна вольт-амперної характеристики в залежності від параметрів режиму формування наноструктурованого кремнію носить істотну відмінність друг від друга. Характерні залежності величини нормованої диференціальної провідності $(dI/dU)/(I/U)$ від напруги зсуву U для плівок наноструктурованого кремнію отриманих при різних параметрах формування приведені на рис.3. Як видно з рис.3 у залежності від параметрів формування наноструктурованих плівок спостерігається не тільки різний ступінь заповнення валентної зони і зони провідності, але і значна відмінність у ширині забороненої зони. Останнє можливо пояснити наявністю на поверхні більшої кількості діоксида кремнію і меншою кількістю SiO_x .



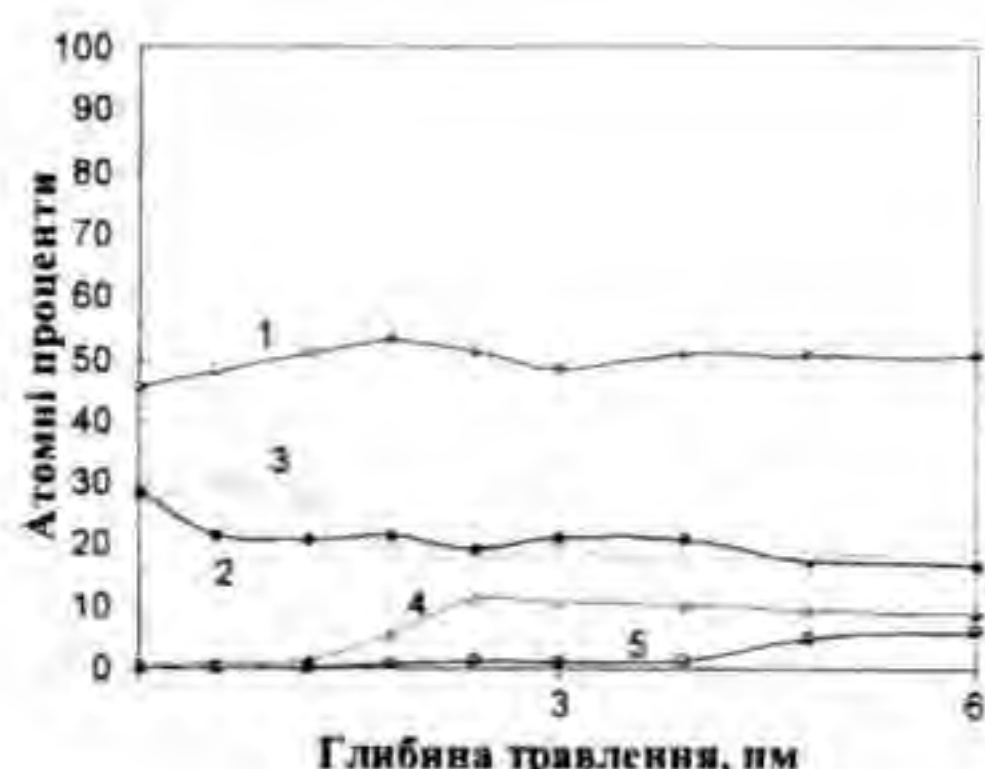


Рис.3. Концентраційні профілі елементного складу по глибині наноструктурованої поверхні в залежності від параметрів формування (1- O, 2- C, 3- SiO_2 , 4- SiO_x , 5- Si).

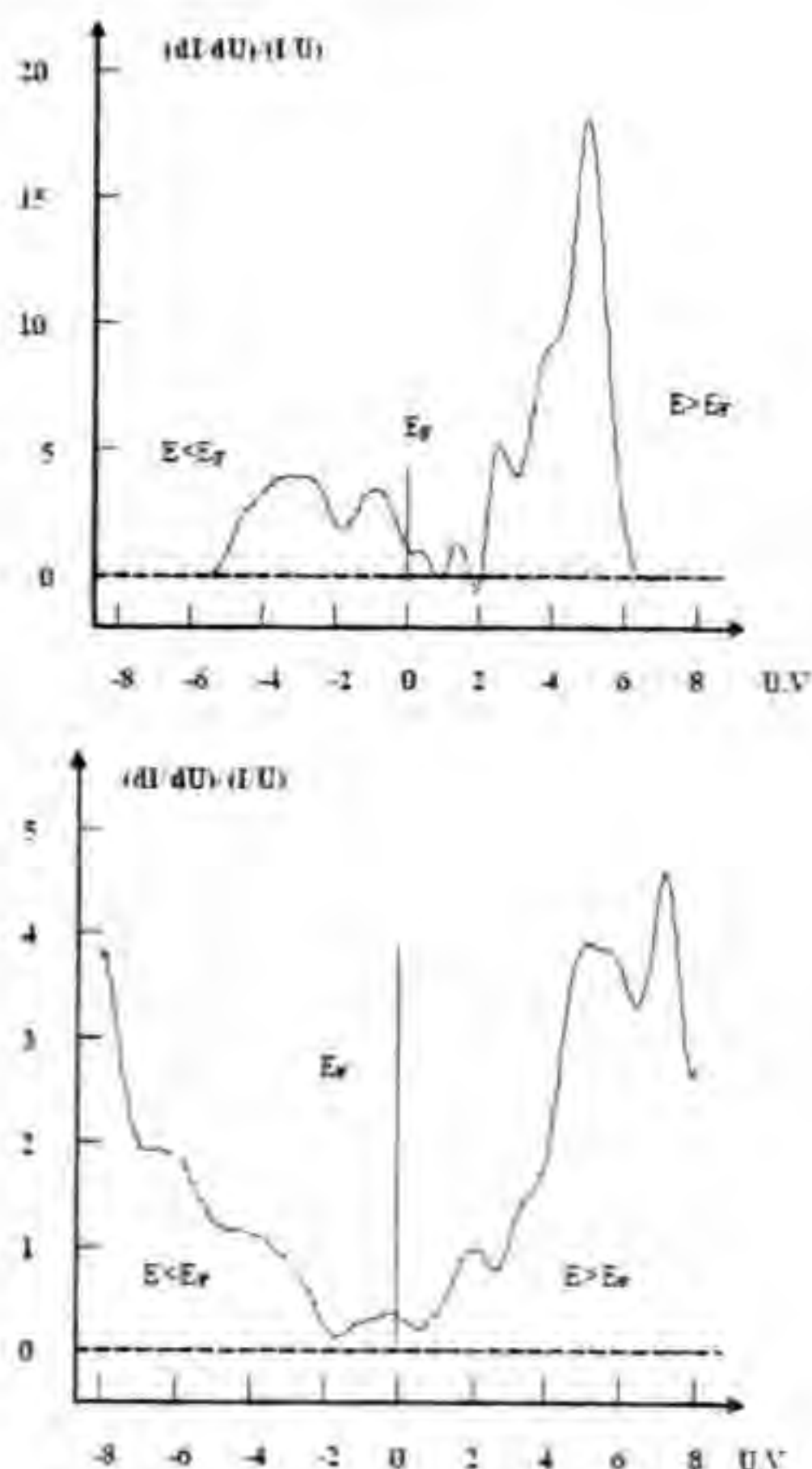


Рис.4. Характерні залежності величини нормованої диференціальної провідності $(dI/dU)/(I/U)$ від напруги зсуву U для плівок наноструктурованого кремнію в залежності від параметрів формування.

Таким чином застосування методу скануючої тунельної спектроскопії для дослідження шарів наноструктурованого кремнію показало, що у вимірах локальної щільності електронних станів вони виявляють себе як однорідні плівки. Спостерігається зміна типу провідності сформованих шарів наноструктурованого кремнію в залежності від їхньої товщини. Установлено, що в залежності від параметрів формування наноструктурованих плівок спостерігається різний концентраційний розподіл елементів і їхніх сполук. При цьому спостерігається не тільки різний ступінь заповнення валентної зони і зони провідності, але і значна відмінність у ширині забороненої зони.

Список використаних джерел

1. C. Baratto, G. Faglia, G. Sherverglieri, Z. Gaburro, L. Panchri, C. Oton, L. Pavesi, Multiparametric Porous Silicon Sensors// Sensors, Vol. 2, 121 (2002)
2. C.A. Betty, R. Lal, D.K. Sharma, J.V. Yakhmi, J.P. Mittal, Macroporous Silicon based Capacitive affinity sensor – fabrication and electrochemical studies// Sensors and Actuators, B97, 334 (2004)
3. C. Baratto, G. Faglia, E. Comini, G. Sherverglieri, A. Taroni, V. La Ferrara, L. Quercia, G. Di Francia, A novel porous silicon sensor for detection of sub-ppm NO_2 concentrations// Sensors and Actuators B: Chemical 77, 62 (2001)
4. M.Y. Ghannam, A.A. Abouelsaood, and G.F. Nijs, A semiquantitative model of a porous silicon layer used as a light diffuser in a thin film solar cell // Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 60, 105 (2000)
5. A.I. Luchenko, M.M. Melnichenko, K.V. Svezhentsova, O.M. Shmyryeva, Complex studies of properties of nanostructured silicon// Nanoengineering: Fabrication, Properties, Optics and Devices III, Proc. of SPIE, Vol. 6327, 632716 (2006)
6. R.M. Feenstra, Tunneling spectroscopy of the (110) surface of direct-gap III-V semiconductors// Phys. Rev. B. 50 (7), 4561 (1994)

Надійшла до редколегії 18.03.10

УДК 539.194

Ніколаєнко* Т.Ю., Войтешенко І. С.,
Л.А.Булавін, д.ф.-м.н., проф., Говорун Д.М.,
д.б.н., проф.

Визначення коефіцієнтів жорсткості для колективних ступенів вільності біологічних молекул

Запропоновано методику кількісного опису
конформаційної гнучкості молекул за
допомогою релаксованих коефіцієнтів
жорсткості. За результатами квантово-
механічних розрахунків визначено величини
релаксованих коефіцієнтів жорсткості для
торсійних кутів біологічно важливих молекул
ортофосфорної кислоти і 1',2'-дидезоксирибози
та для кута псевдообертання фуранозного
кільця останньої.

Ключові слова: конформаційна гнучкість,
1',2'-дидезоксирибоза, *ab initio* розрахунки.

*E-mail: tim_mail@ukr.net

Для кількісного опису конформаційної
нежорсткості [1, 2] біологічних молекул доцільно
використовувати поняття коефіцієнтів
жорсткості для тих чи інших їхніх механічних
ступенів вільності. Для будь-якого структурного
параметра τ (наприклад, торсійного кута)
відповідний коефіцієнт жорсткості K_τ можна
означити як другу похідну від приросту
електронної енергії ΔE молекули при зміні
параметра τ :

$$K_\tau = 2 \left. \frac{\partial^2 \Delta E}{\partial \tau^2} \right|_{\tau=\tau^0, \vec{R}_i=\vec{R}_i^0} \quad (1)$$

Зауважимо, що значення коефіцієнта K_τ буде
різним залежно від того, за яких додаткових умов
 $\vec{F}(\vec{R}_i)=0$ ($\vec{R}_i$ – координати ядер молекули)
береться похідна (1).

Так, якщо при зміні параметра τ з метою
чисельного обчислення похідної (1) проводити
мінімізацію енергії E (оптимізацію геометрії)
молекули по усіх інших структурних параметрах,
то такий «релаксований» коефіцієнт жорсткості
 K_τ^{relax} буде найменшим з усіх можливих.
Натомість, якщо похідну (1) обчислювати при
фіксованих інших структурних параметрах
молекули, то значення K_τ^{flex} , $K_\tau^{\text{Hess}} \geq K_\tau^{\text{relax}}$,

T. Yu. Nikolaienko*, I. S. Voiteshenko,
L.A.Bulavin, Dr.Sc., prof., D.M.Hovorun, Dr.Sc.,
prof.

Determination of rigidity coefficients for cooperative degrees of freedom in biological molecules

The relaxed rigidity coefficients are introduced
for characterizing the conformational flexibility of
biomolecules. On the basis of *ab initio* quantum-
mechanical calculations the relaxed rigidity
coefficients values are determined for torsion
angles of orthophosphoric acid and 1',2'-
dideoxyribose molecules as well as for the sugar
pseudorotation angle of the latter.

Key Words: conformational flexibility, 1',2'-
dideoxyribose, *ab initio* calculations.

збігатиметься із відповідним діагональним
елементом матриці Гесса потенціальної енергії і
його обчислення не викликає методичних
труднощів.

Метою даної роботи є створення методики
обчислення релаксованих коефіцієнтів
жорсткості для торсійних кутів і кута
псевдообертання цукру [3] у біологічно важливих
молекулах нуклеотидної природи.

Релаксовані коефіцієнти жорсткості

Розглянемо один із структурних параметрів
молекули (наприклад, торсійний кут, кут згину
Вотсон-Криківської пари, кут спіральності ДНК
тощо), який виражається відомим чином через
координати $\vec{R}_i$ ядер атомів молекули:

$$\tau = f(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N).$$

Будь-які зміни координат $\vec{R}_i$, окрім зміщення
або повороту молекули як цілого, можна подати
через зміни її нормальних координат x_i :

$$\vec{R}_i = \vec{R}_i^0 + \vec{\xi}_i^1 \cdot x_1 + \dots + \vec{\xi}_i^M \cdot x_M,$$

де $\vec{R}_i^0$ – координати ядер, за яких параметр τ
набуває значення τ^0 , M – кількість коливальних
мод ($M=3N-5$ для лінійної і $M=3N-6$ для

Представлено:
д.ф.-м.н., проф. І.І. Адаменко

нелінійної молекули), а $\bar{\xi}_i^j$ – вектор зміщень i -го атома у j -ому нормальному коливанні, нормований так, що $\sum_{i=1}^N (\bar{\xi}_i^j)^2 = 1$ для всіх j . Зміна енергії молекули при невеликому зміщенні її ядер є

$$\Delta E = \sum_{j=1}^M \frac{\mu_j \omega_j^2 \cdot x_j^2}{2}, \quad (2)$$

де $\mu_j = \sum_{i=1}^N M_i (\bar{\xi}_i^j)^2$ – зведена маса, а ω_j – частота j -ого нормального коливання, M_i – маса i -го ядра.

Знайдемо мінімум (2) за додаткової умови

$$f(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N) = \tau^0 + \Delta \tau, \quad (3)$$

де $\tau^0 = f(\bar{R}_1^0, \dots, \bar{R}_N^0)$ – значення параметра τ у рівноважній конформації.

Використовуючи метод невизначених множників Лагранжа, задачу легко звести до пошуку мінімуму функції багатьох змінних

$$S = \sum_{j=1}^M \frac{\mu_j \omega_j^2 \cdot x_j^2}{2} + \lambda \cdot (\tau^0 + \Delta \tau - f(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N)) \quad (4)$$

Оскільки при обчислення похідної (1) ми цікавимося лише нескінченно малими змінами параметра τ (нескінченно малими зміщеннями ядер атомів молекули), то в (4) функцію f можна розкласти в ряд Тейлора до лінійних членів включно:

$$f(\bar{R}_1, \dots, \bar{R}_N) = f(\bar{R}_1^0, \dots, \bar{R}_N^0) + \sum_{j=1}^M c_j^{\tau} \cdot x_j,$$

$$\Delta E = \sum_{j=1}^M \frac{\mu_j \omega_j^2 \cdot x_j^2}{2} = \frac{(\Delta \tau)^2}{2} \cdot \frac{1}{\left(\sum_{j=1}^M \frac{(c_j^{\tau})^2}{\mu_j \omega_j^2} \right)^2} \cdot \sum_{j=1}^M \mu_j \omega_j^2 \cdot \left(\frac{c_j^{\tau}}{\mu_j \omega_j^2} \right)^2 = \frac{(\Delta \tau)^2}{2} \cdot \frac{1}{\sum_{j=1}^M \frac{(c_j^{\tau})^2}{\mu_j \omega_j^2}},$$

тобто для релаксованої жорсткості K_{τ} параметра τ отримусмо вираз

$$K_{\tau} = \frac{1}{\sum_{j=1}^M \frac{(c_j^{\tau})^2}{\mu_j \omega_j^2}}. \quad (8)$$

Об'єкти і методи дослідження

де $c_j^{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial \bar{R}_i} \cdot \bar{\xi}_i^j$ – коефіцієнт

сприйнятливості параметра τ до j -го нормального коливання [4]. В результаті додаткова умова (3) набуде вигляду

$\Delta \tau = \sum_{j=1}^M c_j^{\tau} \cdot x_j$, а функція (4) –

$$S = \sum_{j=1}^M \frac{\mu_j \omega_j^2 \cdot x_j^2}{2} + \lambda \cdot \left(\Delta \tau - \sum_{j=1}^M c_j^{\tau} \cdot x_j \right).$$

Мінімізація цієї функції дає $M+1$ рівняння для визначення x_j і λ :

$$\frac{\partial S}{\partial x_n} = 0 \Rightarrow \mu_n \omega_n^2 \cdot x_n + \lambda \cdot c_n^{\tau} = 0, \quad n = \overline{1, M} \quad (5)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^M c_j^{\tau} \cdot x_j = \Delta \tau \quad (6)$$

Виражаючи з (5) $x_n = -\lambda \cdot \frac{c_n^{\tau}}{\mu_n \omega_n^2}$ і

підставляючи їх у (6), отримасмо $\lambda = -\frac{\Delta \tau}{\sum_{j=1}^M \frac{(c_j^{\tau})^2}{\mu_j \omega_j^2}}$.

Тоді

$$x_n = \Delta \tau \cdot \frac{1}{\sum_{j=1}^M \frac{(c_j^{\tau})^2}{\mu_j \omega_j^2}} \cdot \frac{c_n^{\tau}}{\mu_n \omega_n^2} \quad (7)$$

і приріст енергії молекули за таких змін її нормальних координат згідно з (2) буде

Розроблену методику обчислення релаксованих коефіцієнтів жорсткості було застосовано до опису конформаційної нежорсткості конформера R_0 ($\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = 35^\circ$) молекули ортофосфорні кислоти [2] і трьох конформерів молекули 1',2'-дидезоксирибози [5]: енергетично найвитіднішого (1: $\beta = 54^\circ$, $\gamma = 59^\circ$, $\epsilon = -177^\circ$, $P = 135^\circ$), В-ДНК-подібного (14: $\beta = 170^\circ$, $\gamma = 47^\circ$, $\epsilon = 177^\circ$, $P = 150^\circ$) і А-ДНК-

подібного (29: $\beta = 170^\circ$, $\gamma = 53^\circ$, $\varepsilon = -170^\circ$, $P = 323^\circ$).

При цьому коефіцієнти сприйнятливості для торсійних кутів (τ_i в молекулі H_3PO_4 та β , γ , δ , ε і ν_i , $i = \overline{0,4}$, в молекулі 1',2'-дидезоксирибози) розраховували за формулою (21) роботи [4]. Коливальні спектри розраховували у пакеті Gaussian 03 для платформи Win32 [6] методом DFT з жорсткими критеріями збіжності (*opt=tight*) та сіткою інтегрування підвищеної точності (*int=ultrafine*),

використовуючи обмінно-кореляційний функціонал B3LYP і базисний набір 6-31G(d,p).

Для розрахунку коефіцієнту сприйнятливості $c^P_j = \frac{\partial P}{\partial x_j}$ (рад/Å) кута псевдообертання P до j -го нормального коливання було використано наступне його означення [3]:

$$P = \arctg \frac{\nu_4 + \nu_1 - \nu_3 - \nu_0}{2\nu_2 \cdot (\sin 36^\circ + \sin 72^\circ)} \quad (9)$$

виходячи з якого маємо

$$c^P_j = \frac{\partial P}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \arctan t = \frac{1}{1+t^2} \cdot \frac{\partial t}{\partial x_j} = \frac{1}{1+t^2} \cdot \sum_{i=0}^4 \frac{\partial t}{\partial \nu_i} \frac{\partial \nu_i}{\partial x_j},$$

де, $c^{\nu_i}_j = \frac{\partial \nu_i}{\partial x_j}$ – коефіцієнти сприйнятливості $c^{\nu_i}_j$, $\frac{\partial t}{\partial \nu_1} = \frac{\partial t}{\partial \nu_4} = -\frac{\partial t}{\partial \nu_3} = -\frac{\partial t}{\partial \nu_0} = \frac{1}{2\nu_2 \cdot (\sin 36^\circ + \sin 72^\circ)}$ для торсійних кутів ν_i ($i = \overline{0,4}$), $t = \frac{\nu_4 + \nu_1 - \nu_3 - \nu_0}{2\nu_2 \cdot (\sin 36^\circ + \sin 72^\circ)}$, а похідні $\frac{\partial t}{\partial \nu_i}$ дорівнюють

$$\frac{\partial t}{\partial \nu_1} = \frac{\partial t}{\partial \nu_4} = -\frac{\partial t}{\partial \nu_3} = -\frac{\partial t}{\partial \nu_0} = \frac{1}{2\nu_2 \cdot (\sin 36^\circ + \sin 72^\circ)}$$

$$\frac{\partial t}{\partial \nu_2} = -t \cdot \frac{1}{\nu_2} = -\frac{\nu_4 + \nu_1 - \nu_3 - \nu_0}{2\nu_2 \cdot (\sin 36^\circ + \sin 72^\circ)} \cdot \frac{1}{\nu_2}$$

Таким чином,

$$c^P_j = \frac{1}{1+t^2} \cdot \left\{ \frac{1}{2\nu_2 \cdot (\sin 36^\circ + \sin 72^\circ)} \cdot (c^{\nu_4}_j + c^{\nu_1}_j - c^{\nu_3}_j - c^{\nu_0}_j) - \frac{t}{\nu_2} \cdot c^{\nu_2}_j \right\} \quad (10)$$

Результати та їх аналіз

У Табл. 1 наведено значення обчислених за формулою (8) релаксованих коефіцієнтів крутильної жорсткості K_β , K_γ , K_δ і K_ε для номенклатурних торсійних кутів, відповідно, β , γ , δ та ε біологічно важливих конформерів 1, 14 і 29 молекули 1',2'-дидезоксирибози, а також – значення релаксованого коефіцієнта жорсткості K_P кута псевдообертання P цукру у них. У Табл. 2 наведено дисперсії величин цих же ступенів вільності, обумовлені тепловими коливаннями атомів молекули, розраховані за методикою [4] для $T = 298,15$ К.

Співставлення даних Табл. 1 і Табл. 2 дозволяє зробити очікуване з фізичних міркувань узагальнення: більшим коефіцієнтам жорсткості K_i відповідають менші величини дисперсій σ_i .

Окремо слід відзначити залежність коефіцієнтів жорсткості і дисперсій від

конформації молекули. Так, для кута β величина K_β в конформері 1 майже в 6 разів більша, ніж у конформерів 14 і 29. Імовірною причиною цього є взаємодія притягуючого характеру між атомами H_5 і O_4 у конформері 1 (Табл. 1).

Кут псевдообертання фуранозного кільця є класичним прикладом «колективної» ступені вільності, адже його величина визначається значеннями 5 ендосиклічних торсійних кутів $\nu_0 - \nu_4$ [3]. Згідно з даними Табл. 1, відповідний релаксований коефіцієнт жорсткості K_P відрізняється майже вдвічі залежно від конформації фуранозного кільця, причому він є меншим у N-подібній конформації. Цей висновок добре узгоджується з тим, що відповідний їй мінімум на гіперповерхні потенціальної енергії [7] є більш «пологим», ніж той, що відповідає S-конформації.

Таблиця 1

Релаксовані коефіцієнти жорсткості для номенклатурних торсійних кутів та кута псевдообертання фуранозного кільця у біологічно важливих конформерах молекули 1',2'-дидезоксирибози [5]

Конформер	Коефіцієнт жорсткості, ккал/(моль·рад ²)				
	K_β	K_γ	K_δ	K_ϵ	K_ρ
1	12,8	25,9	10,4	6,5	5,9
14	2,3	21,7	16,8	6,2	5,8
29	2,4	25,2	7,6	5,1	3,4

Таблиця 2

Дисперсії конформаційних ступенів вільності біологічно важливих конформерів молекули 1',2'-дидезоксирибози [5], обумовлені тепловими коливаннями атомів

Конформер	Дисперсії ($T = 298,15$ K), град				
	σ_β	σ_γ	σ_δ	σ_ϵ	σ_ρ
1	14,4	9,2	13,9	18,9	18,7
14	30,2	10,2	11,1	19,3	19,0
29	29,5	9,4	16,2	20,9	24,5

Обчислене за формулою (8) значення релаксованого коефіцієнта жорсткості K_{τ_1} для кута τ_1 конформера R_0 молекули ортофосфорної кислоти склало 2,61 ккал/(моль·рад²), яке співпадає зі значенням $(2,59 \pm 0,03)$ ккал/(моль·рад²), одержаним в роботі [2] шляхом сканування гіперповерхні потенціальної енергії цієї молекули. Відзначимо, що останній шлях потребує незрівнянно більших затрат машинного часу, аніж використання методики, запропонованій у даній роботі.

Висновки

Запропоновано методику оцінки релаксованих коефіцієнтів жорсткості для колективних ступенів вільності біологічних молекул. Їхні значення можуть слугувати кількісною мірою конформаційної нежорсткості цих молекул. На прикладі ДНК-подібних конформерів молекули 1',2'-дидезоксирибози показано суттєву залежність механічних властивостей молекули від її конформації.

Список використаних джерел

1. Shishkin O. V. Conformational flexibility of di- and tetrahydropyrimidine rings in nucleic acid bases. An ab initio HF/6-31G** study // J. Mol. Struct. – 1998. – Vol. 447. – P. 1–5.
2. Булавін Л.А., Ніколаєнко Т.Ю., Говорун Д.М. Структурна нежорсткість молекули ортофосфорної кислоти: неемпіричне квантово-механічне дослідження // Доповіді Національної академії наук України. – 2009. – №10. – С. 80 – 87.

3. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – Москва: Мир, 1987. – 584 с.
4. Булавін Л.А., Ніколаєнко Т.Ю., Говорун Д.М. Структурна мінливість біологічних молекул, спричинена їхніми нормальними коливаннями // Доповіді Національної академії наук України. – 2010. – №7. – друкується
5. Жураківський Р.О., Юренко Є.П., Говорун Д.М. Конформаційні властивості 1',2'-дидезоксирибози – модельного цукрового залишку 2'-дидезоксирибонуклеотидів: результати неемпіричного квантово-механічного дослідження // Доповіді Національної академії наук України. – 2006. – №8. – С. 207 – 213.
6. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al. Gaussian 03, Revision C.02 / Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
7. Foloppe N., Nilsson L., MacKerell A. D. Ab initio Conformational Analysis of Nucleic Acid Components: Intrinsic Energetic Contributions to Nucleic Acid Structure and Dynamics // Biopolymers. — 2002. — Vol. 61. — P. 61–76.

Надійшла до редколегії 12.05.10

УДК 539.26; 548.4

Пацай Б.Д., к.ф.м.н.,
Теселько П.О., к.ф.м.н.,
Цмоць В.М., д.ф.м.н., проф.

Природа парамагнітних центрів, які утворюються в кристалах Cz n-Si після високотемпературної обробки

Вивчено природу парамагнітних центрів, які утворюються в монокристалах кремнію вирощених методом Чохральського, після їх високотемпературної обробки в інтервалі 650-1100°C та повторної термообробки при 1150°C. За даними одержаними на основі вимірювання магнітної сприйнятливості (МС) встановлено температурні інтервали зростання та зменшення концентрації парамагнітних центрів. Методом трикристальної дифрактометрії досліджено вміст домішково-структурних комплексів у цих кристалах та визначено радіуси і концентрації кластерів та дислокаційних петель. Встановлено, що виявлені зміни магнітної сприйнятливості пов'язані з генерацією кисневмісних кластерів та дислокаційних петель.

Ключові слова: кремній, парамагнітний центр, дифрактометрія.

*E-mail: peter@univ.kiev.ua

Вступ

Основною технологічною домішкою в кристалах кремнію, вирощених за методом Чохральського є кисень, який міститься в них на рівні границі розчинності при температурі розплаву. З пониженням температури розчинність кисню у кремнію зменшується за експоненціальним законом. Тому при всіх температурах (нижче 1200°C) кисень у кремнію знаходиться у пересиченому стані. В процесі термообробки (ТО), починаючи від 400°C кисень утворює різні комплекси (преципітати), оскільки це приводить до пониження вільної енергії кристалу. Морфологія, розміри і густина цих преципітатів залежить від температури і тривалості відпалу, наявності різних легуючих і фонових домішок (перш за все С), а також від зовнішніх чинників, яким піддавався кристал до ТО. Утворення кисневих преципітатів, як правило, супроводжується генерацією від них міжвузельних атомів кремнію, які в залежності від температури відпалу та інших умов

B. D. Patcaj, PhD,
P. O. Teselko, PhD,
V. M. Tsmots, Dr. Sci., Prof.

The nature of paramagnetic centers formed in Cz n-Si crystals after high-temperature treatment

The nature of paramagnetic centers formed in Cz-Si mono-crystals after their high-temperature treatment in the range of 650-1100°C and repeated temperature treatment at 1150°C are studied. On the basis of magnetic susceptibility (MS) measurements, the regions of increasing and decreasing of paramagnetic center concentration are established. The amount of impurity-structural complexes in these crystals is investigated by the method of three-crystal diffractometry. The radii and concentration of clusters and dislocation loops are determined. It is found that obtained MS changes are connected with the generation of oxygen-related clusters and dislocation loops.

Key Words: silicon, of paramagnetic center, diffractometry.

утворюють дислокаційні диполі, петлі, або дефекти упаковки.

Преципітація кисню у кремнію, утворення супутніх їй дефектів, вплив попередніх термообробок і морфологія утворених в процесі ТО преципітатів детально описані в [1].

В даній роботі вивчався вплив високотемпературної обробки (ВТО) в області температур 650-1100°C і повторної ВТО при 1150°C з інтервалами 50°C на магнітні властивості монокристалічного кремнію. Час проведення всіх ВТО становив 5 год.

З метою виявлення природи комплексів, які утворюються в процесі ВТО нами використано методику трикристальної дифрактометрії по Бретту.

При інтерпретації одержаних результатів ми опиралися на роботу [2], в якій приведено дані одержані методами оптичної мікроскопії та високороздільної електронної мікроскопії дефектів ґратки, що утворюються у пластинах Cz-Si з високою концентрацією міжвузлових атомів кисню.

Методика вимірювання і результати

Дослідження проводилися на монокристалічному кремнії КЕФ-2, вирощеному методом Чохральського. Концентрація кисню становила $1,8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, концентрація вуглецю на два порядки менша. Після термообробки зразки піддавалися хімічному поліруванню поверхні.

Магнітна сприйнятливості (МС) вимірювалася методом Фарадея при $T=300\text{K}$. Результати вимірювань представлені на рис. 1, 2. На рис. 1 приведено значення МС монокристалів кремнію, які піддавалися ВТО починаючи від 650°C до 1100°C і після повторної ВТО-1150. Вимірювання МС зразків проводилося у магнітному полі $H=4,0 \text{ кЕ}$. Видно, що ВТО приводить до значного зменшення діамagnetизму. Це зменшення найпростіше пояснити виникненням парамагнітних центрів, що утворилися в процесі проведення ВТО. Повторна ВТО при 1150°C відпалює ці центри, за винятком зразків, що пройшли ВТО при температурах $T > 900^\circ\text{C}$.

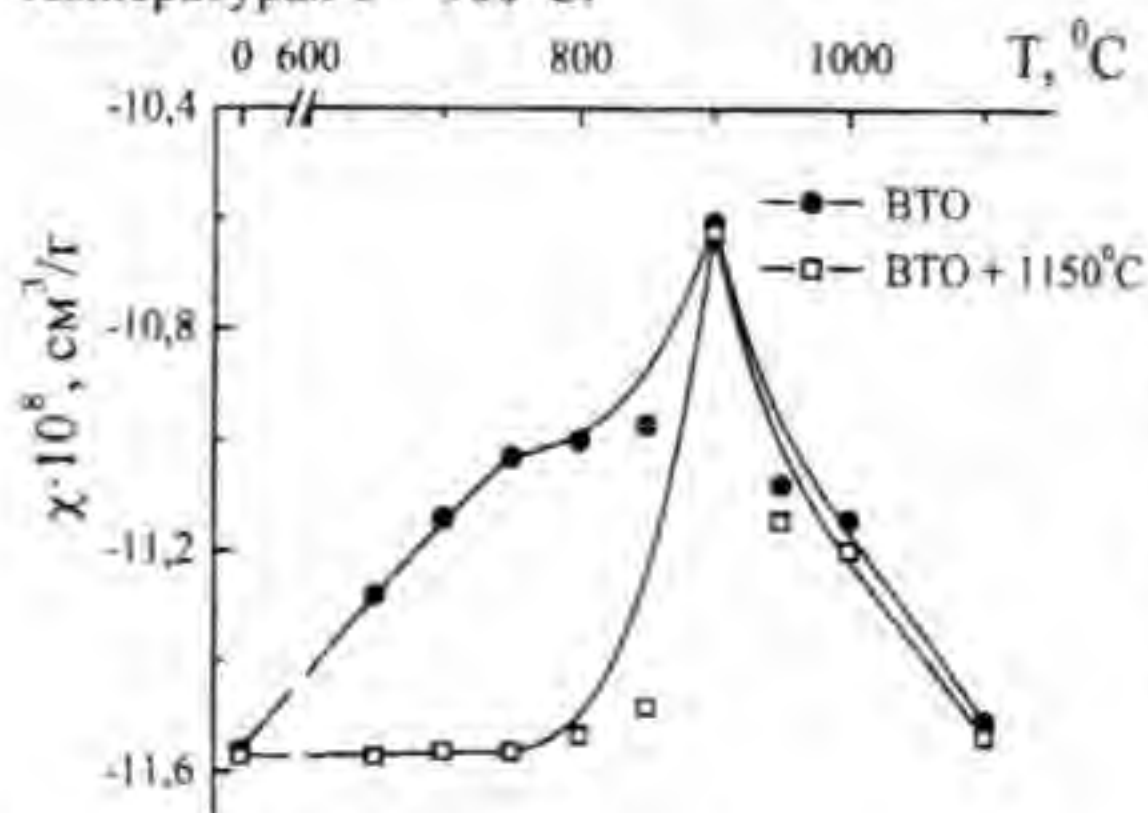


Рис. 1 Залежності магнітної сприйнятливості зразків від температури відпалу

На рис. 2 представлені залежності $\chi(H)$ вихідного зразка і зразків, що піддавалися ВТО при $T=900^\circ\text{C}$ і 1100°C до і після проведення повторної ВТО при 1150°C . Видно, що в зразках, які пройшли ВТО і ВТО-1150, з'являються нелінійності залежності $\chi(H)$. Особливо значна нелінійність спостерігається на зразках, що пройшли ВТО-900.

Таким чином, високотемпературна обробка монокристалічного кремнію приводить до зменшення діамagnetизму і до появи нелінійності залежностей МС від H . Перше є наслідком генерації парамагнітних центрів, друге - пов'язане з їх магнітним упорядкуванням. Можна також стверджувати, що ці центри не являються парамагнітними дислокаційними Д-

центрами, оскільки при високотемпературних обробках вони відпалюються. Відповідно до даних [3] цими парамагнітними центрами є термодонори II (ТД-II), які генеруються в даному інтервалі температур.

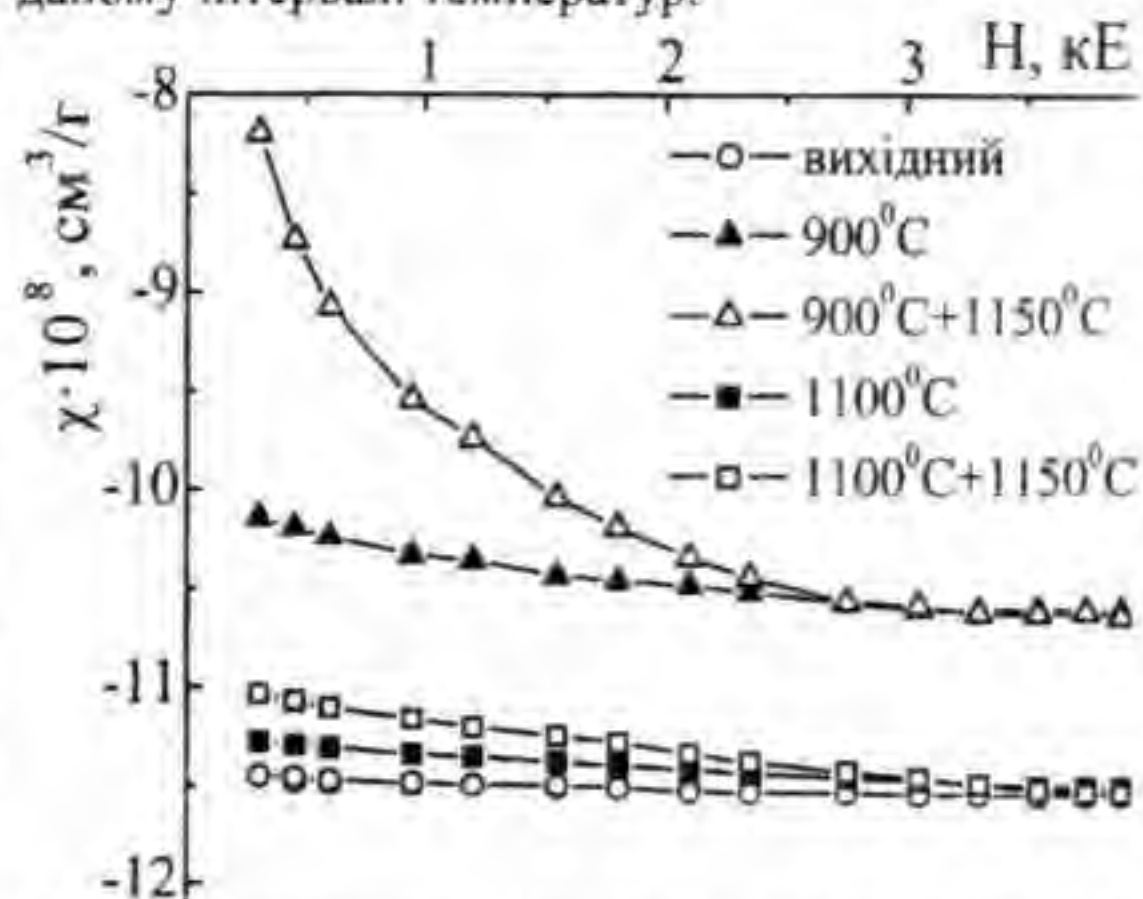


Рис. 2 Залежності магнітної сприйнятливості зразків від напруженості магнітного поля

Морфологію, розміри і густину домішково-структурних комплексів у кристалах що пройшли ВТО досліджено за допомогою трикристалльної дифрактометрії по Бреггу [4]. У відповідності з [1, 2] у процесі ВТО утворюються пластинчасті преципітати, які складаються з аморфної фази.

Дислокаційні петлі можуть бути достатньо ефективними центрами зародження кисневих преципітатів.

Встановлено, що радіуси дислокаційних петель приблизно удвічі перевищують радіуси кластерів при тій же температурі відпалу. Варто відзначити факт менш різкої, ніж у випадку кластерів, зміни концентрації дислокаційних петель із зростанням температури відпалу. Цікаво, що із зростанням температури відпалу число дислокаційних петель, у порівнянні з числом кластерів, явно зростає, проте навіть відпал при 1150°C не приводить до абсолютного переважання в кристалі дислокаційних петель, що іноді наголошується деякими авторами.

Обговорення результатів

Аналіз отриманих результатів ґрунтується на наступному: 1) термодонори II, які генеруються в області температур 650°C і вищих являються парамагнітними центрами; 2) в області температур 900°C і вище має місце генерація дислокацій і пов'язаних з ними акцепторних центрів, поява яких приводить до компенсації термодонорів.

Зауважимо, що питання про фізичну природу термодонорів залишається відкритим. Якщо вважати найбільш достовірними моделі ТД-II, представлені в роботах авторів [5], то ці центри мають прямий зв'язок з великими Si_xO_y кластерами (до декількох сотень атомів кисню) [6]. На поверхні розділення таких кластерів з кремнієвою матрицею утворюються, за аналогією з МОН структурою [7], донорні центри, що зумовлені виникненням p^+ області поблизу поверхні кисневого преципітату [8]. Можливо їх фізична природа тісно пов'язана зі спотворенням кристалічної ґратки поблизу кисневмісного преципітату, зумовленим різницею молекулярних об'ємів Si_xO_y і Si і виникненням завдяки цьому флуктуацій кристалічного потенціалу, на яких можуть локалізуватися електрони. Так чи інакше, але для виникнення ТД-II потрібно мати великі кисневмісні кластери. Виходячи із [2] такими кисневмісними кластерами в даній температурній області (до 900°C) можуть бути лише пластинчасті та октаедричні преципітати.

Можна припустити, що саме ці преципітати (завдяки їх субмікронним розмірам) ми в основному і спостерігаємо рентгенографічно. При цьому, якщо вважати всі преципітати октаедричними (сфероїдальними), то їх загальний об'єм у кристалі при збільшенні температури первинного відпалу від 850 до 1000°C зростає удвічі (приблизно від 3×10^{-4} до $6,2 \times 10^{-4} \text{ см}^3$), а при повторному відпалі зразків при 1150°C ще вдвічі. Звертаємо увагу на те, що, якщо наведені оцінки вважати наближеними, то і тоді для заповнення їх об'єму наявного в кристалі кисню ($1,8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$) явно не вистачає. Отже, потрібно відзначити, що частина утворених при відпалі преципітатів не є кисневого походження.

Завдяки відзначеній різниці молекулярних об'ємів окису кремнію і кремнієвої матриці, утворення преципітатів супроводжується значними напруженнями біля поверхні преципітату. Ці напруження викликають емісію міжвузлових атомів кремнію з преципітату в матрицю.

Таким чином, в міру зростання розмірів преципітатів з'являється перенасичення кремнієвої матриці (біля преципітатів) власними міжвузловими атомами. Останнє приводить до виникнення дислокаційних петель міжвузлового типу та кластерування міжвузлових атомів кремнію у вигляді аморфних преципітатів. І те й інше спостерігалось безпосередньо електронно-мікроскопічно [2]. Цікаво, що виходячи із вище сказаного, дислокаційні петлі повинні

утворюватися лише при певному пересиченні матриці атомами кремнію, тобто після досягнення достатньої температури термообробки та відповідного часу її проведення.

Відповідно до одержаних нами дифрактометричних даних, відношення концентрацій дислокаційних петель до концентрації кластерів c_D/c_K у зразках, що пройшли попередній відпал, різко зростає із підвищенням температури відпалу понад 900°C . Повторний високо-температурний відпал зразків додатково збільшує густину дислокаційних петель, але значних змін c_D/c_K в залежності від температури попереднього відпалу зразків уже не спостерігається. Відомо, що виникнення дислокацій супроводжується утворенням на них обірваних електронних зв'язків, які можуть спарюватися тобто мають акцепторний характер. Зауважимо, що виникнення термоакцепторів паралельно з утворенням ТД-II неодноразово спостерігалось в кристалах кремнію [9].

Отже, можна припустити, що нейтралізація ТД-II під час відпалу зразків при температурах вищих 900°C безпосередньо пов'язане з виникненням дислокацій в околі кисневих преципітатів і спарюванням їх обірваних електронних зв'язків за рахунок ТД-II.

Проведений аналіз генерації ТД-II і термоакцепторів у процесі ВТО в інтервалі температур $650-1100^\circ\text{C}$ і повторної ВТО-1150 повністю підтверджується результатами, які одержані нами при дослідженні даних кристалів.

За даними рентгеноструктурного аналізу слідує, що при температурах відпалу $600-900^\circ\text{C}$ утворюються макрокластери на границі яких з матрицею Si генеруються ТД-II. Оскільки ТД-II являються парамагнітними центрами, то це повністю пояснює залежність МС від температури ВТО в інтервалі $650-900^\circ\text{C}$ (рис. 1).

Після ВТО-900 починають інтенсивно утворюватися дислокаційні петлі (за описаними вище механізмами), про що свідчить зростання відношення c_D/c_K встановлене на основі проведеного структурного аналізу. Враховуючи, що на дислокаціях присутні обірвані зв'язки, які можуть спарюватися, зростання густини дислокацій приводить до нейтралізації термодонорів. Тому, при підвищенні температури термообробки починаючи з 900°C відбувається компенсація донорних центрів акцепторами, що, в свою чергу, приводять до різкого зменшення парамагнетизму.

Саме конкуренцією цих факторів - генерацією ТД-II і утворенням дислокаційних петель - можна пояснити вплив повторної ВТО-

1150. У зразках, що пройшли ВТО до 900 °С, вона додатково збільшує густину дислокаційних петель і відповідно приводить до різкого зменшення парамагнетизму. У зразках, що пройшли термообробку при $T_{\text{ВТО}} > 900^\circ\text{C}$ значних змін у відношенні c_D/c_K не спостерігається, відповідно зменшується вплив ВТО-1150 у цих зразках на магнітну сприйнятливості (рис. 1).

Із літературних даних [1] слідує, що термообробка при 600-1200 °С приводить до генерації пластинчастих преципітатів. Встановлено, що ці преципітати зберігають свою форму, якщо вони починають генерувати дислокаційні петлі, в іншому випадку вони змінюють форму на октаедричну [10]. Це підтверджується електронномікроскопічними дослідженнями [2]. На основі наших досліджень можна зробити висновок, що в температурному діапазоні 650-850 °С пластинчасті преципітати змінюють свою форму на октаедричну. Пластинчасті преципітати в діапазоні температур 900-1100 °С зберігають свою форму, оскільки починаючи саме з 900 °С вони починають генерувати дислокаційні петлі, що підтвердили наші вимірювання відношення c_D/c_K . Звідси випливає, що ТД-II пов'язані саме із пластинчастими преципітатами.

Висновки

За допомогою даних одержаних на основі вимірювання магнітної сприйнятливості встановлено температурні інтервали зростання та зменшення концентрації парамагнітних центрів.

Рентгеноструктурні дослідження дозволили встановити, що виявлені зміни магнітної сприйнятливості пов'язані з генерацією кисневмісних кластерів та дислокаційних петель.

Є підстави вважати, що ТД-II виникають на поверхні пластинчастих преципітатів за механізмом аналогічним утворенню донорних центрів у МОН-структурах. Руйнування ТД-II може бути викликане як появою дислокаційних акцепторних центрів і їх компенсацією термодонорів так і зміною форми преципітату від пластинчастого до октаедричного.

Встановлено, що поряд із кисневмісними також утворюються кластери, що мають структуру аморфного кремнію. Останнє підтверджується електронно-мікроскопічними спостереженнями.

Список використаних джерел

1. Бабич В.М., Блецкан Н.И., Венгер Е.Ф. Кислород в монокристаллах кремния – Киев: Интерпресс ЛТД., 1997. – 240 с.

2. Bender H. Investigation of the Oxygen-Related Lattice Defects in Czochralski Silicon by Means of Electron Microscopy Techniques // Phys. Stat. Sol. (a). – 1984. – 86, № 1. – P. 245-261.
3. Baranskii P.I., Babich V.M., Baran N.P., Dotsenko Yu. P., Kovalchuk V.B., Sherschel V.A. Investigation of Formation Conditions of Thermal Donors-I and -II in oxygen-Containing n-Type Silicon within the Temperature Range 400 to 800 °C // Phys. Stat. Sol. (a). – 1983. – 78, №2. – P. 733-739.
4. Новиков М.М., Теселько П.О., Мельничук С.В. Вивчення змін рентгенівської дифрактометричної картини при термовідпалі напруженого кремнію // Металлофизика и новейшие технологии. – 2006. – 28, №5. – С. 631-641.
5. Babich V.M., Baran N.P., Bugai A. A., Konchits A.A., Kovalchuk V.B., Maksimenko V.M., Shanina B.D. Electrical and Paramagnetic Properties of Thermodonors-II in Silicon. Discussion of a Model // Phys. Stat. Sol. (a). – 1988. – 109, №2. – P. 537-547.
6. Cazcarra V., Zunino P. Influence of Oxygen on Silicon Resistivity // J.Appl. Phys. – 1980. – 51, №8. – P. 4206-4211.
7. Holzlein K., Pensl G., Schulz M. Trap Spectrum of the "New Oxygen Donor" Silicon // Appl. Phys. A. – 1984. – 34, № 3. – P. 155-161.
8. Henry A., Pautrat J.L., Saminadayar K. The New Donors in Silicon: The Effect of the inversion Layers Surrounding Precipitates // In: Proceedings of 14-th international Conference on Defects in Semiconductors, edited by H.J. von Bardeleben (Trans Tech, Aedermannsdorf, Switzerland, 1986). – P. 985-989.
9. Igras E. Generacja termoakceptorow w krzemie i wpływ naprezen mechanicznych na szybkość tej generacji // Biuletyn WAT im. J. Dabrowskieco. – 1985. – 34, № 3. – P. 51-62.
10. Borghesi A., Pivac B, Sassella A. and Stella A. Oxygen precipitation in Silicon. // Applied Phys. Rev. – 1995 – 77, № 9. – P. 4169-4244.

Надійшла до редколегії 06.04.10

УДК 539.194

Розуван* К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А.

Оптичні властивості тонких плівок лазерних барвників нанесених на металеве дзеркало.

Дисперсійні криві оптичної провідності плівок лазерних барвників (родамін 6Ж, бриліантовий зелений) нанесених на алюмінієве дзеркало були експериментально отримані за допомогою спектральних еліпсометричних вимірювань. Величини оптичної провідності плівок показали сильну залежність від товщини плівки. Дисперсійні криві були проаналізовані з точки зору явищ на контактні метал-напівпровідник з використанням співвідношення Спайсера. Експериментально і теоретично був побудований чотирьохвектор перетворення Лоренца для плівки барвника і лазерного дзеркала.

Ключові слова: лазерний барвник, спектральна еліпсометрія, контакт метал-напівпровідник, перетворення Лоренца.

*E-mail: kpr@univ.kiev.ua

Однією з важливих конструктивних особливостей елементів на базі оптичних функціональних матеріалів слід назвати використання планарних структур (тонких плівок). Історично оптика тонких плівок почала розвиватися у зв'язку з необхідністю нанесення просвітлюючих покриттів на лінзи, призми та інші оптичні елементи оптичних виробів (об'єктивів, окулярів, монохроматорів тощо). Зараз при розв'язку конкретних задач оптики тонких плівок дослідник повинен враховувати не тільки підходи геометричної оптики або теорії інтерференції але і елементи теорії твердого тіла, нелінійної оптики або квантової механіки - в залежності від того класу речовин - напівпровідників, полімерів, композитних матеріалів, які використовуються в кожному конкретному випадку при побудові даних планарних структур. Лазерні барвники, які показали себе ефективними активними середовищами для фемто-, піко- наносекундних лазерів зі змінною довжиною хвилі або для задач де потрібний висока ефективність люмінесцентних (суперлюмінесцентних) процесів, ще не втратили свого значення і з точки

K.P.Rozouvan*, S.G. Rozouvan, I.A. Shaykevich

Optical properties of laser dyes thin films deposited on a metallic mirror.

Optical conductivity dispersion curves of deposited on alumina mirror laser dyes (rhodamine 6G, brilliant green) thin films were measured by spectral ellipsometry technique. Optical conductivity of the films demonstrated strong dependency from the films thicknesses. The dispersive curves were analyzed by metal-semiconductor contact phenomena approach using Spicer ratio. Lorentz transformation 4-vector was determined both experimentally and theoretically for a laser mirror and a laser dye film.

Key Words: laser dye, spectral ellipsometry, metal-semiconductor contact Lorentz transformation.

зору останніх досягнень нелінійної оптики полімерів з π -спряженими зв'язками. Наші розрахунки та експериментальні дані [1-3] показали суттєву роль π -спряжених зв'язків для одного з лазерних барвників, який може розглядатися в такому наближенні як аморфний напівпровідник. Однією з задач даної роботи являється дослідження оптичних властивостей тонких плівок лазерних барвників.

1) Оптична провідність тонких плівок барвників нанесених на алюмінієве дзеркало.

Вивчення барвників на дзеркалі привертало увагу дослідників за останнє десятиліття [4-6]. Так, наприклад, були отримані результати залежності часів затухання флуоресценції в залежності від товщини плівки барвника на дзеркалі. Залежність була пояснена нерадіаційними процесами розсіяння збуджених станів барвника. Наприклад, взаємодія молекул барвника з електронами металевого дзеркала приводила до майже повного гасіння люмінесценції [7]. Дослідники відмічали можливість нерадіаційної дисипації внаслідок прямого поглинання світла електронами металевого дзеркала. В роботах [8-11]

досліджувались три основні канали які мають відповідати за закон збереження кількості руху при такому поглинанні- розсіянні на фонах, на поверхні або на спотвореннях ближнього поля молекул барвника. Водночас в цитованих роботах дискутувалась необхідність введення інших механізмів для пояснення, наприклад, уширення спектрів люмінесценції молекул лазерного барвника на відстані десятків нанометрів від

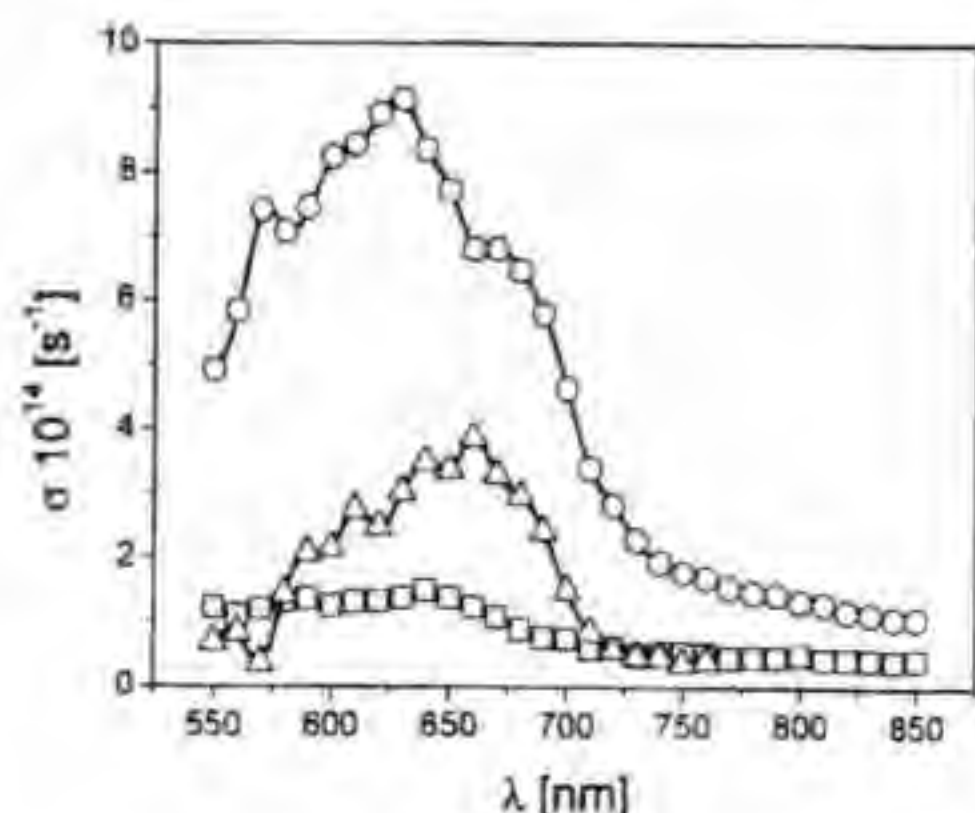


Рис.1 Спектральні криві оптичної провідності для тонких плівок бриліантового зеленого з товщинами: —□— 69нм, —Δ—151нм і —○—368нм на алюмінієвому дзеркалі.

дзеркала. Це уширення пояснювалось впливом дзеркально наведеного диполя з більшими величинами дисипації енергії в порівнянні з диполем оптичного збудження молекул барвника.

При проведенні експериментів ми використовували таку ж методику спектральної еліпсометрії яка використовувалась нами при проведенні експериментів в [1,3].

Результати спектральних еліпсометричних вимірювань плівок бриліантового зеленого та родаміну 6Ж приведені на рис.1,2. Додатково до основних співвідношень методики Бітті[1] нами враховувалась наявність багатопроменевої інтерференції в плівці барвника шляхом обчислення матриці (a):

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{s,p} & a_{12}^{s,p} \\ a_{21}^{s,p} & a_{22}^{s,p} \end{pmatrix} = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & 1/U_{\text{air}} \\ 1 & -1/U_{\text{air}} \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{pmatrix} \cos \delta & \frac{i}{U_{\text{dye}}} \sin \delta \\ iU_{\text{dye}} \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ U_{\text{Al}} & -U_{\text{Al}} \end{pmatrix}$$

$\delta = 2\pi \tilde{n}_{\text{dye}} d_{\text{dye}} \cos \varphi_{\text{dye}} / \lambda$ - фазова товщина плівки барвника, $U_s = \tilde{n}_s \cos \varphi_s$ (s-компонента),

$U_p = \tilde{n}_p / \cos \varphi_p$ (p-компонента), $\tilde{n}_i = n_i + ik_i$ - комплексний показник заломлення, φ_i - кут заломлення в повітрі, в барвнику або в алюмінієвому дзеркалі. Нижні індекси Al, dye, air відповідають параметрам алюмінієвої підложки, плівки барвника та повітря. Співвідношення (1) для однієї поглинаючої плівки на підложці еквівалентне описанню багатопроменевої інтерференції за допомогою формули Ейрі. Визначаючи експериментально за допомогою методу Бітті кути азимуту відновленої поляризації ψ , зсуву фаз Δ між s- і p-компонентами, а також коефіцієнт відбиття R для однієї з поляризацій ми можемо зв'язати ці величини з елементами матриці (a):

$$R = \left| \frac{a_{21}^p}{a_{11}^p} \right|^2$$

$$\psi = \arctan \left(\frac{a_{21}^p a_{11}^s}{a_{11}^p a_{21}^s} \right) \quad (2)$$

$$\Delta = \arg \left(\frac{a_{21}^p}{a_{11}^p} \right) - \arg \left(\frac{a_{21}^s}{a_{11}^s} \right)$$

Система трьох співвідношень 2 може розглядатися як система нелінійних рівнянь відносно дійсної та уявної частин показника заломлення та товщини плівки барвника - n_{dye} , k_{dye} і d_{dye} , яка розв'язуватись нами чисельними методами за допомогою програм пакету MIT MPB у середовищі LINUX. Коректність визначення оптичних констант плівки барвника при такій реалізації задачі оберненої еліпсометрії залежить від величин похибок вимірювань. При товщинах плівок порядку 100нм і величинах уявної частини показника заломлення ~ 0.4 багатопроменева інтерференція не впливає суттєво на результуючі криві оптичної провідності оскільки світло практично повністю поглинається після одного-двох відбиттів від границь тонкої плівки і проходить через цю поглинаючу плівку. На дисперсійних залежностях Рис.1 відсутні піки (скачки) які характерні для дисперсійних кривих оптичної провідності алюмінію в області 800нм.

Можна відмітити дві суттєві особливості наведених кривих. Величина спектральної провідності та форма смуг поглинання даних барвників залежать від товщини плівки. Абстрагуючись від конкретної хімічної формули кожного з барвників, плівку барвника на алюмінієвому дзеркалі можна представити як

контакт напівпровідника і металу. Схема такого контакту наведена на рис.3. На самому контакті мають співпадати поверхневі потенціали металу і напівпровідника. Оскільки положення рівнів Фермі (F_m і F_s на рис.3) у них різне, то буде відбуватись їх вирівнювання в основному за рахунок міграції основних носіїв з металу в напівпровідник. Носії формують просторово розподілений заряд внаслідок електричного потенціалу якого і відбувається вирівнювання рівнів Фермі у металі і напівпровіднику. В

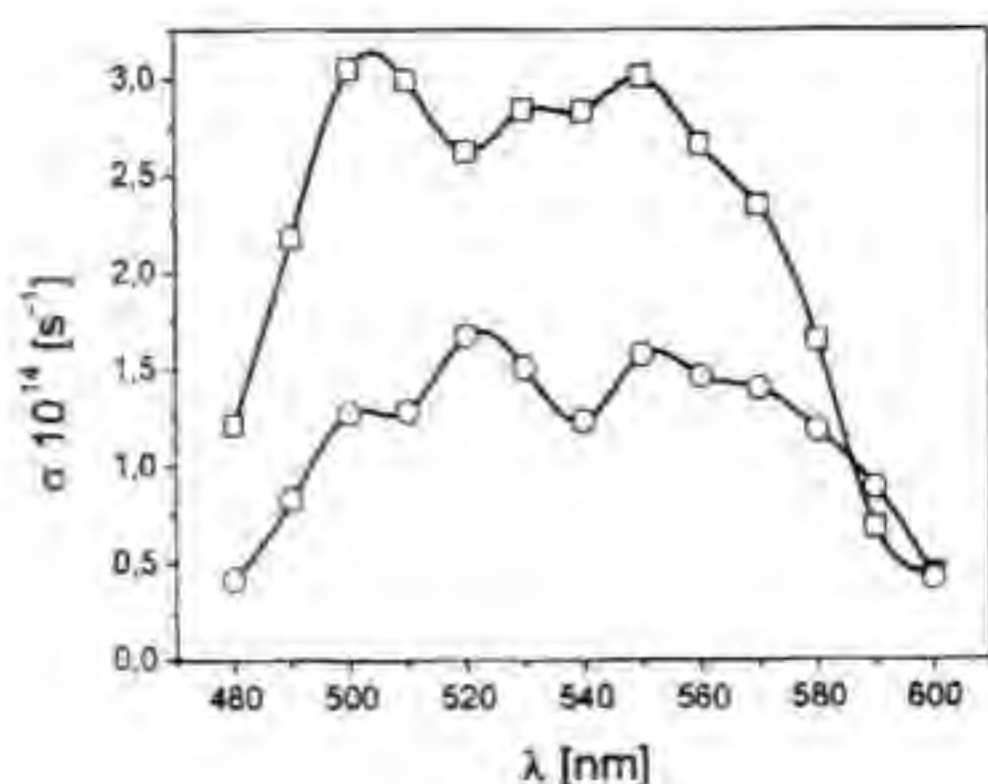


Рис.2 Спектральні криві оптичної провідності для тонких плівок родаміну 6Ж з товщинами: —□— 97нм і —○—72нм на алюмінієвому дзеркалі.

області просторового заряду енергетичні рівні напівпровідника викривлюються. Носії просторового заряду займають вільні енергетичні стани напівпровідника що приводить до зміни функції густин станів. Оптична провідність барвника може бути виражена через співвідношення Спайсера [12]:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\hbar\omega}{\pi} \int_{E_F}^{E_F+\hbar\omega} \rho_f(E-\hbar\omega) \rho_s(E) dE \quad (3)$$

Як результат співвідношення 3 оптична провідність під дією світлової хвилі частоти ω є результат суми всіх прямих переходів і пропорційна кореляційній функції від початкових заповнених ρ_f і кінцевих незаповнених ρ_s густин станів. E_F це енергія рівня Фермі при температурах близьких до абсолютного нуля, f - сила осцилятора, величина якої як ми вважаємо не залежить від енергії.

Плівки різної товщини які зображені на рис.3 тонкими вертикальними лініями 1 і 2 зазнають різного впливу від приконтактного об'ємного

заряду. Очевидно, що для плівки 1 цей вплив більш суттєвий внаслідок більшого розподілу заряду по всій товщині плівки. Відомо [13,14], що такий заряд може бути локалізований в області 100 нанометрів біля контакту, що співпадає з порядком товщин плівок барвників в наших експериментах.

З нашої точки зору об'ємний заряд будуть формувати електрони. Наявність позитивного просторового заряду привела б до збільшення густини незаповнених станів внаслідок рекомбінацій дірок та електронів і як наслідок до більшої оптичної провідності саме для тонких плівок. Оскільки наші вимірювання показують протилежний результат, то в барвнику на межі з

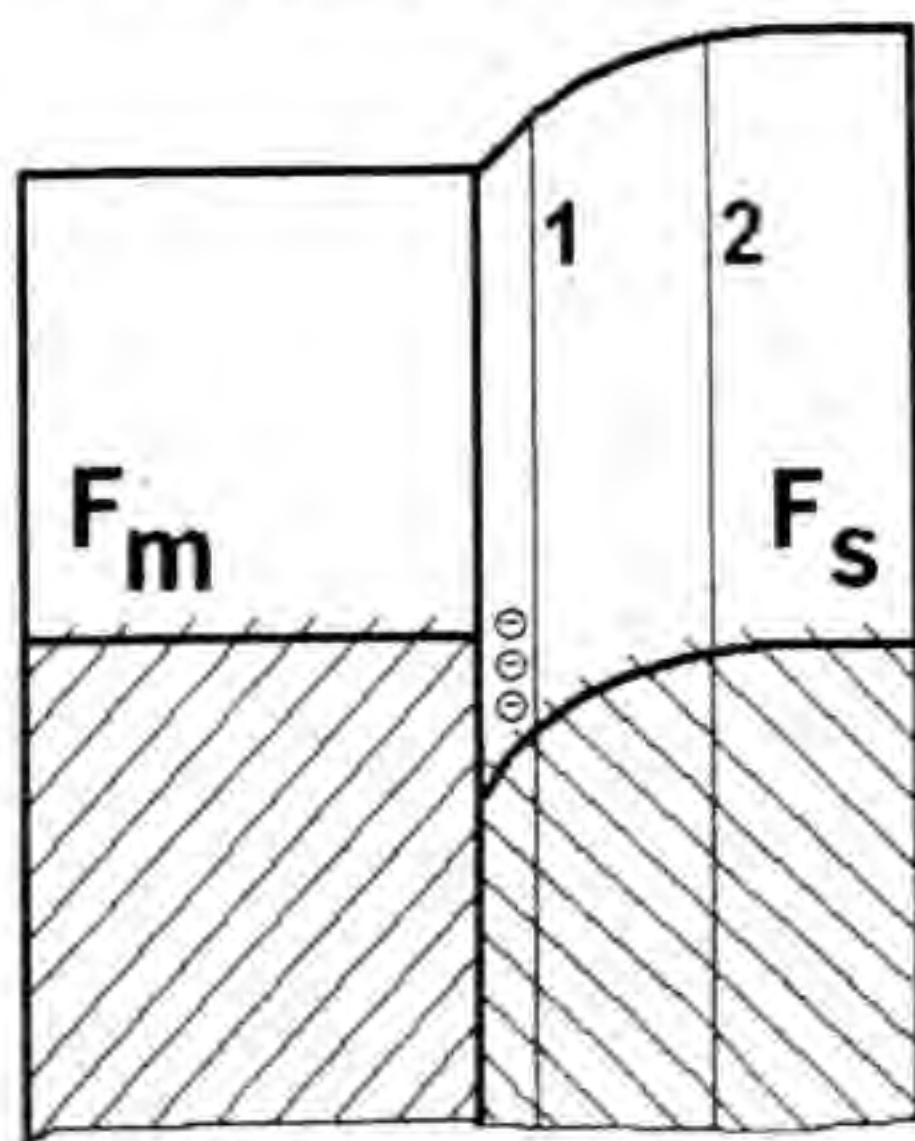


Рис.3 Зонна структура лазерного барвника нанесеного на алюмінієве дзеркало. F_m та F_s рівні Фермі відповідно металу та барвника. Вертикальні лінії 1 і 2 показують границі плівок барвника різної товщини.

металом утворюється об'ємний від'ємний заряд. При цьому густина кінцевих незаповнених станів зменшується (вони заповнюються електронами об'ємного заряду), що і приводить до зменшення величини оптичної провідності для більш тонких плівок.

Варіації форми лінії поглинання тонких плівок родаміну 6Ж та бриліантового зеленого в залежності від товщини вказують на вплив електричного поля на хвильові функції та положення енергетичних рівнів осцилюючої молекули барвника. Якщо ми діагоналізували гамільтоніан молекули барвника заміною координатного базису[3]:

$$q_i = A_{ij} x_j \quad (4)$$

то стаціонарне рівняння Шредінгера для такого осцилятора запишеться як система рівнянь для одновимірних осциляторів при наявності електричного поля:

$$\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2M_i} \Delta \psi \right) + \sum_i \left(\left(\frac{M_i(q_i)^2 (\omega_i)^2}{2} \right) - eE_i q_i - U_i \right) \psi = 0 \quad (5)$$

сумування проводиться по координатам $i \in 1, 2, \dots, 3N$, де N - число атомів в молекулі, U_i - це енергетичні рівні, M_i - маса того атома який має координату q_i , а E_i - компоненти вектора:

$$E_i = \tilde{E}_i (A^{-1})_{ij} \\ \tilde{E}_j = \begin{cases} E_x, & j = 3l \\ E_y, & j = 3l + 1 \\ E_z, & j = 3l + 2 \end{cases} \quad (6)$$

де E_x, E_y та E_z - компоненти електричного поля, $l \in 1, \dots, N$.

Замінами

$$\tilde{q}_i = q_i - \frac{eE_i}{M_i(\omega_i)^2} \\ \tilde{U}_i = \frac{(eE_i)^2}{2M_i(\omega_i)^2} + U_i \quad (7)$$

ми зводимо задачу до задачі сукупності одновимірних осциляторів в електричному полі.

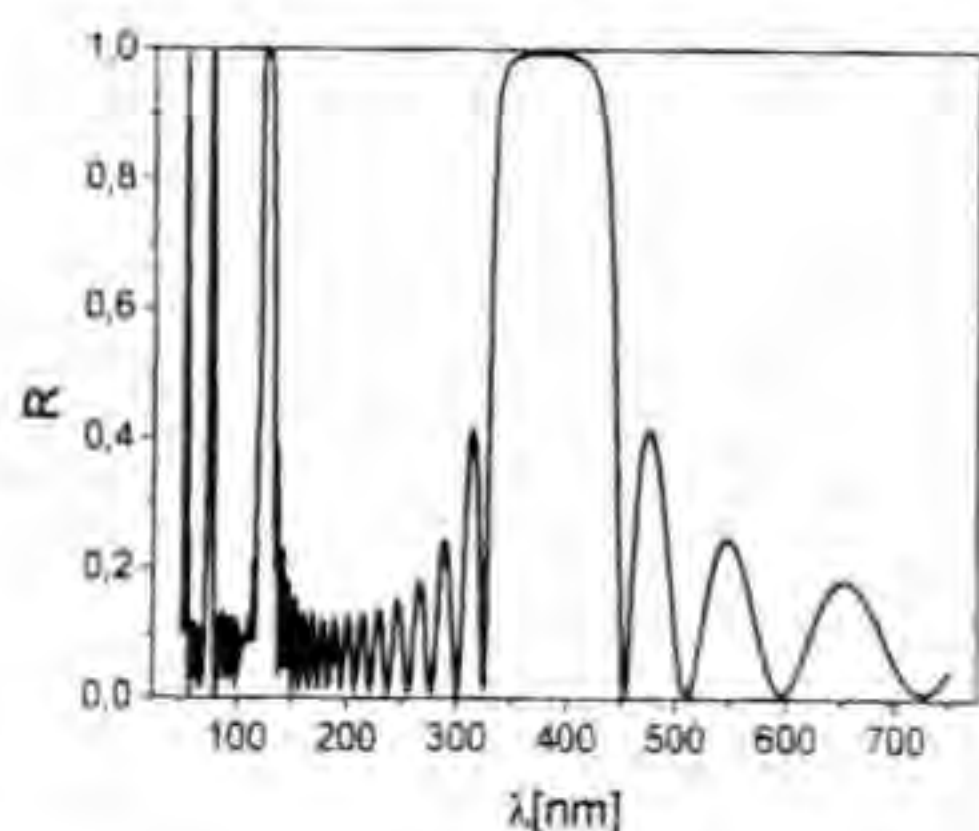


Рис.4 Розраховані спектральні криві коефіцієнта відбиття лазерного дзеркала. $n_{\text{odd}}=1.95$, $n_{\text{even}}=1.33$, $d_{\text{odd}}=48.46\text{nm}$, $d_{\text{even}}=71.05\text{nm}$, $n_{\text{substrate}}=2.1$. Нормально падаюче світло.

Звичайно, ми не можемо отримати точне аналітичне рішення стаціонарного рівняння

Шредінгера хоча можемо якісно охарактеризувати зміну форми смуги поглинання наших барвників. По-перше з другого рівняння із співвідношень 7 випливає що смуга поглинання барвника в електричному полі має розширюватись тому що енергетичні зазори між окремими електронно-коливальними рівнями смуги поглинання збільшаться на величину

$$\frac{(eE_i)^2}{2M_i(\omega_i)^2}.$$

По-друге сама форма смуги має змінитись. Як наслідок першого рівняння із співвідношень 7, положення атомів яке відповідає мінімуму потенціальної енергії зміниться. При цьому внаслідок принципу Франка-Кондона, оптичні переходи будуть відбуватись на інші електронно-коливальні рівні смуги поглинання, що і приводить до зміни форми смуги для тонких плівок.

2) Топологія оптичних характеристик тонких плівок.

В роботах [15,16] нами були виведені співвідношення для характеристичного чотирьохвектора (4-vector) для інтерференції у багат шаровому покритті. Вектори на протилежних кінцях багат шарового покриття пов'язані між собою за допомогою 4x4 матриці (a) :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i\sqrt{\tilde{E}^+ \tilde{E}^-} \sin \delta \\ 2i\sqrt{\tilde{E}^+ \tilde{E}^-} \cos \delta \\ \tilde{E}^+ + \tilde{E}^- \\ (\tilde{E}^+ - \tilde{E}^-)U \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2i\sqrt{\tilde{E}^{+'} \tilde{E}^{-'}} \sin \delta \\ 2i\sqrt{\tilde{E}^{+'} \tilde{E}^{-'}} \cos \delta \\ \tilde{E}^{+'} + \tilde{E}^{-'} \\ (\tilde{E}^{+'} - \tilde{E}^{-'})U \end{pmatrix} \quad (8)$$

індекси "+" і "-" позначають тангенціальні проекції векторів електричного поля для хвиль, які розповсюджуються відповідно у напрямках повітря-підкладка та підкладка-повітря, а δ - різниця фаз цих хвиль. В цьому випадку квадратична форма $\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2 + \mathbf{z}^2 - \mathbf{c}^2 \mathbf{t}^2$ є інваріантом що є необхідною і достатньою умовою для тотожності співвідношення (8) перетворенням Лоренца у (3+1)-просторі. Для електромагнітної хвилі, що падає з повітря на підкладку ми можемо записати:

$$\cos \Delta = \cos(\arctan(\frac{x_s}{y_s}) - \arctan(\frac{x_p}{y_p})) = \frac{x_s x_p + y_s y_p}{\sqrt{(x_s)^2 + (y_s)^2} \sqrt{(x_p)^2 + (y_p)^2}} \quad (9)$$

$$\tan \psi = \frac{(z_s - ct_s)(z_p + ct_p)}{(z_s + ct_s)(z_p - ct_p)}$$

де індекси "s" і "p" позначають відповідно s- та p-

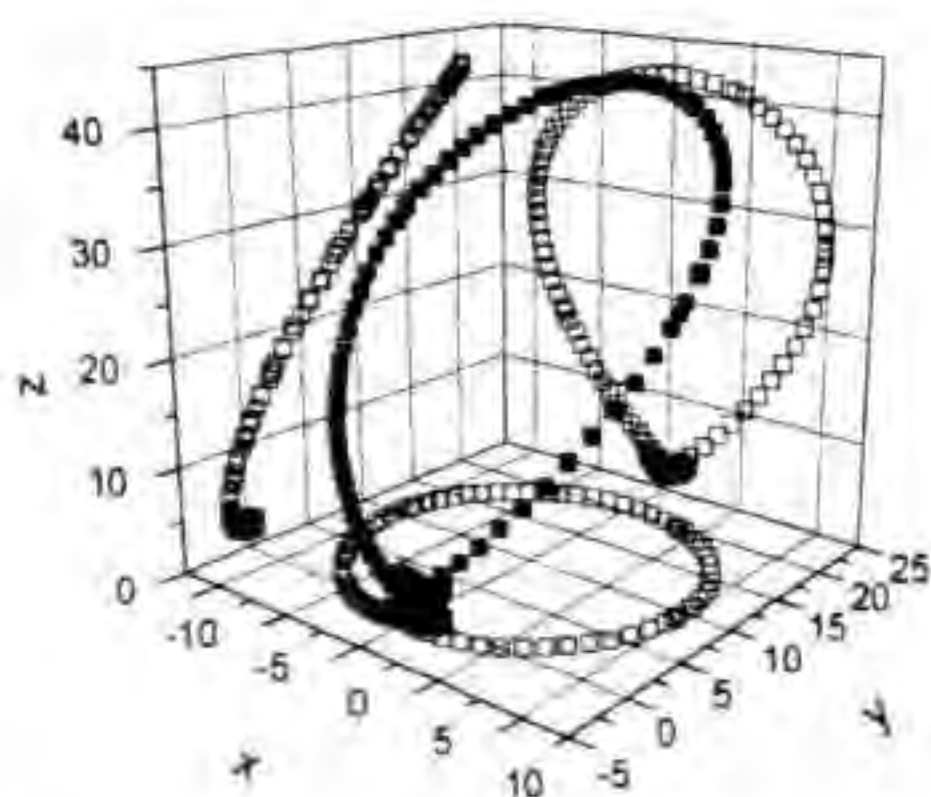


Рис.5 Проекція в тривимірний простір траєкторії чотирьохвектора для лазерного дзеркала з рис.4. ■ точки траєкторії, □ точки проекції траєкторії на координатні площини.

поляризацію світла. Таким чином ми знайшли зв'язок між еліпсометричними параметрами та координатами чотирьохвектора: $\cos \Delta(x, y)$, $\tan \psi(z, ct)$.

Траєкторія чотирьохвектора багатошарового лазерного дзеркала з розрахованою спектральною кривою відбивання з рис.4 зображені на рис.5. Збільшений фрагмент рис.5 приведений на рис.6. З графіків видно, що на спектральних проміжках в районі 125нм, 400нм, які характеризуються великою ефективністю відбивання світла, траєкторія чотирьохвектора представляє собою одну й ту ж замкнену гладку лінію яка еволюціонує в широкому проміжку змін всіх трьох координат. В спектральних інтервалах з низькою ефективністю відбивання світла траєкторія чотирьохвектора локалізована поблизу точки (0,0,2.5) і не має правильної форми. Траєкторії проекцій чотирьохвектора в трьохвимірний простір, отримані з експериментальних еліпсометричних вимірів для лазерного дзеркала і плівки бриліантового зеленого товщиною 69нм приведені на рис.7,8.

Для вимірів було взяте лазерне дзеркало, яке раніше використовувалось в резонаторі лазера на

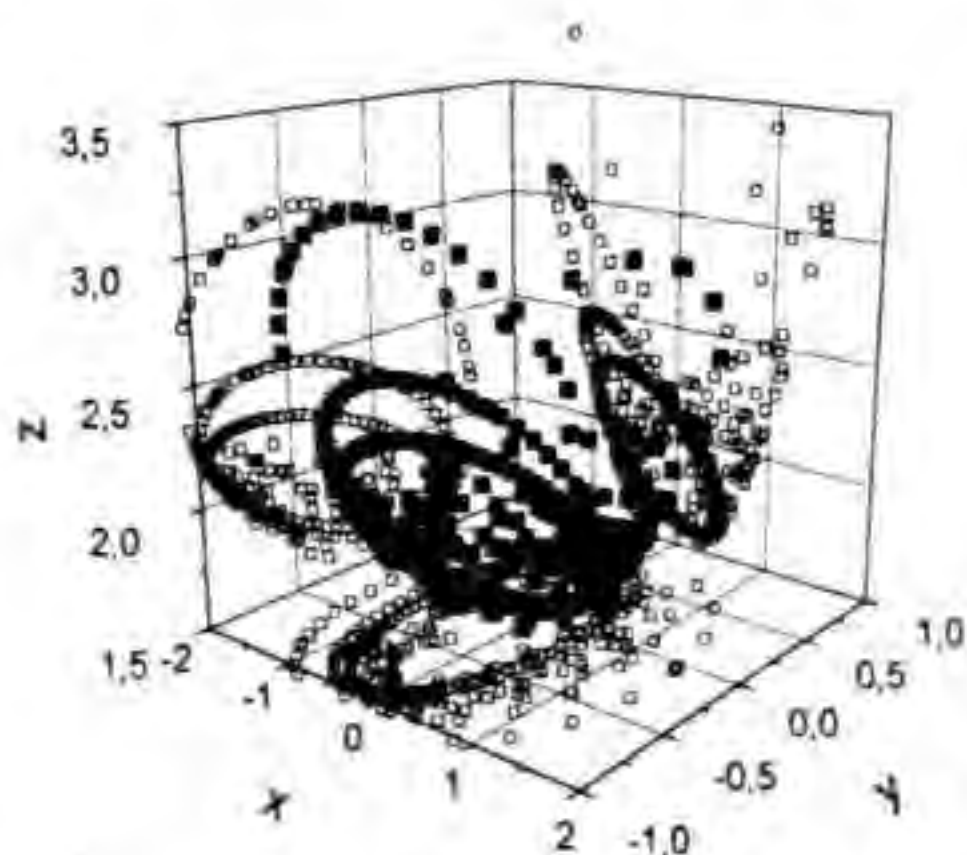


Рис.6 Збільшений окіл точки (0,0,2.5) проекції в тривимірний простір траєкторії чотирьохвектора з рис. 5. ■ точки траєкторії, □ точки проекції траєкторії на координатні площини.

рубіні. З рис.7,8 видно що траєкторії чотирьохвекторів для дзеркала і плівки барвника мають різні топологічні особливості. В той час як траєкторія для дзеркала має чітку петлеподібну структуру, для плівки барвника траєкторія носить незамкнений характер. Це вказує на відсутність впливу інтерференції на оптичну провідність

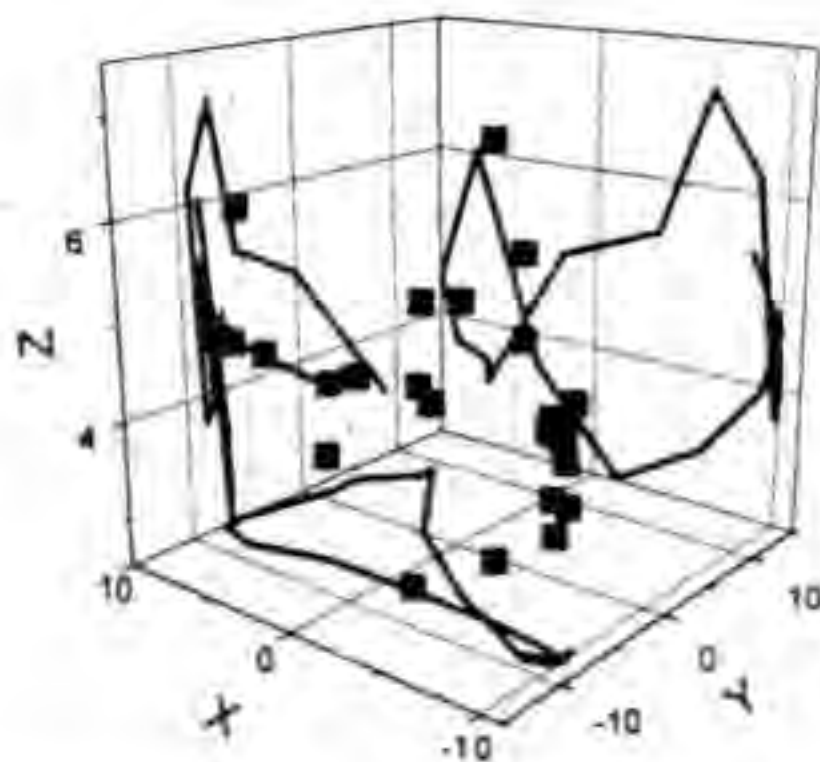


Рис.7 Проекція в тривимірний простір траєкторії чотирьохвектора для лазерного дзеркала отримана з експериментальних даних. ■ точки траєкторії, — проекції траєкторії на координатні площини.

барвника на дзеркалі на відміну від того як це припускалось в [5].

Спектральні еліпсометричні виміри тонких плівок різної товщини лазерних барвників бриліантового зеленого та родаміну 6Ж показали

сильну залежність амплітуди і форми смуги поглинання на дисперсійних кривих оптичної провідності від товщин плівок. Подібна поведінка повністю узгоджується по-перше з фізикою явищ на контакті метал-напівпровідник і по-друге з формалізмом для оптичної провідності розробленим Спайсером при дослідженні фотоефекту в металах [12]. З точки зору фізики оптичних функціональних матеріалів, плівки органічних π -спряжених полімерів на металах являються досить перспективними при

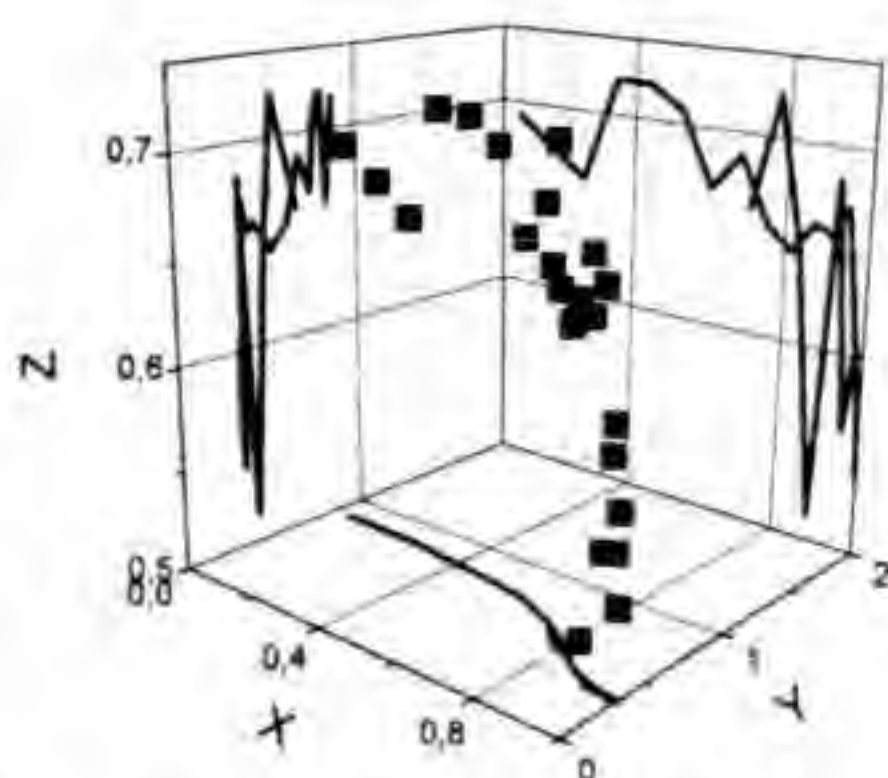


Рис.8 Проекція в тривимірний простір траєкторії чотирьохвектора для плівки бриліантового зеленого товщиною 69нм на алюмінієвому дзеркалі, ■ точки траєкторії, — проекції траєкторії на координатні площини.

конструюванні оптичних елементів нелінійної оптики із-за відносної простоти впливу на величини їх оптичної провідності. Аналіз оптичних властивостей тонких плівок з точки зору перетворення Лоренца є цікавим не тільки з точки зору співставлення формалізмів спеціальної теорії відносності і багатопроменевої інтерференції в багат шарових структурах а й з погляду практичних задач спектральної еліпсометрії. Так топологічні особливості траєкторії чотирьохвектора в 3+1 просторі Мінковського показують чітку залежність від наявності або відсутності багатопроменевої інтерференції при проходженні світла через тонкі плівки.

Список використаних джерел.

1. Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Лінійна і нелінійна спектроскопія – зв'язків у політиофенів // Вісник Київського університету. – 2008. - №1, С. 227-230.

2. 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.

3. Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Розрахунки форми смуги поглинання лазерного барвника. // Вісник Київського університету, Сер. фіз.-мат. – 2009. - №3, С.329-334.

4. Chance R.R., Prock A., and Silbey R. Molecular Fluorescence and Energy Transfer Near Interfaces // Adv. Chem. Phys. -1978. -1. -P.37-45.

5. Drexhage K.H. Interaction of light with monomolecular dye layers // Progress in Optics XII, E.Wolf (ed.) -Amsterdam: North-Holland, 1974, -P. 165-270.

6. Zhou X.L., Zhu X.Y, and White J.M. Photochemistry at adsorbate/metal interfaces // Surf. Sci. Rep. -1991. -13. -P.73-220.

7. Ritchie G. and Burstein E. Luminescence of dye molecules adsorbed at a Ag surface // Phys. Rev. -1981. -B24. -P.4843-4846.

8. Avouris Ph. and Persson B.N.J. Excited States at Surfaces and their Non-Radiative Relaxation // J. Phys. Chem. -1984. -88. -P.837-842.

9. Persson B.N.J. and Lang N.D. Electron-hole-pair quenching of excited states near a metal // Phys. Rev. -1982. -B26. -P.5409-5415.

10. Persson B.N.J. and Persson M. Damping of Vibrations in Molecules Adsorbed on a Metal // Surface. // Surf. Sci. -1980. -97. -P.609-614.

11. Persson B.N.J. Theory of the damping of excited molecules located above a metal surface // J. Phys. Chem. -1978. -11. -P.4251-4269.

12. Berghand C. N. and Spicer W. E. Photoemission Studies of Copper and Silver: Theory // Phys. Rev. -1964. -vol. 136. -N4A. -P.1030-1044.

13. Киреев П.С. Физика полупроводников - М.:Высшая школа, 1975. -584 с.

14. Епифанов Г.И. Физика твердого тела - М.:Высшая школа, 1965. -276с.

15. Поперенко Л.В., Розуван К.П., Розуван С.Г. Перетворення Лоренца для тонкої плівки // Вісник Київського університету, Сер. фіз.-мат. – 2006. - №4, С. 466-471.

16. Розуван К.П., Розуван С.Г., Шайкевич І.А. Перетворення Лоренца для багат шарового покриття // Вісник Київського університету, Сер. фіз.-мат. – 2007. - №1, С. 396-405.

УДК 532.536

Рудніков Є.Г., кандидат фіз.-мат. наук
Альошин О.Д., доктор фіз.-мат. наук, професор
Остапчук Ю.Л., кандидат фіз.-мат. наук

Термодинамічні потенціали та термодинамічні характеристики речовини поблизу критичної точки

В роботі отримано вирази для термічних та калоричних термодинамічних величин поблизу критичної точки із використанням термодинамічних потенціалів на основі флуктуаційної теорії фазових переходів. Показано, що флуктуаційні частини всіх термодинамічних потенціалів одиниці об'єму поблизу критичної точки визначаються радіусом кореляції. Зокрема, одержано формули для розрахунку теплоємності в околі критичної точки.

Ключові слова: термодинамічні потенціали, теплоємність, радіус кореляції, критична точка

* E-mail: erudni@univ.kiev.ua

Дослідження масштабних рівнянь стану поблизу критичної точки, які визначають термічні та калоричні характеристики конденсованої речовини поблизу критичної точки, залишається актуальною задачею фізики фазових переходів другого роду та критичних явищ в рідинах.

Метою даної роботи є отримання виразів для термічних та калоричних термодинамічних величин поблизу критичної точки (КТ) в із використанням різноманітних термодинамічних потенціалів на основі флуктуаційної теорії фазових переходів (ФТФП) [1].

Згідно ФТФП в близькому околі КТ рівняння флуктуаційної частини термодинамічних потенціалів одиниці об'єму являє собою рівняння ідеального газу [2], що утворюється з окремих флуктуацій параметра порядку

$$\Omega(t, \mu) = N_{\phi} k_B T = C_0 R_c^{-3}(t, \mu). \quad (1)$$

Тут N_{ϕ} – число флуктуацій в одному молі речовини, R_c – радіус кореляції системи у термодинамічному стані, що визначається параметрами $t = (T - T_c)/T_c$ та $\mu = (\mu - \mu_c)/\mu_c$; T_c , μ_c – відповідно критичні значення температури та хімічного потенціалу. Термічні та калоричні

UDK 532.536

Rudnikov E.G., Ph.D.
Alekhin O.D., Dr. of Sci., Prof.
*Ostapchuk Yu.L. Ph.D.

Thermodynamic potentials and thermodynamic characteristic of substance near the critical point

The expressions for the thermal and calorific thermodynamic values near the critical point have been obtained in the work with the use of the thermodynamic potentials, on the basis of the fluctuation theory of phase transitions. It is shown, that the fluctuation parts of all thermodynamic potentials of unit volume near the critical point are determined by a correlation length. In particular, formulas for calculating of heat capacity in the vicinity of the critical point have been obtained.

Keywords: thermodynamic potentials, heat capacity, correlation length, critical point

характеристики отримуються як похідні від термодинамічного потенціалу.

В проведених раніше дослідженнях [3,4] ця задача була розв'язана для флуктуаційної частини великого термодинамічного потенціалу одиниці об'єму $\Omega/V(t, \mu) = -PV$, тобто в ізотермічно – ізохімпотенціальному статистичному ансамблі, для граничних критичних напрямків: критичної ізотерми, критичної ізохори та межі поділу фаз. На основі використання масштабних розкладів для радіуса кореляції [5] для цих граничних критичних напрямків були отримані вирази для перших та других похідних флуктуаційної частини термодинамічного потенціалу $\Omega/V(t, \mu)$, тобто для густини, ентропії, стисливості, об'ємного розширення та теплоємності.

Впродовж цих досліджень, в даній роботі використані: 1. великий термодинамічний потенціал $\Omega(t, \mu)/V$; 2) вільна енергія Гельмгольца $F(t, N/V)/V$; 3) ефективний термодинамічний потенціал, що визначає енергію системи за винятком енергії, пов'язаної із переносом молекул $L(S/V, \mu)/V$ [1]; 4) внутрішня енергія $E(S/V, N/V)/V$. Для чотирьох вказаних термодинамічних потенціалів характеристичних змінних – дві, тому самі ці потенціали доцільно використовувати для отримання масштабних рівнянь стану. В той же час, наприклад, потенціал Гіббса, віднесений до одиниці об'єму,

буде залежати від трьох термодинамічних змінних [6]: $\Phi(t, P, N/V)/V$. Цей термодинамічний потенціал може бути записаний як функція двох термодинамічних змінних, якщо буде віднесений до одного моля речовини: $\Phi(t, P)/N$.

В загальному випадку перехід від одного термодинамічного потенціалу до іншого відбувається із використанням перетворень Лежандра [6]. Флуктуаційні частини вказаних чотирьох термодинамічних потенціалів, записаних у різних характеристичних змінних, є малими. Виходячи із теореми про малі доданки [6], вони співпадають за величиною, а отже $\delta F(t, N/V)/V$, $\delta L(S/V, \mu)/V$, $\delta E(S/V, N/V)/V$, як і $\delta \Omega/V(t, \mu)$ визначаються радіусом кореляції системи і можуть бути записані у вигляді (1).

Для отримання термодинамічних похідних цих потенціалів по відповідних характеристичних змінних нами було розроблено програму для аналітичних розрахунків на базі програмного пакету Maple. Це дало можливість обрахувати термодинамічні похідні по характеристичних змінних до 4 порядку включно для кожного із термодинамічних потенціалів $\delta \Omega/V(t, \mu)$, $\delta F(t, N/V)/V$, $\delta L(S/V, \mu)/V$, $\delta E(S/V, N/V)/V$: 2 похідні першого порядку, 3 похідні другого порядку, 4 похідні третього порядку та 5 похідних четвертого порядку.

Вид деяких похідних наведено у додатку 1.

Фізичний зміст похідних n -го порядку визначається порядком відповідної кореляційної функції [1]. У практичному відношенні рівність нулевих похідних від термодинамічних величин визначають лінії естремумів на діаграмі стану для цих термодинамічних величин в близькому околі критичної точки, що досліджувались раніше в [4, 7-10].

Ці розрахунки було проведено для симетричної моделі "нульового скейлінгу" для напрямків критичної ізохори $\delta(N/V)=0$, критичної ізотерми $\delta t=0$ та межі поділу фаз $\delta \mu=0$.

Також ми провели аналогічні розрахунки і для граничного критичного напрямку критичної ізоентропи $\delta(S/V)=0$. Цей граничний критичний напрямок $(\partial \Omega / \partial t)_{\mu} = \delta(S/V)=0$ визначає лінію екстремальних значень ймовірності утворення флуктуацій $\omega \sim \exp(-\Omega/k_B T)$ на температурних залежностях при сталих полях $\delta \mu = \text{const}$ [8].

При цьому ми використали проведені нами розрахунки [11, 12] рівняння критичної ізоентропи в "лінійній моделі" параметричного скейлінгу. З отриманого нами рівняння критичної адиабати у параметричному вигляді можна зробити перехід до масштабних рівнянь стану як

функцій різних термодинамічних параметрів. При цьому ми отримали, що коефіцієнти масштабних рівнянь для критичної ізоентропи можна виразити як функції відповідних коефіцієнтів масштабних рівнянь напряму критичної ізотерми та критичних індексів.

Важливим, з нашої точки зору, наслідком отриманих залежностей у різних термодинамічних змінних є висновок про некоректність застосування в термодинамічних розрахунках поблизу КТ формули

$$(\partial E / \partial T)_V \sim C_V \quad (2)$$

яка традиційно використовується у науковій літературі для розрахунків теплоємності системи в критичному стані.

Це співвідношення з точністю до константи отримується за припущення, що внутрішня енергія $E = C_V T k_B$. В цьому співвідношенні припускається, що як в ідеальному газі $C_V(T) = \text{const}$. Тому в цьому випадку $(\partial E / \partial T)_V = C_V k_B$.

В той же час наш аналіз показує, що поблизу КТ, де згідно [1] $\delta E \sim R_c^{-3} t^{2-\alpha} (\Delta \mu)^{(2-\alpha)/\beta \delta}$, ця умова не виконується ($C_V \sim t^{-\alpha} (\Delta \mu)^{-\alpha} \neq \text{const}$). Як слідує з проведених в роботі точних розрахунків на основі рівнянь ФТФП [1], поблизу КТ є справедливим співвідношення $(\partial E / \partial T)_V T_c = (\partial E / \partial t)_V \sim t^{1-\alpha}$, а не співвідношення $(\partial E / \partial t)_V \sim t^{-\alpha}$, яке випливає з (2).

Згідно гіпотези ізоморфізму отримані співвідношення можна використовувати для розчинів поблизу критичних точок.

Подальше застосування використаного підходу передбачає застосування алгебри флуктуюючих величин [1], ідей Complete Scaling [13] та певної моделі розширеного рівняння стану [14].

Додаток 1.

1. Великий термодинамічний потенціал

$$\Omega_c = a_0 \frac{3}{t} + 3 a_1 \frac{2}{t^2} + (-2 \beta \delta + 3 \nu) \frac{1}{t^2} \mu^2 + O(\mu^4)$$

Перші та другі похідні по температурі t та полю μ представлені в роботах [3, 4].

2. Ефективний потенціал, пов'язаний з переносом молекул [1], функція від s та μ Критична ізохора

$$t_c = a_0 \frac{3}{s} + 3 a_1 \frac{2}{s^2} + \left(2 \frac{\beta \delta}{s-1} - \frac{\nu}{s-1} \right) \frac{1}{s^2} \mu^2 + O(\mu^4)$$

Друга похідна по полю μ

$$\begin{aligned} & \frac{3}{\alpha-1} \left(-\frac{-2\beta\delta+3\nu-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right) \frac{(-2\beta\delta+3\nu-1+\alpha)(-2\beta\delta+3\nu)(-\alpha-\alpha^2)}{(\alpha-1)^2} \frac{1}{\mu} + \\ & \frac{3}{\alpha-1} \left(-\frac{-3\beta\delta+3\nu-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right) \frac{(-3\beta\delta+3\nu-1+\alpha)(-3\beta\delta+3\nu)(8\alpha-\alpha^2-3\alpha^2-3\alpha^3)}{(\alpha-1)^2} \frac{1}{\mu} + \\ & \frac{3}{\alpha-1} \left(-\frac{-4\beta\delta+3\nu-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right) \frac{(-4\beta\delta+3\nu-1+\alpha)(-4\beta\delta+3\nu)}{(\alpha-1)^2} \end{aligned}$$

$$x = (u_1, u_2)^2 + u_1 u_2^2 + 2(a_0, a_1, a_2) + u_1^2(a_3) \mu^4 + O(\mu^5)$$

3. Вільна енергія Гельмгольца, функція від t та p
Критична ізохора

Друга похідна по температурі t

$$\begin{aligned}
& +12 \, P_1 \, a_0^2 \, a_1 \, \beta^2 - 9 \, P_1 \, a_0^2 \, a_2 \, v + 6 \, P_1 \, a_0^2 \, a_2 \, \beta + 27 \, P_1 \, a_0^2 \, a_2 \, v^2 \, \beta^2 + \\
& (-72 \, P_2 \, a_0 \, \beta \, v \, a_1^2 - 72 \, P_2 \, a_0^2 \, \beta \, v \, a_1 + 48 \, P_2 \, a_0 \, \beta^2 \, a_1^2 + 48 \, P_2 \, a_0^2 \, \beta^2 \, a_1 \\
& - 9 \, P_2 \, a_0 \, v \, a_1^2 - 9 \, P_2 \, a_0^2 \, v \, a_1 + 12 \, P_2 \, a_0 \, \beta \, a_1^2 - 12 \, P_2 \, a_0^2 \, \beta \, a_1 \\
& + 27 \, P_2 \, a_0 \, v^2 \, a_1^2 + 27 \, P_2 \, a_0^2 \, v^2 \, a_1) \, \beta^4 + O(\beta^6) \\
P_1 := & (-2 \, \beta - 2 + 3 \, v) \\
P_2 := & (-4 \, \beta - 2 + 3 \, v)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F_{\alpha}}{\partial p^2} = \\
 & \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \left[\frac{1}{2} (1 - \beta) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2} (1 - \beta) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2} (1 - \beta) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2} (1 - \beta) \right) \right] \\
 & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \left[\frac{1}{2} (1 - \beta) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2} (1 - \beta) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2} (1 - \beta) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{2} (1 - \beta) \right) \right]
 \end{aligned}$$
$$F_{\Phi} = a_0^3 (3V) + 3 a_0^2 a_2 (3V - 2\beta) \rho^2 + (a_1 \rho^3)$$
$$\begin{aligned} (b) P_{\mathcal{H}}(x) &= (-2+3V) \alpha \frac{3}{8} V^2 - (1-2+5V) \alpha \frac{1}{4} V + \\ &= (-36 P_1 \alpha^2 V^2 + 12 P_1 \alpha^2 V + 9 P_1 \alpha^2 - 4 P_1 \alpha^2 V + 6 P_1 \alpha^2 V + 27 P_1 \alpha^2 V^2) \mu^2 + \\ &= (-18 P_1 \alpha^2 V + 54 P_1 \alpha^2 V - 18 P_1 \alpha^2 V + 18 P_1 \alpha^2 V + 54 P_1 \alpha^2 V^2) \\ &= 72 P_1 \alpha^2 V + 72 P_1 \alpha^2 V + 48 P_1 \alpha^2 V + 18 P_1 \alpha^2 V^2 = \\ &= 198 P_1 \alpha^2 V + 18 P_1 \alpha^2 V^2 = 12 P_1 \alpha^2 V + 27 P_1 \alpha^2 V^2 = \\ &= 27 P_1 \alpha^2 V^2 + 12 P_1 \alpha^2 V \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_1 &= (-2\beta - 2 + 3\alpha) \\ P_2 &= (-3\beta - 2 + 3\alpha) \\ P_3 &= (-4\beta - 2 + 3\alpha) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (6^2 \Gamma_{\mu\nu} \partial^\mu \partial^\nu) = -6 u_0^2 u_2^2 (3V-2\beta) + 3u_0^2 u_1^2 (3V-3\beta) \rho^2 + \\ & (36 u_0^2 u_2^2 \rho^2) (3V-4\beta) + 36 u_0^2 u_1^2 (3V-4\beta) \rho^2 + \\ & (60 u_0^2 u_1^2) (3V-5\beta) + 240 u_0^2 u_2^2 (3V-5\beta) \rho^2 + \\ & (36 u_0^2 u_1^2) (3V-6\beta) + 30 u_0^2 (3V-7\beta) + 90 u_0^2 u_2^2 (3V-8\beta) \rho^2 \\ & + 180 u_0^2 u_1^2 u_2^2 (3V-9\beta) \rho^2 + O(\mu^5) \end{aligned}$$
$$I_{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(-3 \frac{v}{u-1} \right) = -3 \lim_{t \rightarrow \infty} \left(-3 \frac{v}{u-1} + 2 \frac{11}{u-1} \right) \rho^2 + O(\rho^4)$$

$$\begin{aligned} (\partial^2)^2_{\mu\nu}(\partial^2)^2_{\rho\sigma} &= \frac{2\alpha_0^3}{(\alpha-1)^2} \left(-\frac{3\nu-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right) (3\nu-1+\alpha)\nu + \\ &+ 3 \frac{\alpha_0^2}{\alpha-1} \left(-\frac{3\nu-2\beta-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right) (3\nu-2\beta-1+\alpha)(3\nu-2\beta) \rho^2 + \\ &+ \frac{\alpha_0}{\alpha-1} \left(-\frac{3\nu-4\beta-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right) (3\nu-4\beta-1+\alpha)(3\nu-4\beta)(\nu^2+\alpha\theta\alpha-4) \rho^4 + O(\rho^6) \end{aligned}$$

Друга похідна по густині ρ

$$\begin{aligned} (\partial^2 E_\phi / \partial \rho^2) &= -6 \frac{a_0^2}{a_0^2 - a_1^2} \frac{\left(-\frac{3\nu - 2\beta}{\alpha - 1} - 1 \right)}{\alpha - 1} (3\nu - 2\beta) \\ &\quad - 36 \frac{a_0 a_1}{a_0^2 - a_1^2} \frac{\left(-\frac{3\nu - 4\beta}{\alpha - 1} - 1 \right)}{\alpha - 1} (3\nu - 4\beta) (a_1^2 + a_0 a_1) \rho^2 + O(\rho^4) \end{aligned}$$

Крива співіснування

$$E_{\rho} = a_0^2 \left(-3 \frac{v}{\alpha-1} \right) + 3 a_0^2 \left(-3 \frac{v}{\alpha-1} + \frac{\beta}{\alpha-1} \right) a_0 \rho^2 + \left(3 a_0^2 \left(-3 \frac{v}{\alpha-1} + 2 \frac{\beta}{\alpha-1} \right) + 3 a_0 \left(-3 \frac{v}{\alpha-1} + 2 \frac{\beta}{\alpha-1} \right) a_0^2 \right) \rho^2 + O(\rho^3)$$

Друга похідна по ентропії s

$$\frac{1}{(n-1)^2} \left[-\frac{3\alpha-1+\alpha}{\alpha-1} - 1 \right] \frac{(3\alpha-1+\alpha)\alpha}{(n-1)^2} +$$

$$f(m) = \frac{n^2}{3} - \frac{n^2}{3} + 3 \cdot \frac{n^2}{3} = \frac{n^2}{3} + \frac{n^2}{3} = \frac{2n^2}{3} = \frac{2}{3}n^2 = O(n^2)$$

Друга похідна по густині ρ

[illegible]

$$\begin{aligned}
 & (90\, a_0\, P_1\, a_1^2 + 90\, a_1^2\, a_0\, P_1 + 180\, a_0\, a_1\, a_0\, P_1 + \\
 & + 180\, a_1\, P_1\, a_0\, a_1 + 90\, a_1\, P_1\, a_0^2 + 30\, a_1^3\, P_1 \\
 & + 180\, a_1\, P_1\, a_0\, a_1)\, \rho^4 + O(\rho^5) \\
 P_1 & = \gamma \\
 & \left(-3\frac{\gamma}{a-1} + 4\frac{\beta}{a-1} \right) \\
 P_2 & = \gamma \\
 & \left(-3\frac{\gamma}{a-1} + 5\frac{\beta}{a-1} \right) \\
 P_3 & = \gamma \\
 & \left(-3\frac{\gamma}{a-1} + 6\frac{\beta}{a-1} \right)
 \end{aligned}$$

Список використаних джерел

1. Паташинский А.З., Покровский В.А., Флуктуационная теория фазовых переходов, — Москва, Наука, 1982.
2. Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. — М.: Наука. — 1987. — 271 с.
3. Алехин А.Д., Рудников Е.Г. // Вестник Киевского университета. Физико-математические науки, 2005.— 4. — С. .
4. Альохін О.Д., Дорош А.К., Рудніков Є.Г. Критичний стан речовини в полі гравітації Землі. — Київ, Політехніка. 2008. 404 с.
5. Алехин А.Д., Цебенко А.В., Шиманский Ю.И. Сб. Физика жидкого состояния. 1979. — вып. 7. — С. 97—102.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. 3—е изд., доп. — М.: Наука, — 584 с.
7. Альохін О.Д., Рудніков Є.Г. // УФЖ 1995. — Т. 40, № 9. — С. 941-944.
8. О.Д. Альохін, Є.Г. Рудніков // Укр. Фіз. Журн. — 2002. — Т. 47, № 8. — С. 745-750.
9. Алехин А.Д., Абдикаримов Б.Ж., Рудников Е.Г. // Вестник Киевского университета. Физико-математические науки, 2007.— 4. — С. 287-289.
10. Алехин А.Д., Абдикаримов Б.Ж., Рудников Е.Г. // Теплофизика и Аэромеханика. 2010, N 1.
11. Алехин А.Д., Рудников Е.Г. // Физика аэродисперсных систем. Межведомственный научный сборник. 2006. - Вып. 43. - С. 67-74.
12. Е.Г. Рудников, А.Д. Алехин //Сб. трудов конференции "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах". Махачкала 7-10 сентября 2009. С. 266-269.
13. M.E. Fisher, G. Orkoulas // Phys. Rev. Lett 2000, 85, 696
14. О.Д. Альохін, Б.Ж. Абдікарімов, Ю.Л. Остапчук, Є.Г. Рудніков // УФЖ . -2009. - Т. 54, № 10. - С. 995-998

Надійшла до редколегії 07.06.2010

УДК 621.762

Тоцький І. М. асп.,
Казо І. Ф. к.ф.м.н.,
Попов О. Ю. к.ф.м.н.,
Макара В. А. член. Кор. НАН України, д.ф.м.н.,
проф.

Розподіл мікротвердості двофазних композитних систем

Розроблено загальний підхід до прогнозування розподілу мікротвердості двофазного композиту, який враховує розміри зерен, об'ємні частки фаз, мікротвердості окремих фаз та навантаження на індентор. Для апробації розробленого метода було досліджено розподіл мікротвердості серії зразків системи $Ni - Ni_3B$ з різним вмістом складових. Мікроструктуру та фазовий склад виготовлених композитів визначено за допомогою оптичних та рентгенодифракційних методів. Одержані результати підтверджують припущення про кореляцію між структурними параметрами композиту та виглядом гістограм мікротвердості. Таким чином, аналіз мікромеханічних характеристик зразка за допомогою представленої моделі може дати додаткову інформацію щодо структурно-фазового стану досліджуваного матеріалу.

Ключові слова: композиційні матеріали, розподіл мікротвердості, структура композитів.

E-mail: totigor@univ.kiev.ua

Стан проблеми

Аналіз публікацій, присвячених дослідженню структури та властивостей композиційних матеріалів показав, що механічні властивості суттєво залежать від фазового складу та структури композиту [1, 4, 7, 8, 9]. Також вказується, що розподіл значень фізичних величин, які визначаються в локальному об'ємі в багатьох випадках не відповідає нормальному, що призводить до певної некоректності описання відповідної фізичної величини за допомогою середнього значення. В.В. Леонов [8] розділяє аналіз мікротвердості окремих фаз та інтегральну мікротвердість.

В роботі [4] представлено результати металографічних та рентгенодифракційних досліджень вихідного та переплавленого зразків

Totsky I. M. PhD stud.,
Kazo I. F. PhD,
Popov O. Yu. PhD,
Makara V. A. Corresponding Member for N.A.S. Ukrainian, Prof.

Microhardness distribution of two phase composites systems

A theoretical model of two phase composite microhardness distribution is developed. Microhardness, phase composition and structure of $Ni - Ni_3B$ specimens is investigated with optical microscopy and X-ray diffraction for the experimental checking of the model. The result of the investigations is the conclusion that microhardness distribution essentially depends on structure of composite. So analyzing of experimental results with the represented model may provide us additional information about the structure of the material.

Key Words: composite, microhardness distribution, composite structure.

системи $Co-Cr-Mo$. Проведені дослідження показали, що інтегральний фазовий склад після перегрівки не змінився, але відбулось збільшення розміру зерен в композиті, що підтверджується металографічними та локальними методами фазового дослідження. Відповідно до структурних змін спостерігалась суттєва зміна в розподілі мікротвердості, в той час як середні значення мікротвердості після переплавлення зменшились лише на 3-8 %.

Таким чином статистичні підходи до дослідження фізичних величин в композиційних матеріалах, що піддаються локальному аналізу можуть бути більш інформативними ніж дослідження середніх значень. Зокрема цікавими представляються дослідження розподілу досліджуваної величини та її дисперсії.

Одним з локальних методів дослідження композиційних систем є визначення мікротвердості. Мікротвердість складним чином залежить від властивостей композиційного матеріалу та умов мікроіндентування, тому кількісне прогнозування мікротвердості робить необхідним одночасне врахування багатьох параметрів. Для встановлення залежності мікротвердості від параметрів речовини проводять дослідження температурних, часових, динамічних та концентраційних кривих. Узагальнені результати цих досліджень можна знайти в роботах [2, 3, 7, 8].

Для розрахунку мікротвердості двофазних сплавів необхідно враховувати зміну мікротвердості фаз за рахунок розчинення іншої компоненти, вплив міжзеренних границь та наявність термічних напружень [8].

Для кількісного обрахунку збільшення мікротвердості за рахунок термічних напружень можна скористатись формулами, запропонованими авторами [8] для випадку евтектичних сплавів:

$$\Delta H_v = \frac{b \cdot \Delta \alpha (T_E - T)}{b_1 + b_2}, \quad (1)$$

де b - коефіцієнт пропорційності;

$\Delta \alpha$ - різниця коефіцієнтів термічного розширення двох фаз;

T_E - температура плавлення;

b_1, b_2 - коефіцієнти стискуваності відповідних фаз.

Вплив взаємної розчинності компонент можна визначити наступним чином:

$$\Delta H_v = a \cdot x_0 \cdot \exp\left\{-\frac{\Delta H}{RT}\right\}, \quad (2)$$

або:

$$\Delta H_v = \sum \frac{a \cdot 2 \cdot \gamma_i \cdot M \cdot x_{0i}}{\lambda \cdot \rho \cdot R \cdot T_E} \cdot \exp\left\{-\frac{\Delta H_i}{RT}\right\}, \quad (3)$$

де a - коефіцієнт пропорційності;

x_{0i} - розчинність i -ї компоненти;

ΔH_i - ентальпія розчинення;

γ_i - міжфазна енергія на границі тверде тіло-рідина;

M, ρ - молекулярна маса та густина;

λ - період чергування фаз.

Зміну мікротвердості при збільшенні об'єму міжфазних границь можна визначати за наступною формулою:

$$\Delta H_v = \frac{c \cdot \gamma_{\text{фг}}}{\lambda}, \quad (4)$$

де $\gamma_{\text{фг}}$ - енергія міжфазних границь.

Знаючи відповідні коефіцієнти та величини ми можемо розрахувати мікротвердість евтек-

тичного сплаву. У випадку механічної суміші формулу (3) можна записати у вигляді суми мікротвердостей окремих фаз, помножених на відповідні об'ємні коефіцієнти.

Наведені підходи до розрахунку мікротвердості композиту можуть бути застосовані лише для досить обмеженої кількості випадків, коли утворений композит знаходиться у термодинамічно рівноважному стані. При виготовленні тугоплавких керамік такої умови досягти надзвичайно важко. Відомо, що морфологія, концентрація розчинених компонентів в кожній з фаз, термонапруження, стан міжфазних границь та інші параметри композиту можуть суттєво змінюватись при відносно малих змінах умов синтезу. Тому ми розв'язали імовірнісну задачу яка дозволяє розрахувати розподіл мікротвердості, враховуючи як параметри системи так і умови вимірювання.

Розподіл мікротвердості композиційного матеріала

Розподіл мікротвердості однофазних матеріалів (кремній, сталі) за даними [2], представляє собою пік з одним максимумом, який цілком коректно описувати розподілом Гауса. Саме такий профіль розподілу ми обрали для опису розподілів окремих фаз. Статистичні характеристики цього розподілу - математичне сподівання та дисперсія - характеризують, відповідно, середню мікротвердість матеріалу та розкид значень досліджуваної величини. У випадку вимірювання мікротвердості дисперсія (σ^2) залежить від неоднорідності та дефектності структури, а також від похибки вимірювання. В загальному випадку розподіл мікротвердості гетерофазного матеріала визначається мікротвердостями фаз та границі розділу. В роботі [8] для розрахунку мікротвердості композитного матеріалу вводиться поняття об'єму та мікротвердості міжфазної границі. Тоді інтегральну мікротвердість можна записати наступним чином:

$$H_v = C_1 H_1 + C_2 H_2 + C_3 H_3, \quad (5)$$

де $H_1, H_2, H_3, C_1, C_2, C_3$ - мікротвердості та об'ємні частки фаз та границі відповідно.

В наслідок складності визначення значень мікротвердості границі ми обмежимося випадком великих зерен ($C_1 \gg C_3 \ll C_2$). Враховуючи, що об'єм границі при розмірах зерен порядку 10 мкм є малим параметром по відношенню

до об'єму фаз таке спрощення є справедливим для багатьох практично важливих систем.

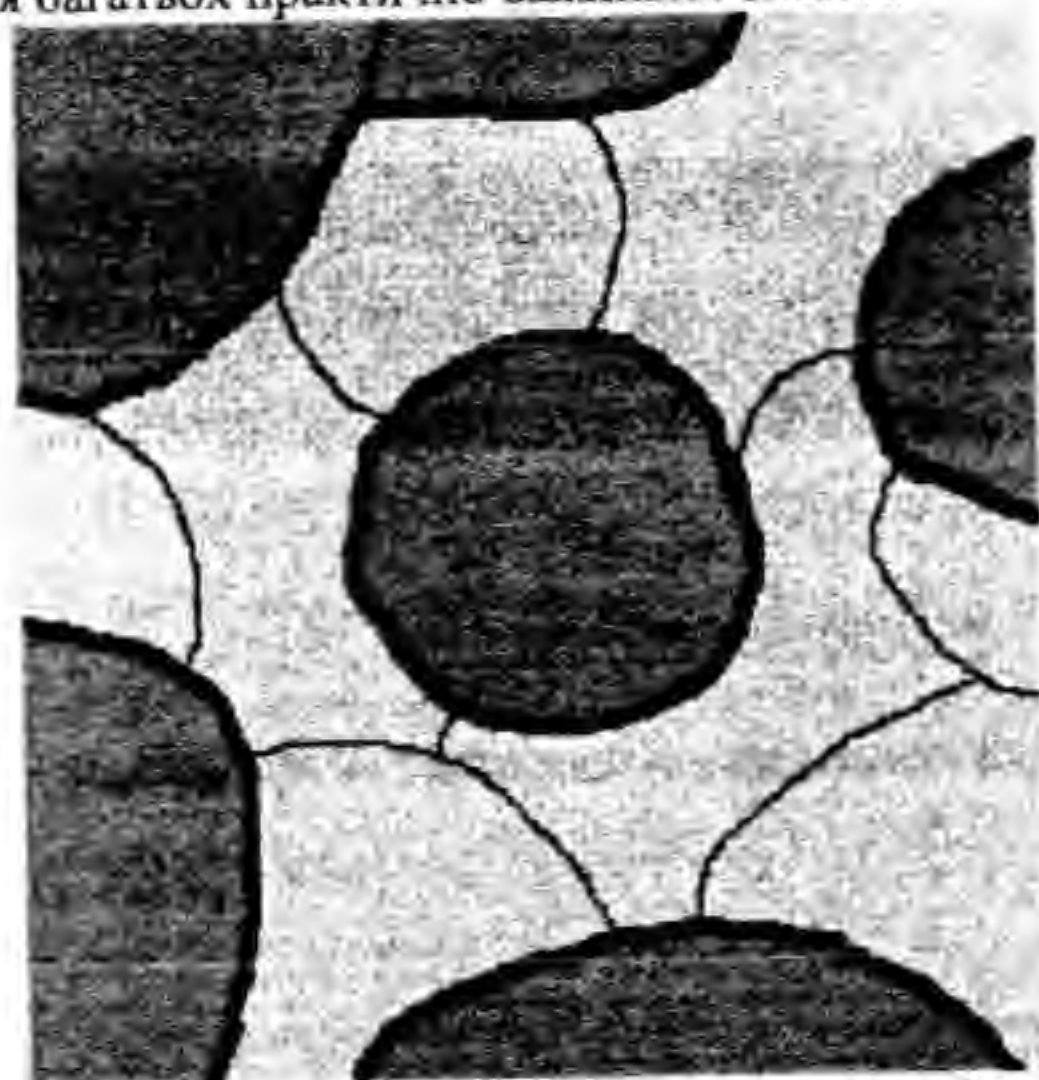


Рис. 1 Структура двофазного матеріалу (Товстими чорними лініями позначено область міжфазних границь, а тонкими лініями позначено границі між зернами однієї фази).

Розглянемо одиничний об'єм V довільного двофазного матеріалу (рис. 1). Площу міжфазної границі можна визначити за формулою [11]:

$$S = \frac{3 \cdot \eta_1 \cdot \eta_2}{R_2(1 - \eta_2(1 - R_1/R_2))}, \quad (6)$$

Де R_1 , R_2 , η_1 та η_2 – середні радіуси зерен та об'ємні частки 1 та 2-ї фази, відповідно. Скориставшись цим виразом визначимо геометричні імовірності попадання індентора в область 1 (W_1) та 2-ї (W_2) фази та на міжфазну границю (W_{12}):

$$\begin{cases} W_1 = \eta_1 - S \cdot d_1 \\ W_2 = \eta_2 - S \cdot d_2 \\ W_{12} = S(d_1 + d_2) \end{cases}, \quad (7)$$

де d_1 та d_2 – діагоналі відбитка мікротвердості 1 та 2-ї фази.

Функцію розподілу мікротвердості $K(H)$ запишемо у вигляді [5]:

$$\begin{aligned} K(H) &= K_1(H - H_1) + K_2(H - H_2) + K_{12}(H_{11}, H_{22}) \\ \begin{cases} K_1(H - H_1) = \frac{W_1 \cdot \Delta}{\sigma_1 \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{H - H_1}{\sigma_1}\right)^2\right) \\ K_2(H - H_2) = \frac{W_2 \cdot \Delta}{\sigma_2 \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{H - H_2}{\sigma_2}\right)^2\right) \\ K_{12}(H_{11}, H_{22}) = \frac{W_{12} \cdot \Delta}{\sigma_{12} \cdot \sqrt{2\pi} (H_{22} - H_{11})} \cdot \int_{H_{11}}^{H_{22}} \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{x - H}{\sigma_{12}}\right)^2\right) dx \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

де H_1 , H_2 , σ_1 , σ_2 – середні значення мікротвердості та середньоквадратичні відхилення складових композиту; Δ – нормуючий множник (в нашому випадку він дорівнює кроку гістограми). H_{11} , H_{22} – межі інтегрування для відбитків, що потрапили на границю розділу фаз. У випадку коли розміри відбитків менші за розміри зерен H_{11} та H_{22} набувають значень мікротвердостей складових композиту H_1 та H_2 відповідно. Коли розміри відбитка значно перевищують розміри зерен тоді значення H_{11} та H_{22} наближуються до середнього значення мікротвердості композиту H_{12} . В даних розрахунках використано функцію:

$$H = \begin{cases} H_{12} \text{ при } \eta/S \geq d \\ H_{12} + (H - H_{12}) \cdot \exp\left\{\frac{\eta - S \cdot d}{\eta}\right\} \text{ при } \eta/S < d \end{cases}$$

Функція розподілу мікротвердості $K(H)$ (6) складається з трьох компонентів. Перші дві компоненти описують внесок в розподіл мік-

ротвердості відбитків, що попадають в першу та другу фази. Третя компонента описує внесок в розподіл мікротвердості відбитків, що потрапили на границю розділу між фазами.

Для розрахунку похибки визначення мікротвердості скористаємось формулою, запропонованою в [3]:

$$\Delta H = \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{\sigma}{H} \right)^2, \quad (9)$$

де $\alpha=1,65$;

n – кількість вимірів, що відповідають інтервалу (H_{max} , H_{min});

H – середнє значення мікротвердості;

σ – середнє квадратичне відхилення, визначене для рівномірного розподілу мікротвердості в інтервалі (H_{max} , H_{min}) [10];

$$\sigma = \begin{cases} \frac{1}{H_{\max} - H_{\min}} \left| x - H \left(\frac{H_{\max} - H_{\min}}{2} \right) \right| \\ \alpha \left| x - H \right| \frac{(H_{\max} - H_{\min})}{2} \end{cases}, \quad (10)$$

або підставивши (8) в (7) отримаємо

$$\Delta H = 4 \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{H_{\max}^2 - H_{\min}^2} \right)^2. \quad (11)$$

Експериментальні результати та їх обговорення

Для апробації розробленого метода прогнозування мікротвердості було досліджено розподіл мікротвердості серії зразків системи $Ni-Ni_3B$. Вибір матеріалів даного типу пов'язано з значною різницею мікротвердості металічної та керамічної складової, що дозволяє експериментально спостерігати розподіл мікротвердості характерний для композитних матеріалів.

Дослідні композити було виготовлено методом дугової плавки сумішей $Ni-B-C$ в атмосфері кисню при різних умовах синтезу. Рентгенографічними методами було встановлено, що зразки складаються з двох фаз Ni та Ni_3B різного складу. Відсутність фаз, які містять вуглець пояснюється його розчиненням в інших фазах або частковим заміщенням атомів бору в борді нікелю. Металографічні дослідження підтвердили наявність лише двох фаз з достатньо крупнозернистою структурою (рис.2). Визначення параметрів структури (співвідношення об'ємних часток компонентів, середні значення розмірів зерен різних фаз) проводилось згідно з методикою, описаною в [10]. Одержані результати наведено в табл. 1. Дослідження мікротвердості окремих фаз композиту та розподілу мікротвердості матеріалу виконано на приладі ПМТ-3 за стандартною методикою.

Для перевірки справедливості модельних підходів було проведено порівняння розрахункових та експериментальних розподілів мікротвердості при різних навантаженнях. Навантаження на індентор обирались з наступних міркувань. При навантаженні 25 г розміри відбитків мікротвердості для обох фаз менші за середні значення розмірів фаз. При навантаженні 100 г середні значення розмірів нікелевої фази стають меншими за діагональ відбитка. При навантаженні 720 г розміри відбитка значно перевищують розміри зерен обох фаз. Для перевірки структурно фазової чутливості даного

методу було досліджено розподіли мікротвердості матеріалів з різним відносним вмістом компонентів при малому навантаженні.

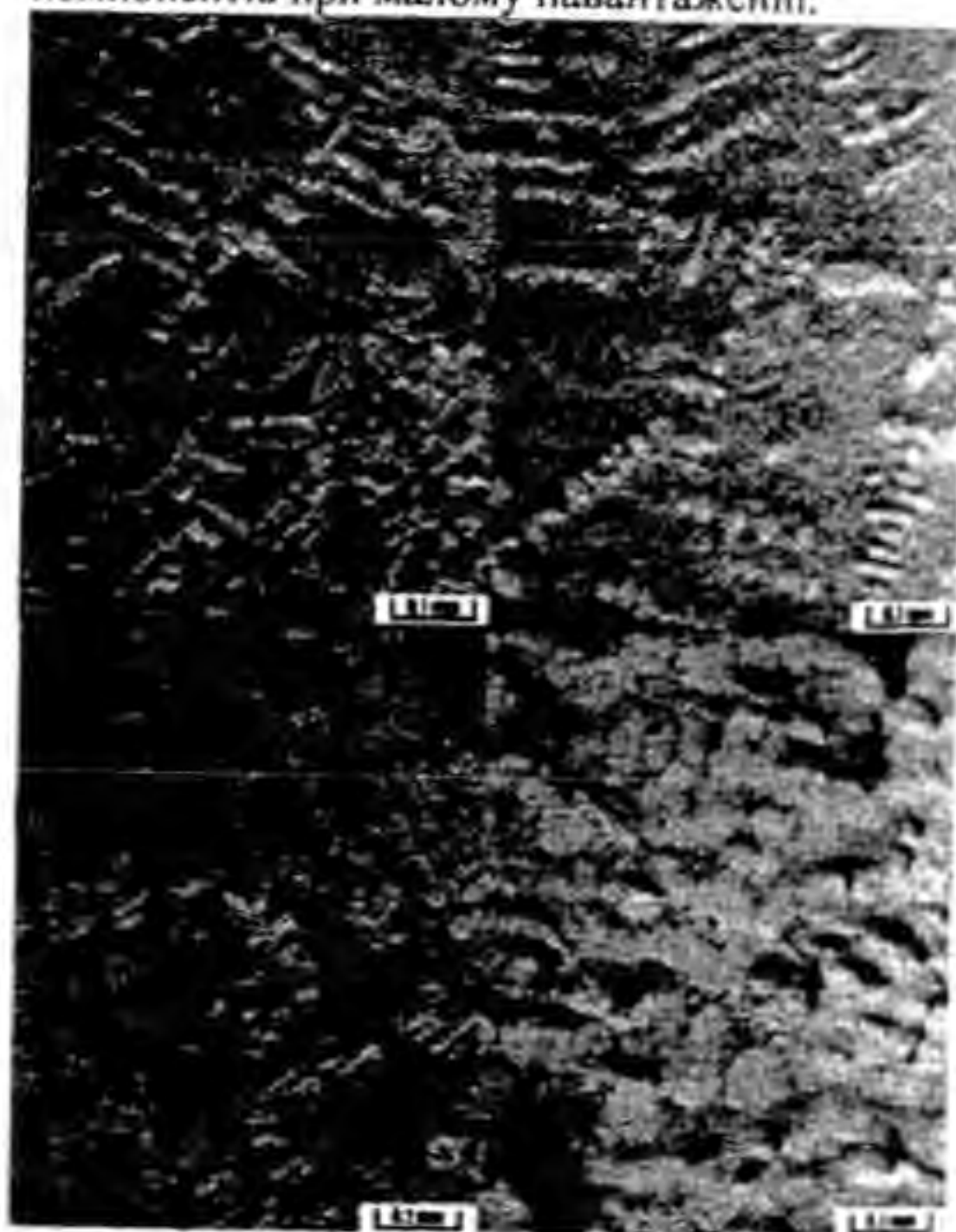


Рис. 2 Структура досліджуваних зразків: склад а – $Ni-19\% Ni_3B-81\%$; б – $Ni-22\% Ni_3B-78\%$; в – $Ni-40\% Ni_3B-60\%$; г – $Ni-79\% Ni_3B-21\%$.

Таблиця 1
Об'ємні частки (η) та середні розміри зерен ($2 \cdot R$) досліджуваних композитів

	Ni		Ni_3B	
	η_1	$2 \cdot R_1$, мкм	η_2	$2 \cdot R_2$, мкм
а	0,19	17,9	0,81	74,0
б	0,22	15,5	0,78	55,6
в	0,40	29,1	0,60	44,0
г	0,79	39,0	0,21	10,1

Отримані результати представлено на рис. 3 та 4. Як можна побачити з рис. 3, при малому навантаженні на індентор спостерігається розподіл мікротвердості з двома піками, які приблизно співпадають з мікротвердостями складових композиту. При більшому навантаженні (100 г) розподіл складається з одного піка який відповідає фазі Ni_3B та «хвоста», що досягає значень мікротвердості характерних для нікеля. При навантаженні на індентор 720 г профіль розподілу мікротвердості представляє

собою розподіл близький до нормального. В рамках даної моделі така картина розподілу пояснюється великими розмірами відбитка, що значно перевищують розміри зерен.

Складність прогнозування розподілу структурночутливих величин в композиційних матеріалах, як зазначалося раніше, пов'язана з утворенням фаз в метастабільному стані. В нашому випадку мікротвердість нікелю в різних зразках знаходиться в межах від 1,8 до 2,8 ГПа, а бориду нікеля - від 7,9 до 9,2 ГПа. Зміна мікротвердості нікелевої фази корелює із зміною періодів кристалічної ґратки відносно чистої фази нікеля, що свідчить про збільшення мікротвердості за рахунок збільшення концентрації розчиненої домішки. Мікротвердість Ni_3B на 10-15 % менша за довідникові дані, а дисперсія мікротвердості на порядок переви-

щує дисперсію характерну для окремих фаз. Рентгенографічний наліз зразків 2, 3 та 4 показав, що зміна періодів кристалічної ґратки відносно еталонних значень проявляє однакову пропорційність $\Delta a:\Delta b:\Delta c=1:8:5$.

Для зразка складу а зміна періодів кристалічної ґратки відносно еталону еквівалентна до різниці періодів фази Fe_3C та метастабільної фази Fe_3B із ромбоєдричною структурою Fe_3C [6].

Така відповідність у зміні періодів може свідчити про можливість існування метастабільної фази Ni_3C із структурою Ni_3B . На підставі наведених результатів нами було зроблено припущення, що така поведінка мікротвердості пов'язана з частковим заміщенням атомів бору вуглецем.

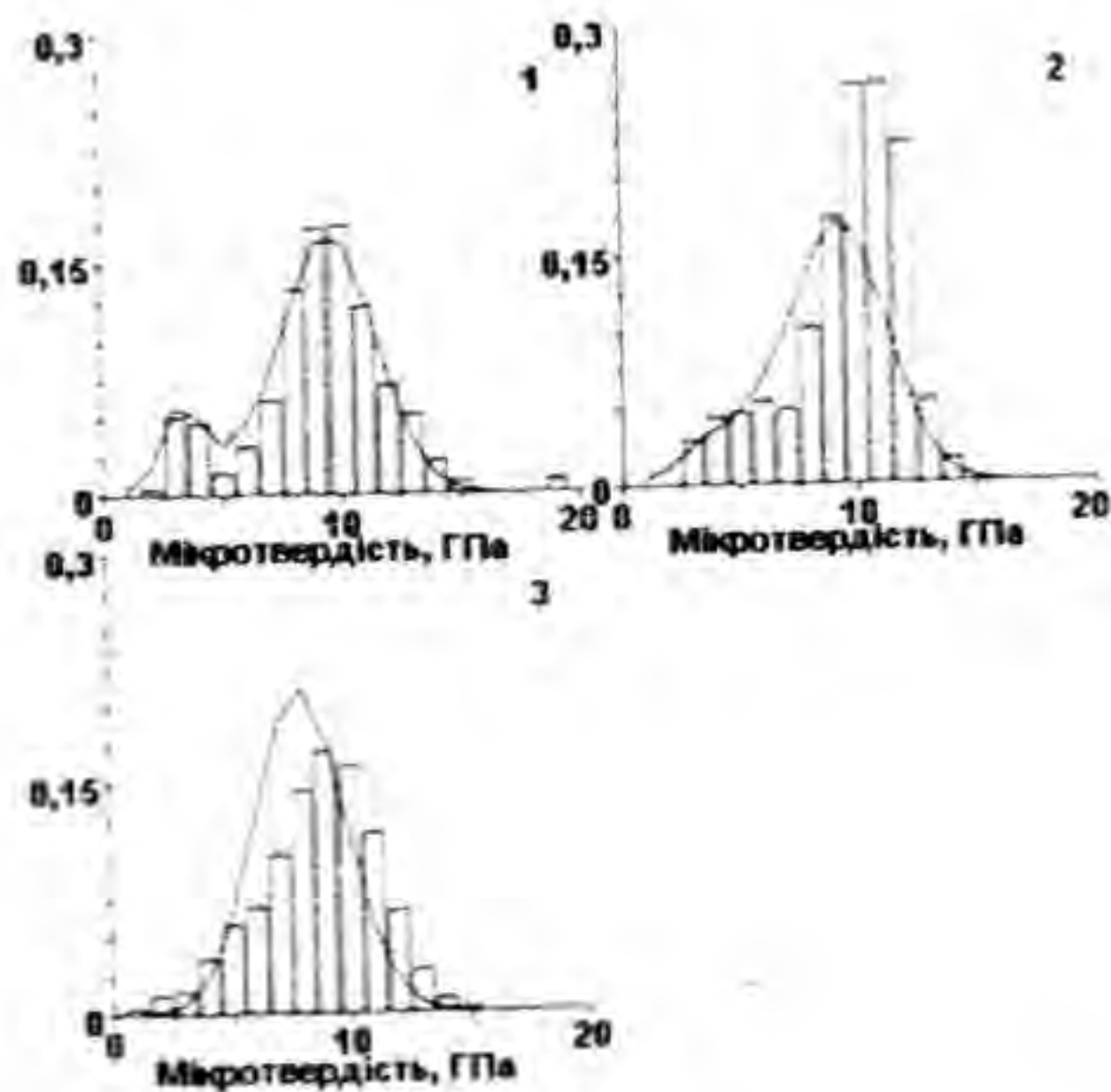


Рис. 3 Порівняння розподілів мікротвердості для зразка складу $Ni - 19 \% Ni_3B - 81 \%$ при різних навантаженнях на індентор 1) - 25 г, 2) - 100 г та 3) - 720 г (лінія - розрахований розподіл; гістограма - експериментальний).

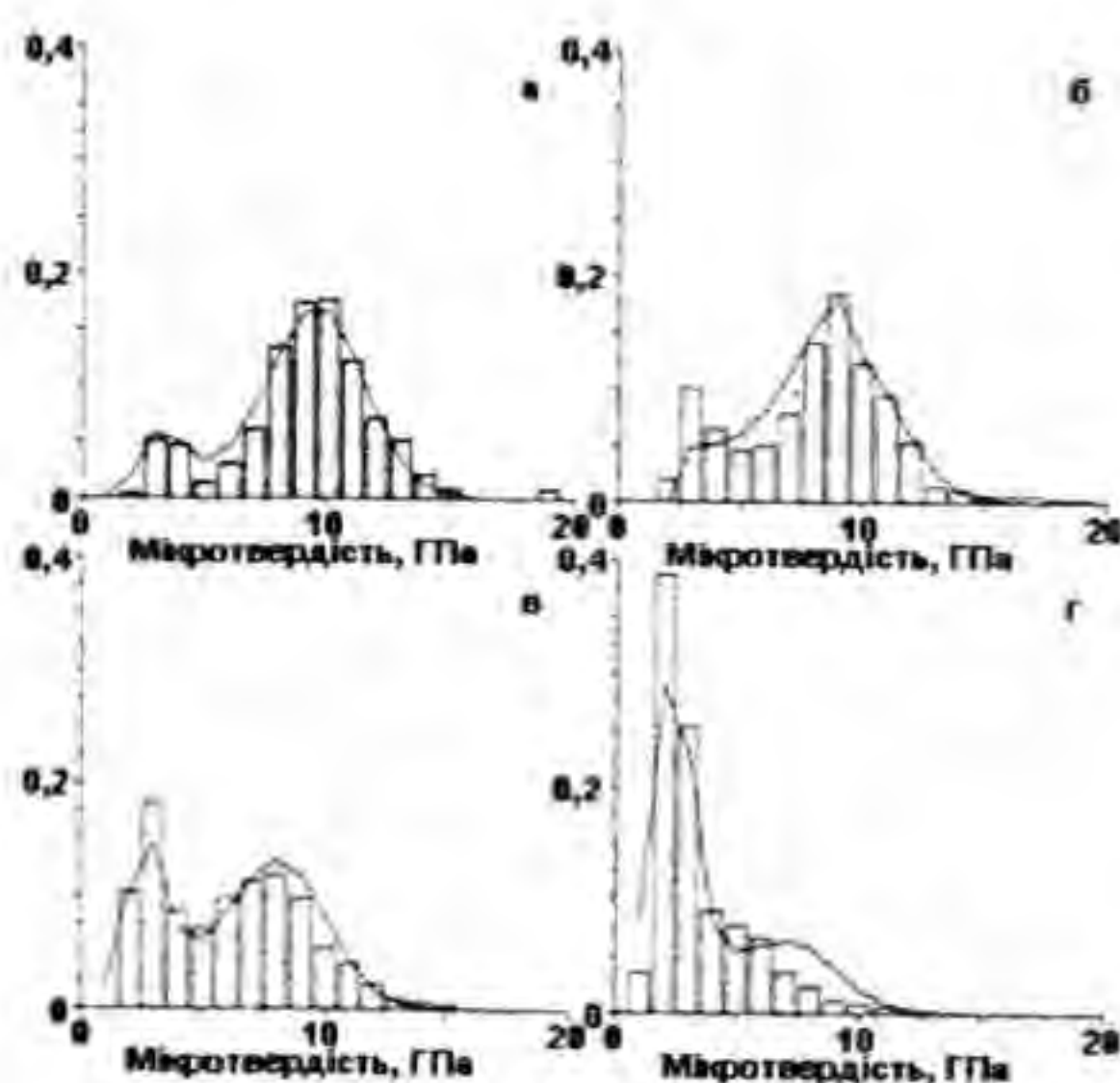


Рис. 4 Порівняння розподілів мікротвердості при навантаженні на індентор 25 г для зразків з різним складом: а) – Ni-19 % Ni₃B-81 %; б) – Ni - 22 % Ni₃B-78 %; в) – Ni- 40 % Ni₃B-60 %; г) – Ni-79 % Ni₃B-21 %, (лінія - розрахований розподіл; гістограма – експериментальний)

Висновки

1. Представлено модель прогнозування розподілу мікротвердості двофазного композиту, яка враховує розміри зерен, об'ємні частки фаз, мікротвердості окремих фаз та навантаження на індентор.
2. Досліджено матеріал системи Ni- Ni₃B з різним вмістом складових.
3. Порівняння гістограм мікротвердості, побудованих за допомогою представленої моделі та експериментально одержаних розподілів мікротвердості підтверджує припущення про кореляцію між параметрами композиту та виглядом гістограм мікротвердості.

Список використаних джерел

1. Васильковская М.И., Пушкан Б.М., Марончук Э.Е. Пластичность и хрупкость полупроводниковых материалов при испытаниях на микротвердость. - Кишинев, 1984.
2. Глазов В.М., Вигдорович В.Н. Микротвердость металлов. - М., 1969.
3. Григорович В.К. Твердость и микротвердость металлов. - М., 1976.
4. Доценко В.И., Чайка И.Н., Брауде И.С. и др. Исследования структуры литого сплава Co-

Cr-Mo. // Металлофизика и новейшие технологии. - 2002. - № 1

5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. Для научных работников и инженеров. - М., 1978.

6. Кузьма Н.Ф., Чабан Н.Ф. Двойные и тройные системы, содержащие бор: Справ. изд. -М. 1990.

7. Курнаков Н.С. Аномальные свойства эвтектик высокой дисперсности // Избр. тр. М. - 1961. - Т. 19.

8. Леонов В.В. Микротвердость одно- и двухфазных сплавов. - Красноярск, 1990.

9. Подрезов Ю.Н., Даниленко Н.И., Борисовская Е.Н. и др. Анализ деформационного упрочнения титана в широком интервале деформаций по результатам испытаний на растяжение, сжатие и твердость.// Металлофизика и новейшие технологии, - 2004. - № 5.

10. Приборы и методы физического металловедения. / под ред. Ф. Вейнберга - М., 1973.

11. Солонин С.М. Расчет величины межфазной поверхности двухкомпонентных порошковых смесей. // Порошковая металлургия. - 1994. - № 3/4.

Надійшла до редколегії 11.03.2010

УДК 536.75

Храпійчук Г.В., аспірант
Чалий О.В., проф., д.ф.-м.н.

Вплив бародифузії на активний транспорт іонів через клітинну мембрану

Розглянуто дію ультразвукового випромінювання як впливової рушійної сили бародифузійних явищ. Теоретично встановлено залежність значення мембранного потенціалу при активному перенесенні іонів натрію і калію від інтенсивності ультразвуку між позаклітинним та внутрішньоклітинним середовищами.

Ключові слова: бародифузія, ультразвукове випромінювання, клітинна мембрана.

G.V. Khrapijchuk, graduate student
A.V. Chalyi, professor

Barodiffusion influence on active transport through the cell membrane

The influence of ultrasound as the significant motive force of barodiffusion phenomena at the processes of active transport of Na^+ and K^+ ions through the cell membrane is considered. The dependence of membrane potential is theoretically estimated at active transport of natrium and potassium ions on the ultrasound intensity and pressure overfall between external and internal medium of the cell.

Key words: barodiffusion, ultrasound, cell membrane.

*E-mail: shlihta@ukr.net

1. ВСТУП

Бародифузія – це процес виникнення дифузійного потоку речовини під дією градієнтів тиску.

Ультразвук належить до фізичних факторів, застосування яких викликає численні фізичні та біологічні зміни в живих системах організму [1-3]. Ультразвукова хвиля обумовлює появу в просторі ділянок більшого та меншого тисків, тому її можна вважати рушійною силою бародифузійних явищ [4-6].

Мембрана клітини є живою системою, основна функція якої полягає в тому, щоб підтримувати стаціонарний потенціал при умові протікання дифузійних процесів між внутрішнім і зовнішнім середовищами. Пониження абсолютного значення електричного потенціалу на мембрані можна компенсувати за рахунок бародифузійних явищ, викликаних додатковим перепадом тисків, що виникає в біологічному середовищі клітини внаслідок дії ультразвукової хвилі (див., наприклад, [3]).

Таким чином, клітинна мембрана розділяє дві фази, для яких характерні різні і концентрації, і потенціали, і тиски, але на сьогоднішній день не було враховано вплив останнього параметру на величину мембранного потенціалу.

На відміну від пасивного при активному транспорті вектор потоку речовини $\vec{J}$ напрямлений із області, де концентрація частинок даного сорту менша, в область, де їх концентрація більша, тобто за напрямком вектора градієнта концентрацій $\vec{\nabla}c$. Такий перенос супроводжується зменшенням величини градієнта концентрацій, а забезпечується білками переносниками (АТФ-ази), діяльність яких потребує певних затрат енергії. За рахунок механізму активного транспорту забезпечується сталі різниці концентрацій і потенціалів на мембрані клітини, оскільки пасивне перенесення приводить до вирівнювання концентрацій і потенціалів з обох боків мембрани [7-8].

У [9] нами було теоретично встановлено, що стаціонарний потенціал спокою при пасивному транспорті (проти вектора градієнта концентрацій) збільшує своє абсолютне значення під дією бародифузійних явищ, які виникають внаслідок дії ультразвуку. Дана ж робота присвячена дослідженню впливу бародифузії на стаціонарний електричний потенціал при активному транспорті іонів Na^+ і K^+ через мембрану клітини в напрямку векторів градієнтів їхніх концентрацій.

Представлено: акад. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Л.А. Булавін

2. ЗАЛЕЖНІСТЬ СТАЦІОНАРНОГО МЕМБРАННОГО ПОТЕНЦІАЛУ ВІД ЗМІНИ ТИСКУ

Для опису стаціонарного потенціалу при активному транспорті іонів Na^+ і K^+ використаємо рівняння Томаса (див., наприклад, [10]), яке можна отримати з відомого рівняння Гольдмана-Ходжкіна-Катца, нехтуючи внесками всіх іонних струмів відтоку (хлорного струму та інших), а також враховуючи стехіометричне співвідношення для іонних струмів Na^+ і K^+ в одному циклі роботи натрій-калієвого насосу, а саме: $I_{Na}/I_K = \xi = 3/2$. В такому наближенні отримуємо наступний вираз для абсолютного значення електричного мембранного потенціалу, який враховує активний транспорт іонів Na^+ і K^+ :

$$\varphi_{act} = \frac{RT}{F} \ln \frac{\xi P_K [K]_i + P_{Na} [Na]_i}{\xi P_K [K]_e + P_{Na} [Na]_e}. \quad (1)$$

У даній формулі використані такі позначення: $\varphi_{act} = |\varphi_e - \varphi_i|$ – різниця електричних потенціалів між зовнішнім і внутрішнім середовищем клітини; множник $\frac{RT}{F} \approx 25,2$ мВ при температурі $T = 293$ К; $[K]_i$, $[Na]_i$ та $[K]_e$, $[Na]_e$ – концентрації іонів калію і натрію всередині та зовні клітини, P_K і P_{Na} – проникності іонів, які визначають швидкість їх проходження крізь плазматичні мембрани клітини.

Виконаємо розрахунок бародифузійного внеску до мембранного потенціалу Томаса з урахуванням активного транспорту іонів Na^+ і K^+ за формулою (2) по аналогії з обчисленням цього внеску до стаціонарного потенціалу Гольдмана-Ходжкіна-Катца в роботі [12]. Результат базується на наступних наближеннях: 1) сумарна густина струму, зумовлена потоками всіх іонів через мембрану, дорівнює нулеві, тобто $J_{sum} = \sum \bar{J}_i = 0$ де $\bar{J}_i = e \bar{I}_i$, e – величина елементарного заряду, I_i – дифузійні потоки іонів певного сорту; 2) іонний струм Na^+ напрямлений в клітину, а іонний струм K^+ – із клітини назовні; 3) потік іонів через біомембрану відбувається при наявності двох термодинамічних сил – градієнтів концентрації $\bar{\nabla} C$ та потенціалу $\bar{\nabla} \varphi$. Потенціал на мембрані при активному транспорті іонів Na^+ та K^+ під дією додаткового перепаду тиску на клітинні мембрани має вигляд:

$$\varphi_{act}(\Delta p) = \frac{RT}{F} \left[\ln \frac{t_1}{t_2} + \left(\frac{t_4}{t_1} + \frac{t_4}{t_2} f_0 - \frac{t_3}{t_1} \right) \Delta p \right], \quad (2)$$

де

$$f_0 = \frac{1}{\ln \frac{t_1}{t_2}} + \frac{t_1}{t_2 - t_1},$$

величини

$$t_1 = \xi P_K [K]_i + P_{Na} [Na]_i,$$

$$t_2 = \xi P_K [K]_e + P_{Na} [Na]_e,$$

$$t_3 = \xi P_K [K]_i \sigma_K + P_{Na} [Na]_i \sigma_{Na},$$

$$t_4 = \xi P_K [K]_e \sigma_K + P_{Na} [Na]_e \sigma_{Na}$$

встановлюють зв'язок між концентраціями іонів Na^+ і K^+ , їх проникностями та стехіометричним коефіцієнтом ξ . Що стосується кінетичних коефіцієнтів σ_K та σ_{Na} , які характеризують внески в дифузійні потоки іонів Na^+ і K^+ , обумовлені різницею тиску з обох боків мембрани, то їх оцінка може бути проведена подібно до розрахунків коефіцієнтів Соре при вивченні впливу термодифузійних явищ на електричні мембранні потенціали спокою (концентраційний та стаціонарний) з роботи [11]. Тоді слід очікувати, що їх величина у водних розчинах, які містять достатньо малі концентрації іонів Na^+ і K^+ , наближено дорівнює оберненому критичному тиску води $\sigma = \sigma_K = \sigma_{Na} = 4,6 \cdot 10^{-8} \text{ Па}^{-1}$.

Чисельне значення перепаду тиску Δp , що визначає додатковий внесок в мембранний потенціал від бародифузійних явищ згідно з виразом (2), можна обрахувати за наступною формулою

$$\Delta p = \sqrt{2 I \rho v}, \quad (3)$$

де I – інтенсивність, ρv – акустичний опір середовища (ρ – густина середовища, v – швидкість звуку). Оскільки $I \propto \omega^2$, де ω – частота ультразвукової хвилі, то тиск прямо пропорційний частоті. Результати даних обрахунків наведені нижче в таблиці 1.

У даній таблиці для визначеності розглянуто зміну тиску в крові при дії ультразвукових хвиль, враховуючи, що швидкість звуку в крові становить 1575 м/с, а густина – 1050 кг/м³ [12].

Таблиця 1. Значення додаткового перепаду тиску при дії ультразвуку різних інтенсивностях при сталій частоті

Інтенсивність УЗ, Вт/см ²	Перепад тиску Δp , Па
0,12	$6,30 \cdot 10^4$
0,25	$9,09 \cdot 10^4$
0,5	$1,29 \cdot 10^5$
1	$1,82 \cdot 10^5$
10	$5,75 \cdot 10^5$
100	$1,82 \cdot 10^6$

За формулою (2) та отриманими значеннями інтенсивності в таблиці 1 побудуємо графік залежності електричного мембранного потенціалу, котрий враховує активний транспорт іонів K^+ і Na^+ , від інтенсивності ультразвуку (Рис.1) для мембрани еритроцитів при температурі середовища $T_f = 293$

К. Для цього об'єкту маємо [6]: $[K]_i = 139$ ммоль/л і $[Na]_i = 19$ ммоль/л – концентрації іонів K^+ і Na^+ усередині клітини; $[K]_e = 5$ ммоль/л і $[Na]_e = 155$ ммоль/л – концентрації цих іонів у зовнішньому розчині. Щодо відношення проникностей P_K/P_{Na} , то будемо вважати його рівним $P_K/P_{Na} = 1/0,04$ [див., наприклад, 12].

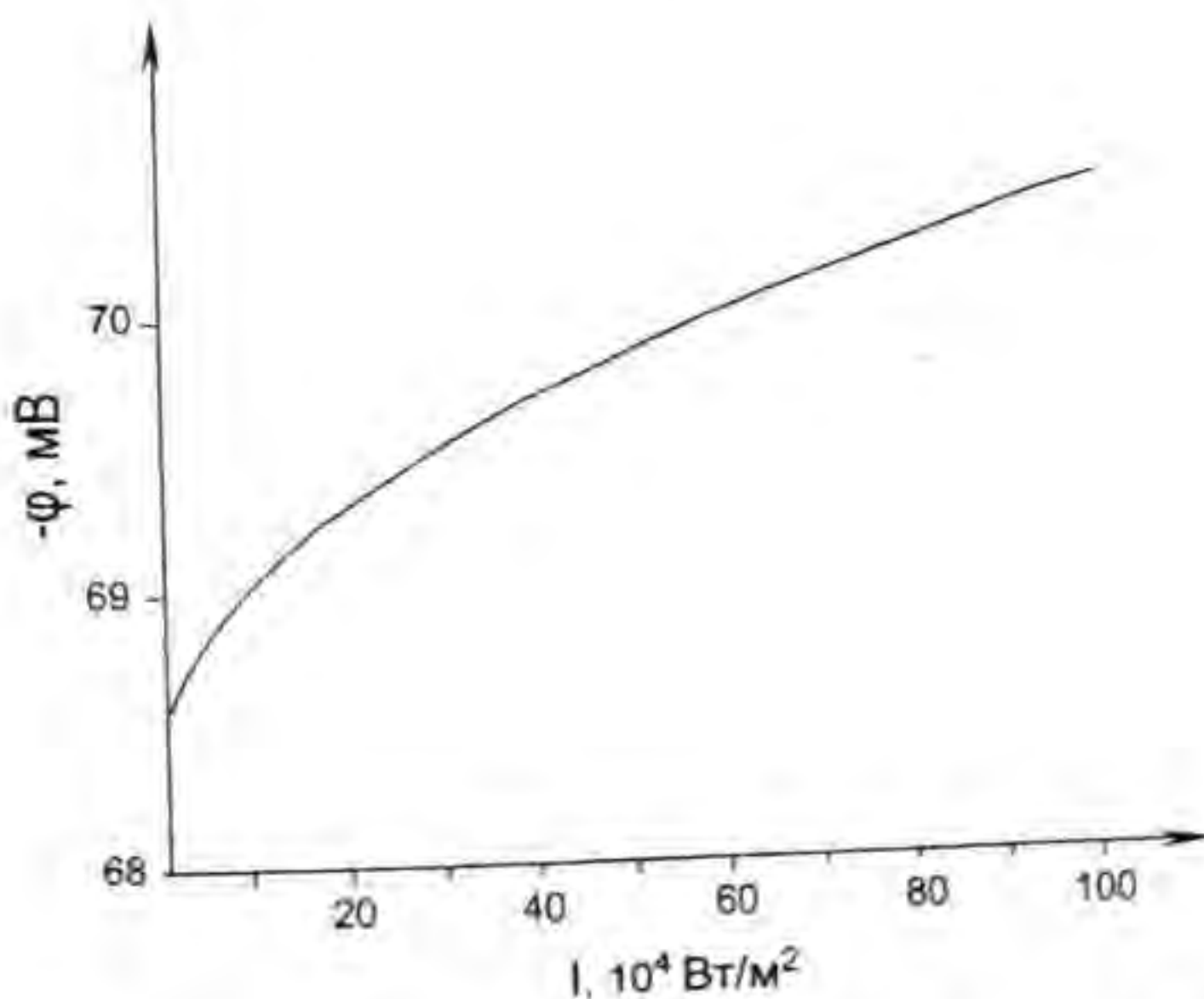


Рис. 1. Залежність мембранного потенціалу з урахуванням активного транспорту від інтенсивності ультразвуку

Таким чином, отримані теоретичні результати дають важливі як кількісні, так якісні оцінки впливу бародифузійних процесів на мембранні потенціали спокою. Зокрема, один з теоретичних висновків полягає в тому, що підвищення тиску, спричинене

дією ультразвукової хвилі, приводить до зростання мембранного потенціалу спокою. Слід зазначити, що експериментальним підтвердженням цього висновку є наведені в [4] дані щодо збільшення градієнту

концентрації на плазматичних мембранах клітин під дією ультразвуку.

3.ВИСНОВКИ

Теоретично встановлено, що збільшення тиску всередині клітини призводить до збільшення абсолютного значення мембранного потенціалу Томаса, створеного внаслідок активного транспорту іонів Na^+ і K^+ через мембрану. Чисельні розрахунки мембранного потенціалу Томаса з врахуванням активного транспорту іонів Na^+ і K^+ показали, що спостерігається: а) лінійна залежність цього мембранного потенціалу від перепаду тиску в інтервалі $\Delta p = (10^5 \div 1,8 \cdot 10^6)$ Па у відповідності до формули $\varphi_{act} \sim \Delta p$, б) степенева залежність мембранного потенціалу з показником, що дорівнює 0,5, від інтенсивності ультразвукової хвилі в інтервалі $I = (0,12 \div 100) \text{ Вт/см}^2$ у відповідності до формули $\varphi_{act} \sim \sqrt{I}$ (див. рис: 1).

Література

- [1] L. A. Bulavin, Yu. F. Zabashta, Ultrasonic Diagnostics in Medicine, Physical Foundations // Boston: VSP. - 2007., - 528p.
- [2] Haar ter G. Ultrasonics biophysics/ In: Hill C.R. ed. Physical principles of medical ultrasonics// Chchester: Ellis Harwood Limited, -1986,- P.378-435.
- [3] Nyborg W.L. Biological effects of ultrasound: development of safety guidelines. Part II: General review //Ultrasound Med. Biol. - 2001. - V. 27. -N 3.-P.301-333.
- [4] Rudenko O.V. Nonlinear methods in acoustic diagnostics. // Russian Journal of Nondestructive Testing. - 1993. - v.29. - №8., - P. 583-588.
- [5] O.B. Руденко Нелинейные волны: некоторые биомедицинские приложения // УФН, - Т.177, №4, -2007., - С.374-383.
- [6] Костюк П.Г., Зима В.Л., Магура И.С., Мірошніченко М.С., Шуба М.Ф. Біофізика.- К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2008. -567с.
- [7] Медична і біологічна фізика (за редакцією Чалого О.В.) - К., -2005, -760с.
- [8] Bruce Alberts, et al. Molecular Biology Of The Cell. — 5th ed. — New York: Garland Science, 2007., - 1616p.
- [9] Чалый О.В., Шліхта Г.В. Электричні мембранні потенціали спокою з урахуванням бародифузійних явищ// УФЖ. - 2007, - Т.52, №9 – С. 915-919.
- [10] Чалый А.В. Неравновесные процессы в физике и биологии - К.: Наукова думка, 1997. - 184с.
- [11] Самко С.П., Чалый О.В. Пассивний іонний транспорт крізь мембранні структури при наявності градієнта температур // Вісник Київського університету, серія фіз.-мат.науки. - 2000. - №1. - С.490-493.
- [12] В.Л. Зима Біофізика: Збірник задач- К.: - Вища школа., -2001., - 124с.
- [13] А.Б. Рубин Термодинамика биологических процессов// М.: Изд-во МГУ, - 1976. - 239 с.
- [14] Эльтнер И.Е. Биофизика ультразвука - М.: Наука, 1973, - 327с.

Надійшла до редколегії 09.03.10

УДК 535.34

Шайкевич І.А., д.ф.-м.н., проф.,
Ломакіна О.В., аспірант,
Мельниченко Л.Ю., к.ф.-м.н., ст.н.с.
Шибіко Я.А., інженер,

Спектральні залежності еліпсометричних параметрів тонких плівки перехідних металів при збудженні поверхневих поляритонів

Досліджені спектральні залежності еліпсометричних параметрів, а саме азимуту відновленої лінійної поляризації Ψ та зсуву фаз між p - та s -компонентами Δ відбитої світлової хвилі, при збудженні поверхневих поляритонів для тонких плівок перехідних металів Cr, Ni, Ti, Mo та Fe. Спектральні залежності розраховувались по формулам Ейрі. Плівки знаходились на скляних підкладках. Аналіз одержаних результатів показав, що для всіх досліджених плівок максимуми на кривих залежності величини $\lg \Psi$ від довжини світлової хвилі λ відповідають максимумам на кривих залежності оптичної провідності від довжини світлової хвилі, які викликані відповідними міжзонними переходами. Таким чином вимірювання спектральних залежностей еліпсометричних параметрів при збудженні поверхневих поляритонів в тонких плівках перехідних металів дають змогу вивчати міжзонні переходи в цих металах.

Ключові слова: тонкі плівки, поверхневі поляритони, еліпсометричні параметри, спектральні залежності.

*E-mail: shaykevi@univ.kiev.ua

Вступ. Оптичні сенсори для дослідження малих концентрацій молекулярних речовин, які працюють при збудженні поверхневих поляритонів на принципах вимірювання еліпсометричних параметрів, а саме зсуву фаз між p - та s -компонентами відбитої світлової хвилі Δ і азимуту відновленої лінійної поляризації Ψ , бувають двох типів. Перший тип заснований на вимірюванні еліпсометричних параметрів поблизу кута падіння світла, який відповідає поляритонному мінімуму кутової залежності величини $\lg \Psi$ при сталій довжині світлової хвилі λ . Другий тип заснований на вимірюванні

I.A. Shaykevich, prof.,
O.V. Lomakina, post grad. stud.,
L.Yu. Melnichenko, senior research.
Ya.A. Shybiko, engineer,

Spectral dependencies of ellipsometric parameters of transitional metals thin films at excitation of surface polaritons

Spectral dependencies of ellipsometric parameters as follows azimuth of the restored linear polarization Ψ and phase shift between p - and s -components Δ of the reflected light wave at excitation surface polaritons for thin film of transition metals Cr, Ni, Ti, Mo and Fe were investigated. Airy formulas were used at calculations of spectral dependencies. The films were on glass substrate. The obtained results show that all these transitional metals maximums on dependencies of the value $\lg \Psi$ on length of the light wave λ coincident with maxima on dependencies of the optical conductivity on length of the light wave, which is caused corresponding to interband transitions. So, measurements of the spectral dependencies of the ellipsometric parameters at excitation surface polaritons in thin films of transition metals enable to study of interband transitions in these metals.

Key Words: thin films, surface polaritons, ellipsometric parameters, spectral dependencies.

еліпсометричних параметрів при поляритонному мінімумі на спектральній залежності величини $\lg \Psi$ при сталому куті падіння світла. Звичайно в оптичних поляритонних сенсорах використовують тонкі плівки золота. Але плівки золота мають слабку адгезію до скляних і кварцевих підкладок, і тому такі сенсори не довговічні. Вони швидко виходять з ладу. Зате плівки золота слабо окислюються, що важливо для роботи сенсора. Плівки перехідних металів окислюються значно сильніше, але вони мають хорошу адгезію. Нами в [1] було запропоновано використовувати в оптичних сенсорах бішарові тонкі плівки. Першим шаром відносно підкладки є тонка плівка перехідного металу, а другим -

плівка золота, яка на плівці перехідного металу буде добре триматися. Такі сенсори повинні мати значно більший ресурс робочого часу. Тому виникла необхідність вивчити поляритонні властивості тонких плівок перехідних металів.

Методика експерименту.

Нами були досліджені спектральні залежності еліпсометричних параметрів при збудженні поверхневих поляритонів в тонких плівках наступних перехідних металів: Cr, Ni, Ti, Mo та Fe. Залежність еліпсометричних параметрів від довжини світлової хвилі, а саме $\text{tg}\Psi(\lambda)$ і $\cos\Delta(\lambda)$ (Ψ - азимут відновленої лінійної поляризації, а Δ - зсув фаз між р- та s-компонентами відбитої хвилі) для всіх вищезгаданих плівок перехідних металів розраховувалась по формулам Ейрі [2] при збудженні поверхневих поляритонів. Формули і програми розрахунків наведені в [3,4].

Оптичні сталі n (показник заломлення) і k (показник поглинання) для всіх досліджених перехідних металів були взяті із [5]. Підкладка для плівок була скляна з $n=1,52$. Найбільш доцільні товщини плівок, при яких відбувається максимальне збудження поверхневих поляритонів, були розраховані, як це показано в [3].

Експериментальні результати та їх аналіз.

На рис.1 наведена залежність величини $\text{tg}\Psi$ від довжини хвилі λ для тонкої плівки Cr товщиною $d=10$ нм, а на рис.2 залежність величини $\cos\Delta$ від λ . Ми проводили розрахунки для сталого кута падіння 42° . Згідно [6,7], а також нашим розрахункам [3], максимальне збудження поляритонів відбувається поблизу граничного кута повного внутрішнього відбивання для скляної підкладки, а кут 42° відповідає максимальній величині $\text{tg}\Psi$ і лежить саме поблизу граничного кута. Оскільки більш фізично змістовною при збудженні поверхневих поляритонів є залежність $\text{tg}\Psi$ від λ , то саме на її аналізі ми перш за все і зупинимось. На рис.1 добре видно смугу ($\lambda \sim 0,8-0,9$ мкм) з максимумом при енергії $E=1,4$ еВ. Згідно [8,9] для оптичної провідності хрому існує потужний максимум поблизу енергії квантів 2 еВ, тобто для $\lambda=600$ нм. Але в [9] відзначається, що цей максимум досить широкий і відповідає цілій серії міжзонних переходів. Він був розкладений в ряд смуг, одна з яких якраз і відповідає енергії $E=1,4$ еВ. Потужний максимум в ультрафіолетовій ділянці спектру на рис.1 теж

співпадає із залежністю уявної частини комплексної діелектричної сталої у [5] і оптичної провідності [8].

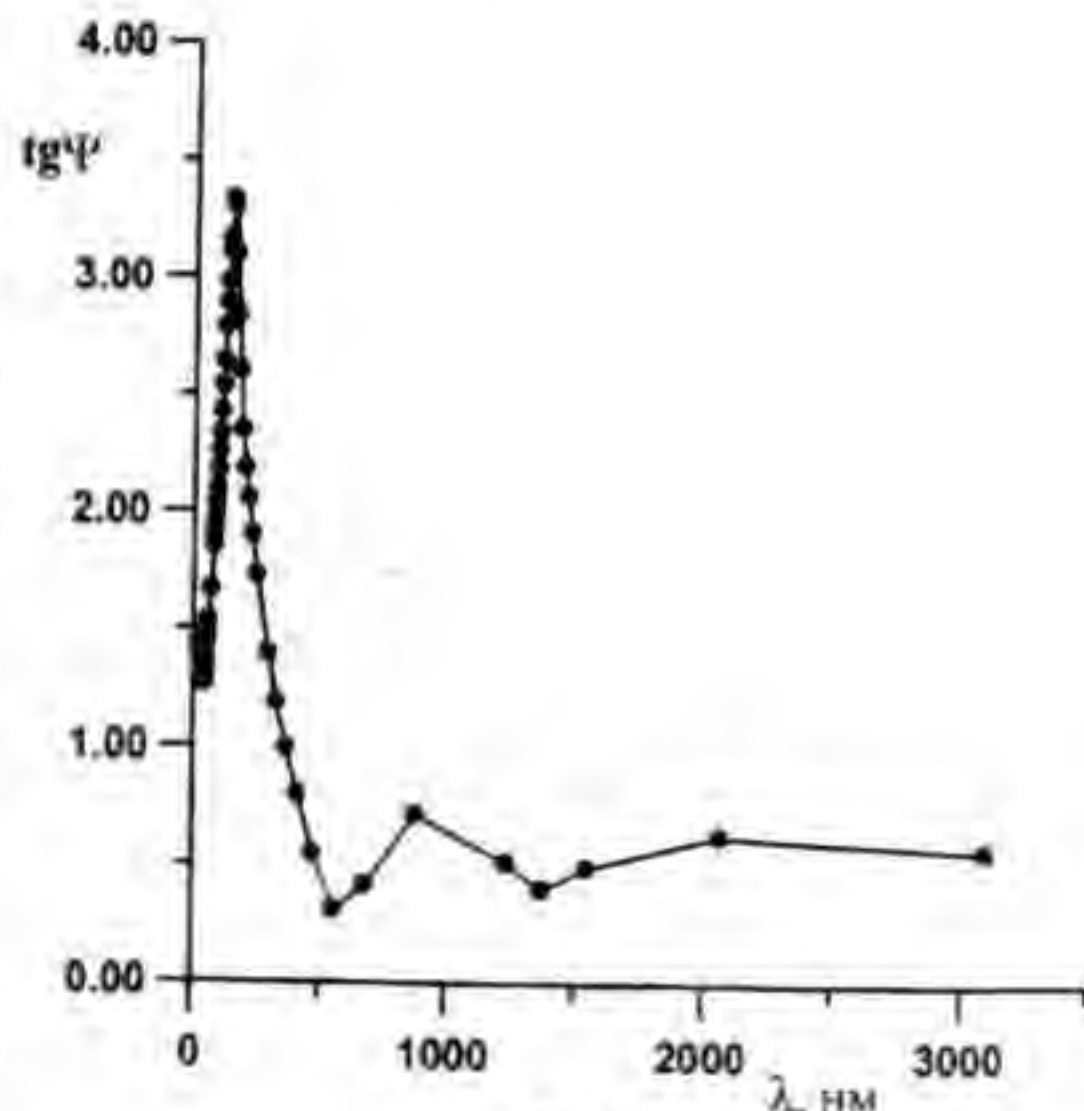


Рис. 1.

Подальше зростання λ в ІЧ ділянці спектра приводить до практично сталої величини $\text{tg}\Psi$. В цьому діапазоні відсутні міжзонні переходи, і поглинання обумовлене вільними електронами.

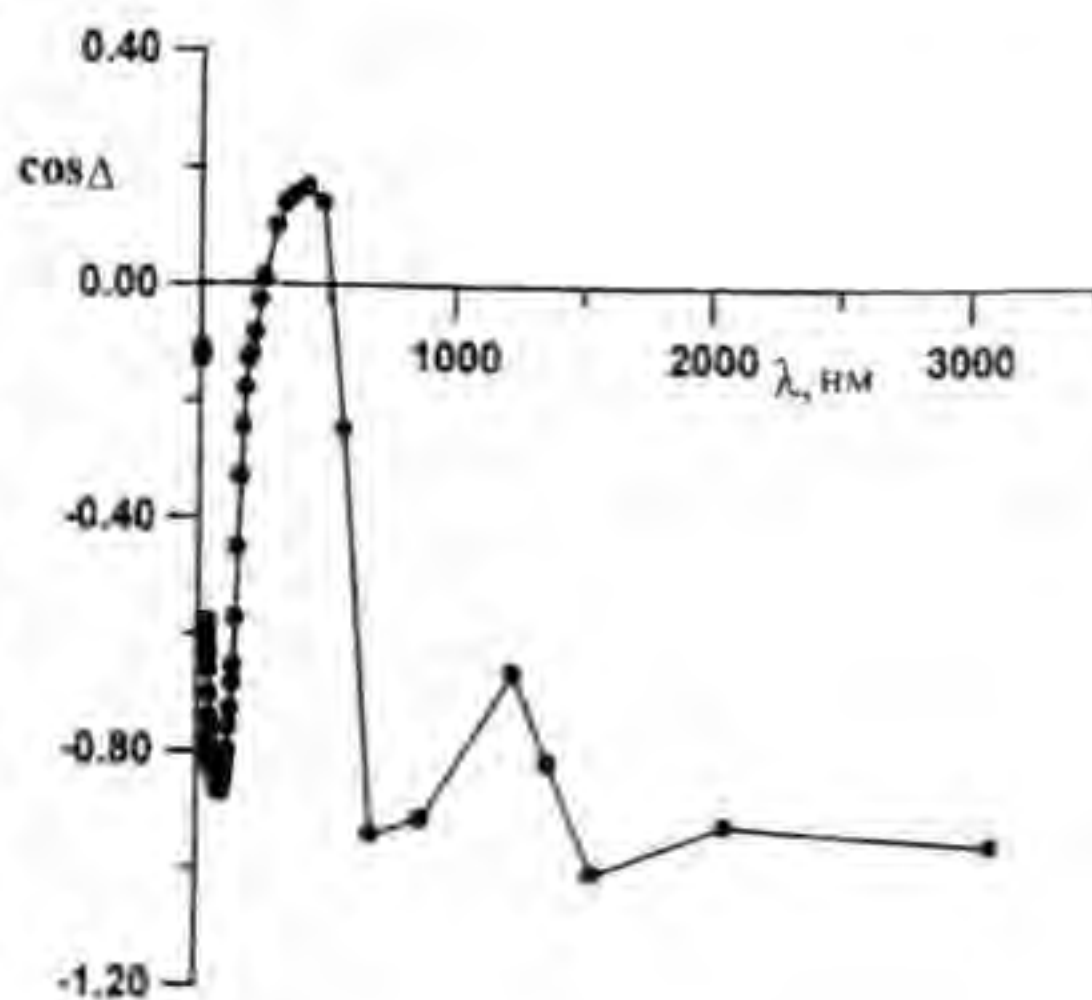


Рис. 2.

Аналогічний хід величини $\text{tg}\Psi$ від λ спостерігався і в [4] для плівок високопровідних металів в цьому діапазоні спектру. Смуга

квантового поглинання з максимумом поблизу енергії 2 еВ згідно [9] пояснюється міжзонними переходами поблизу X , M і R точках зони Брілюєна хрому. Згідно [10] ця смуга може бути пояснена переходами біля Γ точки зони Брілюєна хрому. Таким чином проведені нами експерименти показують, що величина $\text{tg}\Psi$ має гострий максимум в районі міжзонних переходів для хрому, і це вказує на те, що саме в районі потужних міжзонних переходів відбувається збудження поверхневих поляритонів. Аналогічне явище спостерігалось і для високопровідних металів [4].

Хід залежності $\cos\Delta$ від λ на рис.2. цікавий тим, що там, де величина $\text{tg}\Psi$ має максимум, величина $\cos\Delta$ навпаки має мінімум. Таким чином можна стверджувати, що спектральні залежності еліпсометричних параметрів для тонких плівок хрому при збудженні поверхневих поляритонів дають можливість спостерігати міжзонні переходи в цьому металі. Оскільки тонкі плівки хрому часто застосовуються в різних тонкоплівочних оптичних пристроях, зокрема ми пропонуємо їх застосовувати в бінарних тонкоплівочних поляритонних сенсорах, то останній висновок має суттєве значення при конструюванні таких сенсорів з підвищеною адгезією і довготривалістю в роботі.

На рис.3 наведено спектральну залежність величини $\text{tg}\Psi$ від довжини хвилі λ для тонкої плівки Ni товщиною в 15 нм, а на рис.4 спектральну залежність величини $\cos\Delta$ від λ для тієї ж плівки.

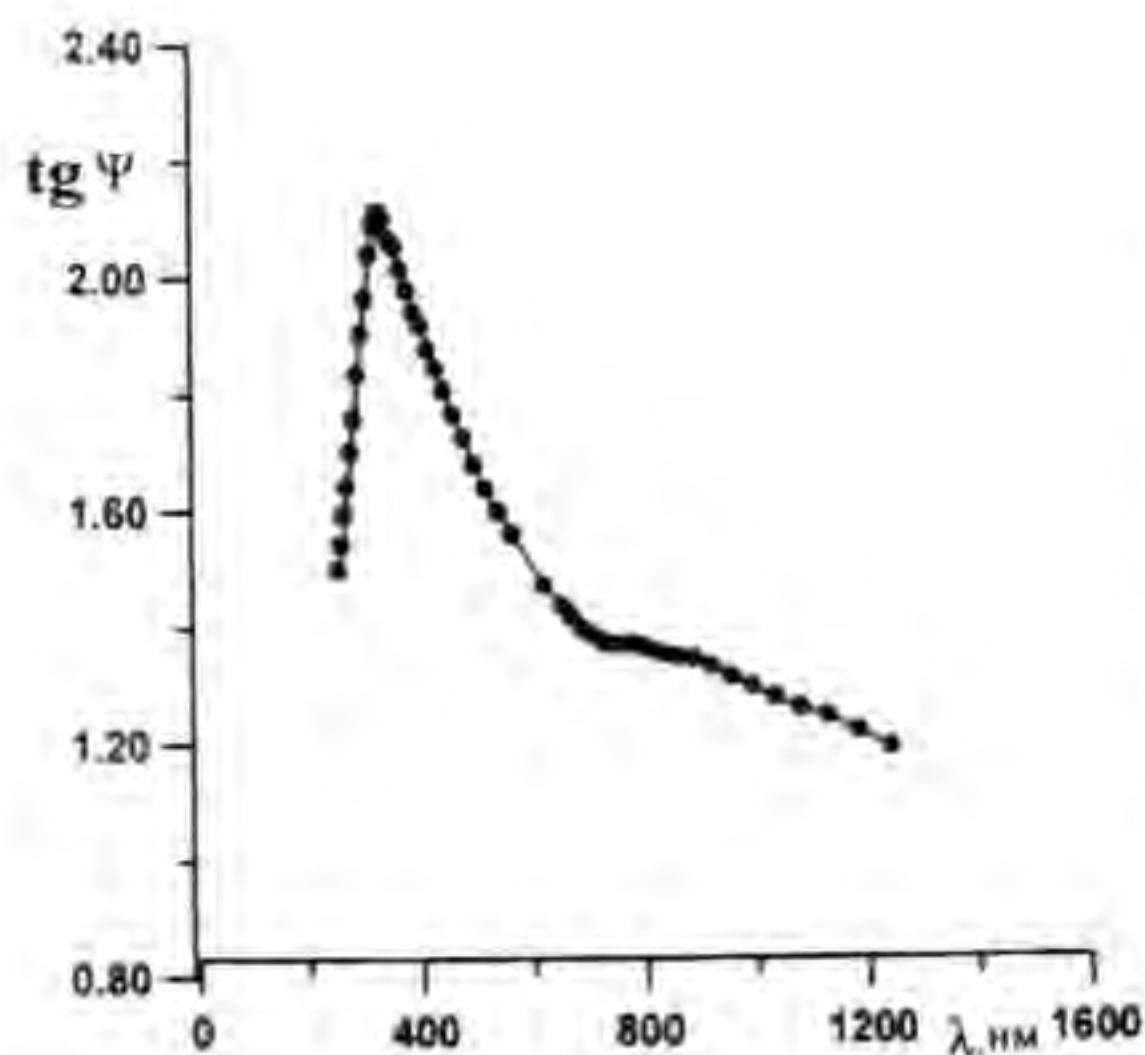


Рис. 3.

Як впливає з рис.3. крива залежності $\text{tg}\Psi$ від довжини хвилі λ має гострий максимум при $\lambda=326,3$ нм, тобто в ультрафіолетовій ділянці спектру. Ця довжина хвилі відповідає енергії квантів світла $E=3,8$ еВ.

Оптичні властивості масивного нікелю досліджувались в багатьох роботах [11-14]. І у всіх цих роботах спостерігалася потужна смуга квантового поглинання на спектральній кривій оптичної провідності, викликаного міжзонними переходами з максимумом оптичної провідності в районі енергії квантів 4,5-4,7 еВ. Але згідно [13] ця смуга досить широка і простягається до енергії квантів 3,5 еВ в довгохвильову ділянку спектру.

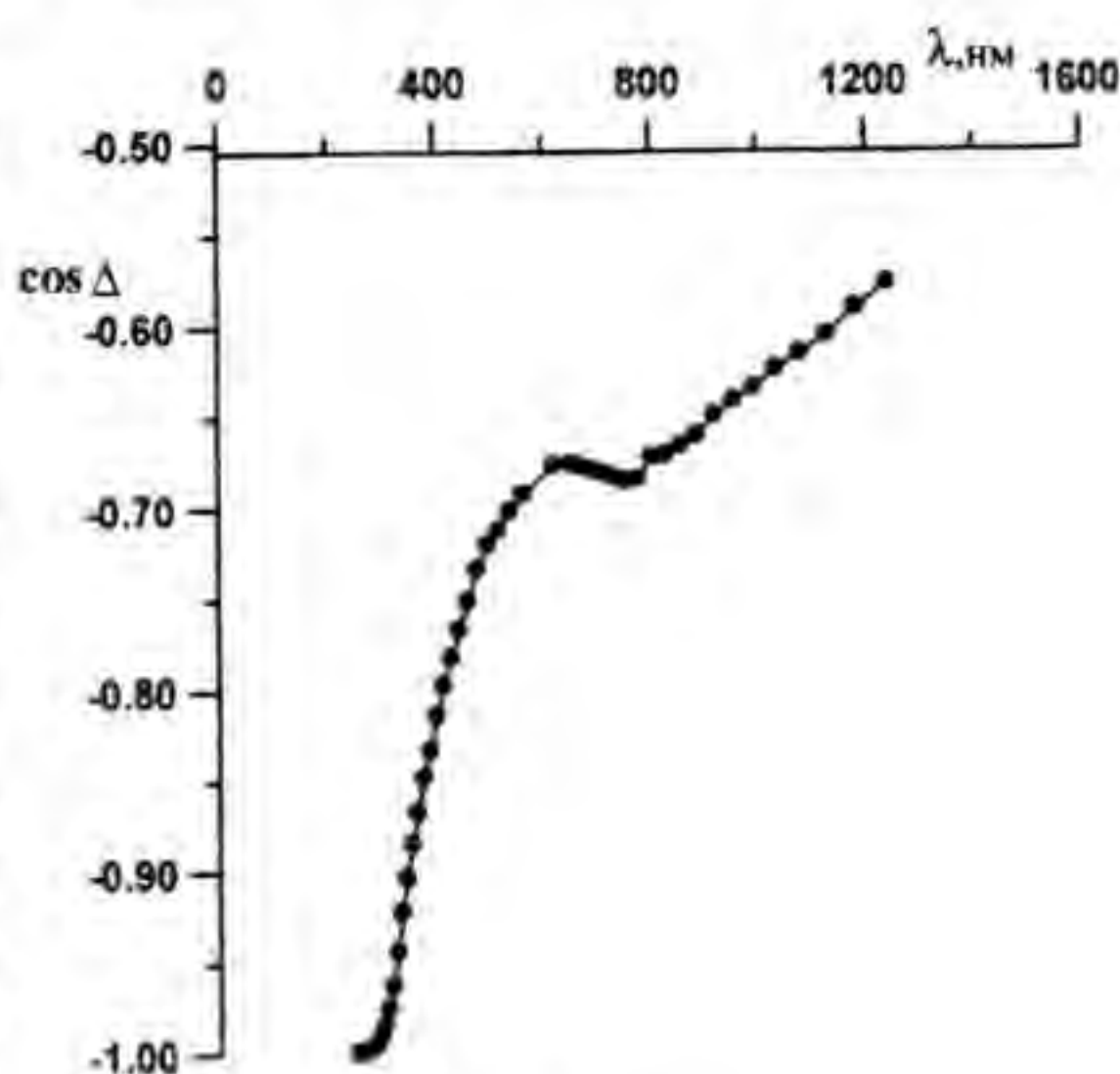


Рис. 4.

В роботі [15] поверхня масивного нікелю піддавалася бомбардуванню низькоенергетичними йонами аргону у вакуумі для очистки поверхні від шару окису і адсорбованих молекул. Згідно [15] на спектральній кривій оптичної провідності нікелю крім смуги з максимумом при енергії квантів поблизу 4,5 еВ з'являється ще один максимум якраз при енергії квантів світла 3,8 еВ. Оскільки добре відомо, що поверхневий шар окису і адсорбованих молекул приховує міжзонні переходи в металах, то очистка йонами аргону привела до проявлення замаскованого шаром окису та адсорбованих молекул нового максимуму квантового поглинання, викликаного міжзонними переходами в нікелі.

В [5] спостерігалася широка смуга квантового поглинання для уявної частини комплексної діелектричної сталої, починаючи з енергії квантів $E \sim 3,6$ еВ. Тобто смуга, яка спостерігається нами, на кривій залежності $\text{tg}\Psi$ від довжини хвилі λ явно попадає в цей інтервал енергій. Як і у випадку хрому мінімум на кривій залежності $\cos\Delta$ від λ співпадає з максимумом величини $\text{tg}\Psi$ на спектральних кривих. Таким чином можна зробити висновок, що спектральна залежність величини $\text{tg}\Psi$ для тонкої плівки нікелю при збудженні поверхневих поляритонів дозволяє виявити міжзонні переходи в нікелі, але ці міжзонні переходи відповідають довгохвильовій межі поглинання. Аналогічне явище ми спостерігали вище і для тонких плівок хрому. Згідно [15] високоенергетичні переходи фундаментальної смуги поглинання в нікелі зумовлені переходами поблизу центра Σ_0 k-простору і відповідають енергіям квантів 4,8-4,9 еВ. З іншого боку там же відзначається, що можливі переходи поблизу X і L точок зони Брілюена, які мають меншу енергію. З нашої точки зору смуга, що спостерігається на спектральній кривій $\text{tg}\Psi$ від λ , відповідає саме переходам в цих точках, але в стани, що лежать майже на рівні Фермі з більш глибоких станів, а не на більш високі над рівнем Фермі стани.

На рис.5 наведено залежність величини $\text{tg}\Psi$ від довжини хвилі λ для тонкої плівки Ti товщиною в 20 нм, а на рис.6 залежність величини $\cos\Delta$ від λ .

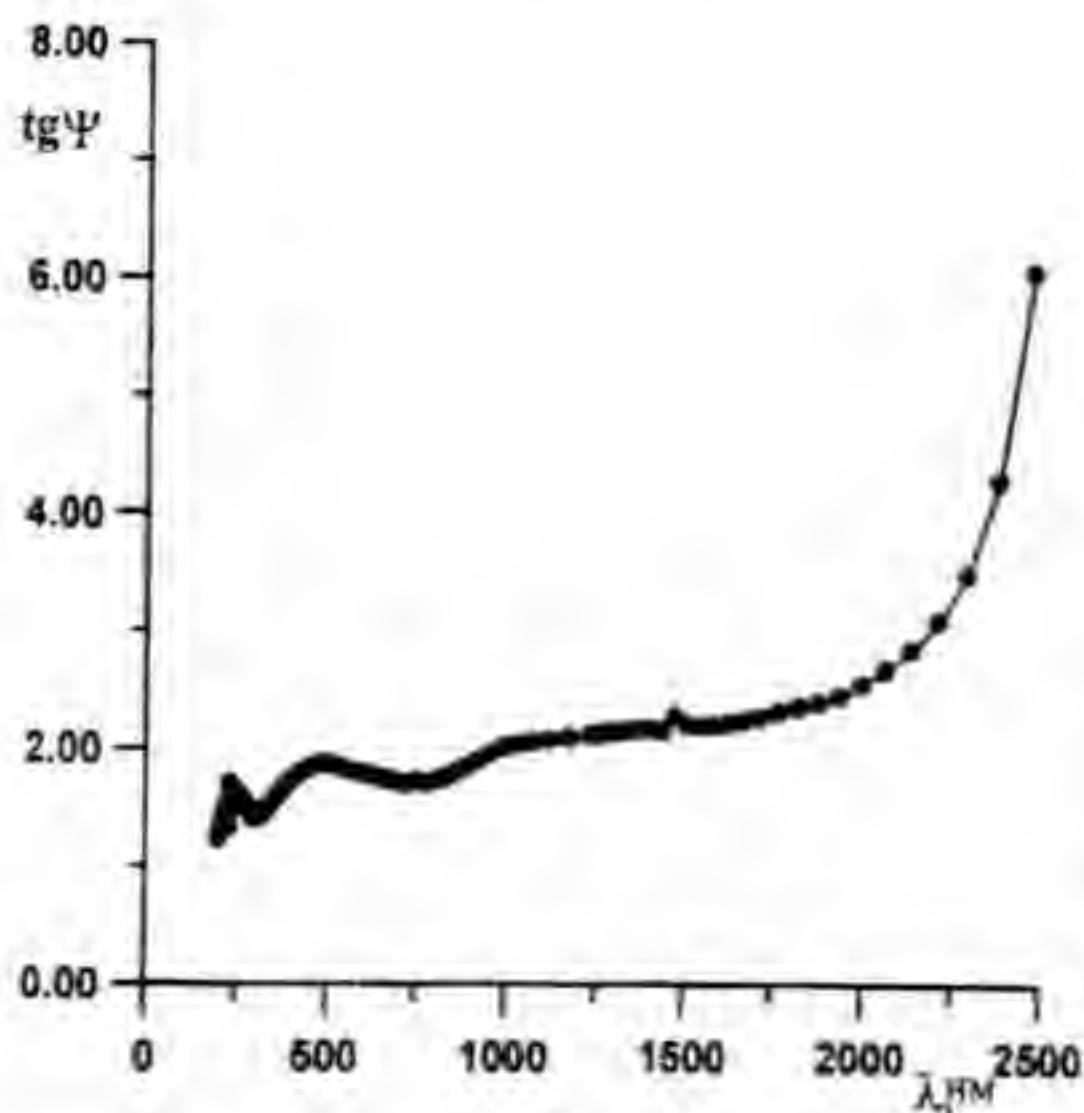


Рис. 5.

Як впливає з рис.5 на спектральній кривій $\text{tg}\Psi$ має три максимуми, а саме широкий максимум в ближній інфрачервоній ділянці спектру з максимальним значенням $\text{tg}\Psi$ приблизно при $\lambda \sim 1,5$ мкм, максимум у видимій ділянці спектру при $\lambda \approx 500$ нм і максимум в ультрафіолеті при $\lambda \approx 250$ нм. В [8] наведено спектральну криву оптичної провідності титану. На ній мають місце два максимуми при енергії квантів світла трохи більше 2 еВ, тобто при $\lambda \approx 500$ нм і при енергії квантів порядку 1 еВ, тобто при $\lambda \approx 1,24$ мкм.

Максимум при $\lambda \approx 250$ нм на рис.5 попадає в широкий спектр поглинання і оптичної провідності в діапазоні до 6 еВ, наведених в [5,8]. В [8] в спектрі не проявляється ніяких максимумів в діапазоні $\lambda \sim 250$ нм, але в [5] такий максимум є для ϵ_2 уявної частини комплексної діелектричної сталої Ti.

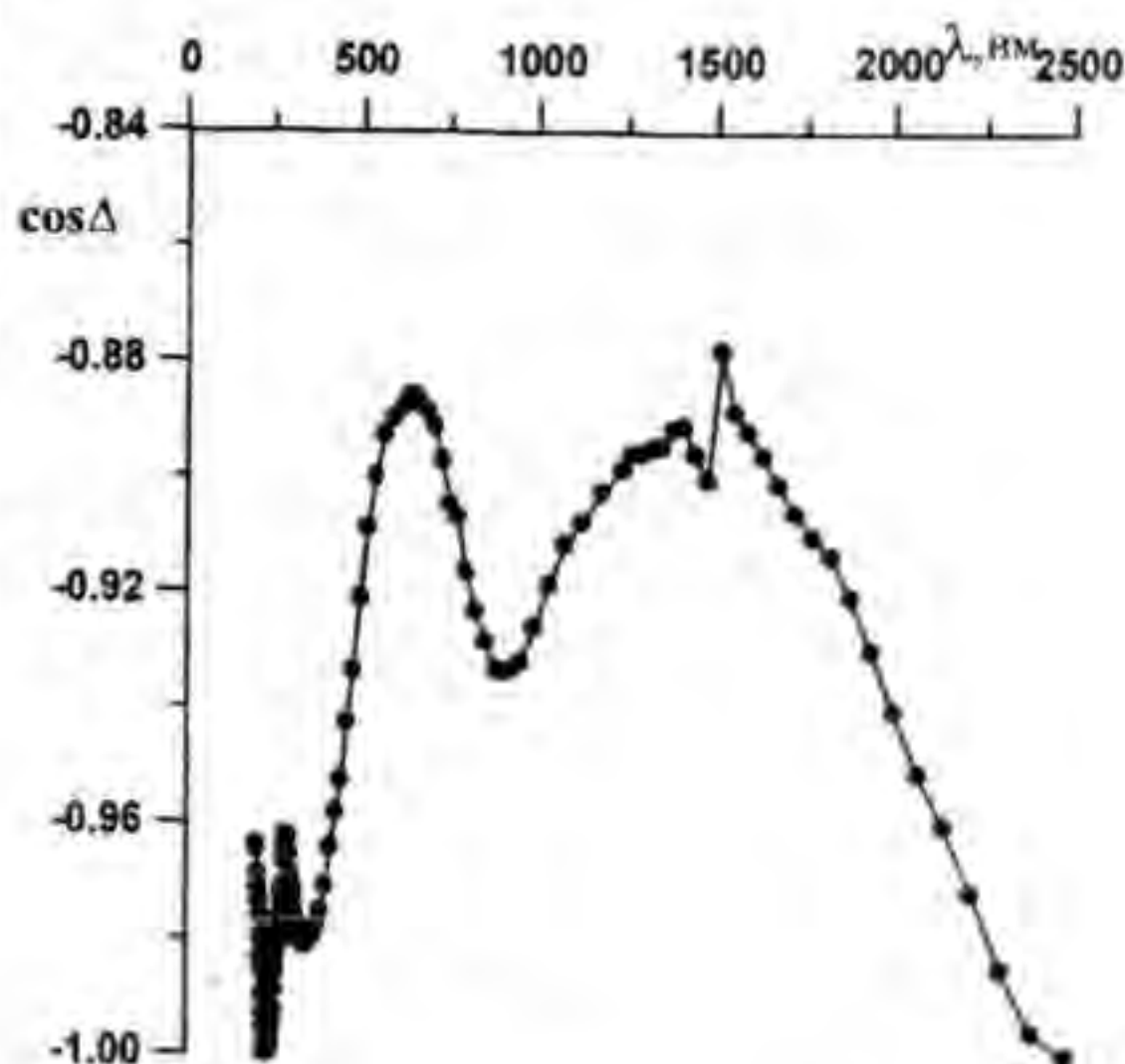


Рис. 6.

Згідно [10] максимум при $\lambda \approx 500$ нм на рис.5 може бути пояснено переходами в K точці зони Брілюена із стану K_3 , який лежить нижче рівня Фермі, в стан K_3 , що лежить вище рівня Фермі. Максимум при $\lambda \approx 1,24$ мкм може бути пояснено двома типами міжзонних переходів, а саме в K точці зони Брілюена із стану K_6 , що лежить на рівні Фермі, в стан K_3 , що лежить вище рівня Фермі, а також в Γ точці зони Брілюена із рівня Фермі в один із станів Γ_3 . Отже і для тонких плівок Ti при збудженні поверхневих поляритонів максимуми на спектральній

залежності $\lg\Psi$ відповідають міжзонним переходам в титані.

На рис.7 зображено спектральну залежність величини $\lg\Psi$, а на рис.8 спектральну залежність величини $\cos\Delta$ для тонкої плівки молибдену товщиною $d=16$ нм при збудженні поверхневих поляритонів. Як випливає з рис.7 на спектральній кривій залежності $\lg\Psi$ від λ існує великий максимум при $\lambda\sim 900$ нм і ще декілька невеликих максимумів при $\lambda\sim 700$ нм, $\lambda\sim 500$ нм, $\lambda\sim 1,7$ мкм і нарешті частина смуги, початок якої лежить приблизно при $\lambda\sim 300$ нм, а сам максимум лежить десь в далекій ультрафіолетовій ділянці спектру.

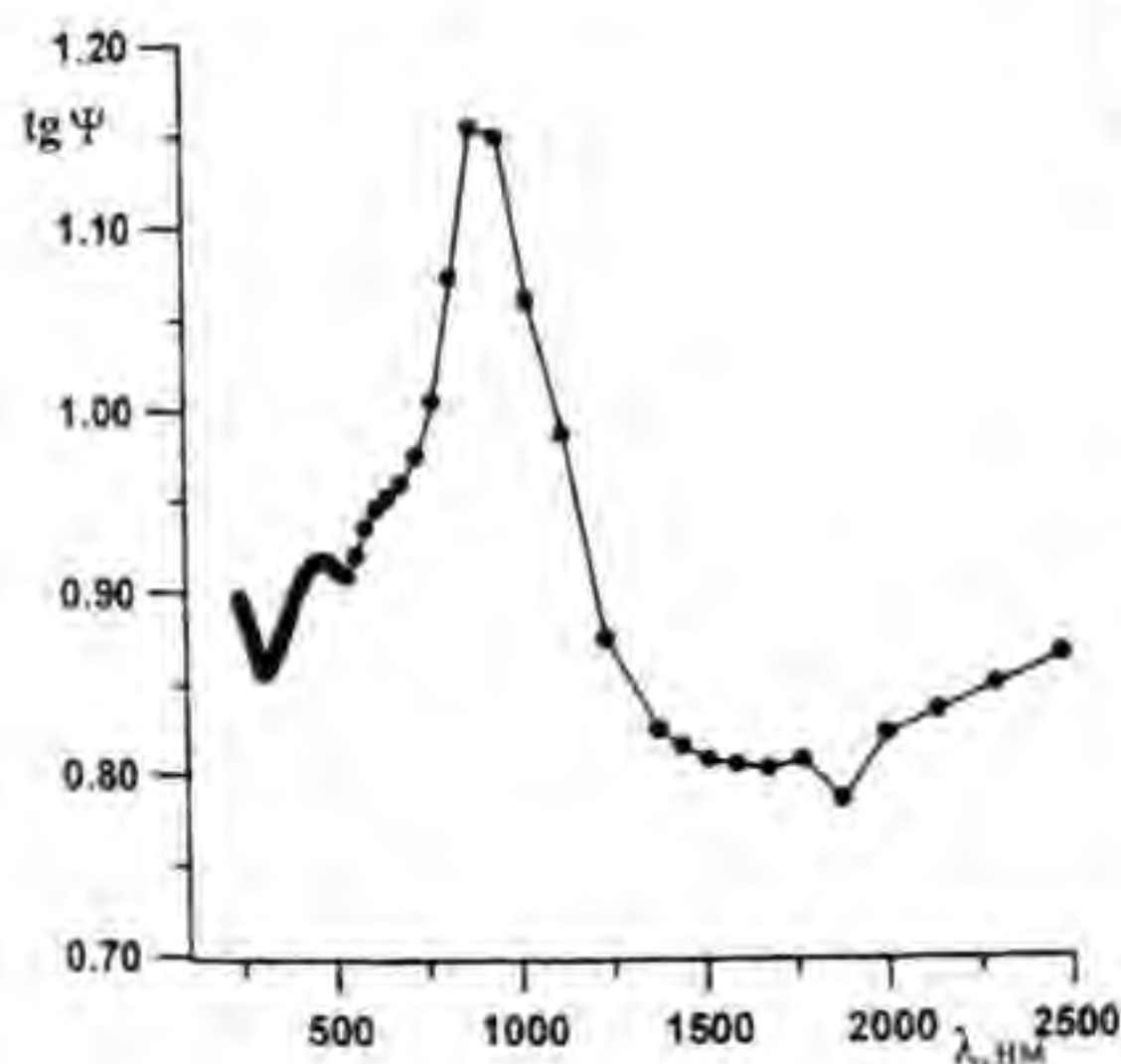


Рис. 7.

В роботі [8] наведено спектральну залежність оптичної провідності σ для молибдену. На цій залежності існує теж декілька максимумів. По-перше максимум поблизу енергії квантів $E\sim 4$ еВ, по-друге максимум при $E\sim 2,5$ еВ. Ще є максимум при $E\sim 1,5$ еВ і нарешті максимум при $E\sim 0,75$ еВ.

Тепер співставимо наші результати з тим, що наведено в роботі [8].

Максимум оптичної провідності при $E\sim 0,75$ еВ відповідає довжині хвилі $\lambda\sim 1,65$ мкм, що непогано узгоджується з максимумом на рис.7 при $\lambda\sim 1,7$ мкм.

Максимум на кривій оптичної провідності при $E\sim 1,5$ еВ можна співставити з максимумом на спектральній залежності величини $\lg\Psi$ на рис.7, що відповідає $\lambda\sim 900$ нм. І, нарешті, край смуги поглинання з максимумом, що лежить в далекій ультрафіолетовій ділянці спектру на

рис.7 з $\lambda\sim 300$ нм відповідає максимуму на кривій оптичної провідності $E\sim 4$ еВ. Це не можна вважати співпаданням, бо край смуги це не максимум. Тому для максимуму 4 еВ співпадання на кривій рис.7 необхідно вважати відсутнім. Зате для максимуму на спектральній кривій $\lg\Psi$ на рис.7 при $\lambda\sim 700$ нм співпадання є, хоча в [8] і немає відповідного аналога, зате він є в [5] для уявної частини ϵ_2 комплексної діелектричної сталої. Цей максимум відповідає $E=1,8$ еВ, що дає $\lambda=688,8$ нм. Як бачимо, співпадання цілком задовільне. Максимумам на рис.7 відповідають в основному мінімуми на рис.8. В роботі [16] максимум при $E\sim 0,75$ еВ пояснюється переходами поблизу точки N зони Брілюена із стану N_1' в стани, що лежать поблизу рівня Фермі.

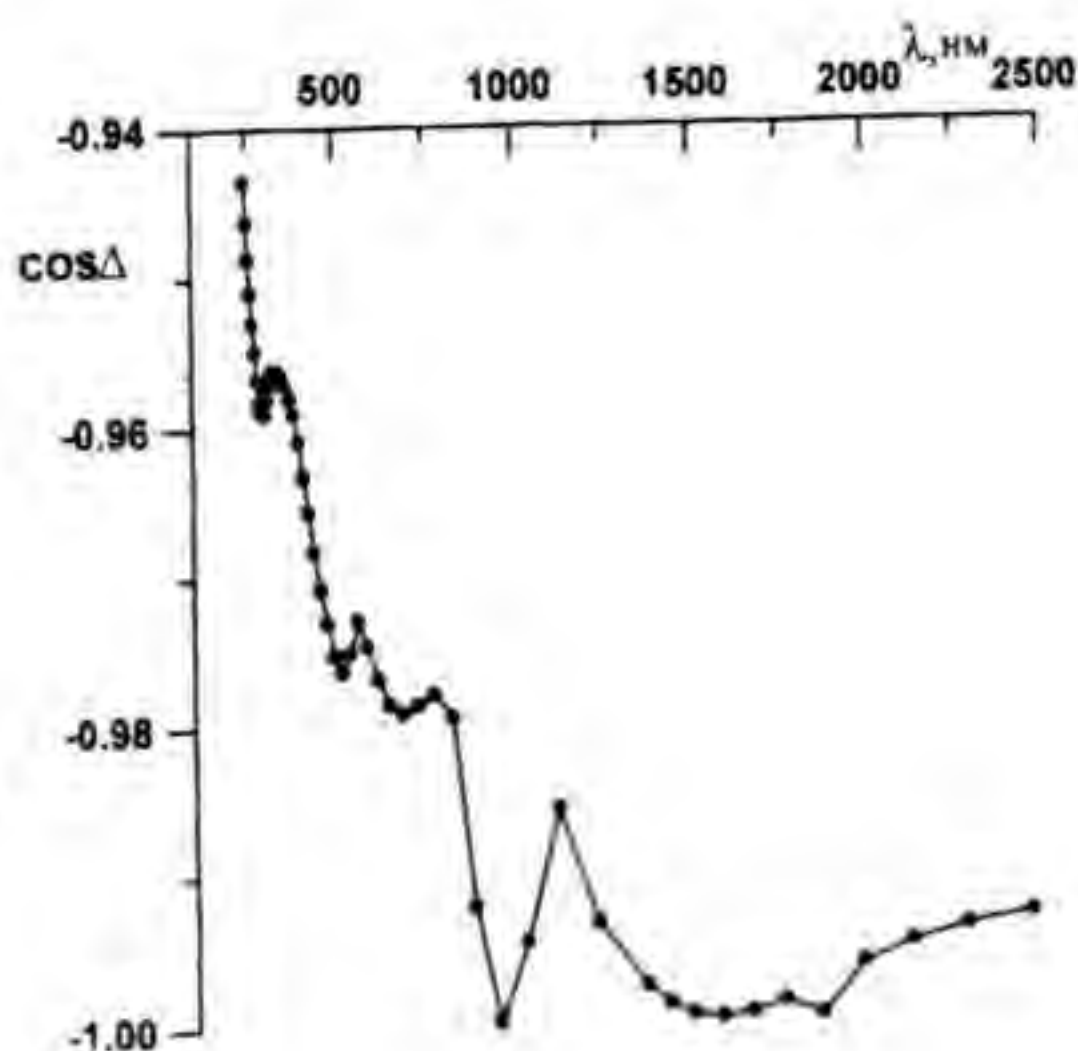


Рис. 8.

Таким чином можна зробити висновок, що для всіх максимумів на спектральній кривій оптичної провідності молибдену існують аналогічні максимуми на спектральній кривій $\lg\Psi$ при збудженні поверхневих поляритонів. Виключення складає лише максимум в ультрафіолетовій ділянці спектру для оптичної провідності σ при $E\sim 4$ еВ, хоча в [16] існує серія потужних максимумів в УФ ділянці спектру, і зростання $\lg\Psi$ в ділянці 400 нм-250 нм може бути пояснено даними [16].

Були проведені також дослідження еліпсометричних параметрів тонкої плівки заліза

в залежності від довжини світлової хвилі λ при збудженні поверхневих поляритонів. Товщина плівки складала $d=16,5$ нм. Саме при цій товщині спостерігався найглибший поляритонний мінімум при куті падіння $\varphi=65,3^\circ$. Залежності $\text{tg}\Psi$ від λ і $\cos\Delta$ від λ були одержані для цього кута падіння. На кривій залежності $\text{tg}\Psi$ від λ спостерігався потужний максимум при $\lambda\sim 200$ нм. Згідно [8,9] у заліза існує сильне квантове поглинання на спектральній кривій оптичної провідності при енергії світових квантів $E\sim 2$ еВ, що демонструється відповідною смугою поглинання. Але, на жаль, ця смуга попадає в глибокий поляритонний мінімум, який має місце на кривій залежності $\text{tg}\Psi$ від λ для Fe. Зате ультрафіолетова смуга на кривій $\text{tg}\Psi$ від λ співпадає з відповідними квантовими переходами в залізі [9].

Висновки. Для всіх досліджених плівок перехідних металів Cr, Ni, Ti, Mo та Fe максимумами величини $\text{tg}\Psi$ на спектральних кривих залежності $\text{tg}\Psi$ від λ при збудженні поверхневих поляритонів відповідають міжзонним переходам для цих металів. Як правило максимумам на спектральних кривих величини $\text{tg}\Psi$ відповідають мінімуми на спектральних кривих $\cos\Delta$. Одержані результати можуть бути використані в подальшому при конструюванні бінарних сенсорів малих молекулярних забруднень.

Список використаних джерел

1. Shihiko Ya., Shaykevich I., Melnichenko L. Two-layers thin film metal sensors on the basis of the measured ellipsometric parameters for small molecular contaminations/Abs. XVII International School-Seminar "Spectroscopy of molecules and crystals" Beregove, Crimea, Ukraine, 2005.- P.158.
2. Борн Е.М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970.- 855 с.
3. Шайкевич І.А., Мельниченко Л.Ю., Шибіко Я.А. Поляритонні властивості тонких металічних плівок//Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2005.-№2.-С.477-485.
4. Шайкевич І.А., Шибіко Я.А., Мельниченко Л.Ю., Пророк В.В. Спектральні залежності еліпсометричних параметрів

- тонких плівок високо провідних металів при збудженні поверхневих поляритонів.//Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки.-2007.-№2.- С.367-370.
5. Weaver J.H., Krafka C., Lynch D.W., Koch E.E. Optical properties of metals. I,II. – Internal Report D.E.S.J.F41., Hasylab, 81/01, 1981.-172 p., 256 p.
6. Поверхностные поляритоны (Под ред. В.М. Аграновича и Д.Л. Милса) М.Наука, 1985.- 525 с.
7. Дмитрук Н.Л., Литовченко В.Г., Стрижевский В.Л. Поверхностные поляритоны в полупроводниках и диэлектриках./Киев. Наукова думка. 1989.- 375 с.
8. Носков М.М. Оптические и магнитооптические свойства металлов. Свердловск; ИИЦ АН СССР.- 1983.-219 с.
9. Поперенко Л.В., Стайчук В.С., Шайкевич І.А., Одарич В.А. Діагностика поверхні поляризованим світлом / Монографія. -К.: ВПЦ «Київський університет». 2007.- 336 с.
10. Харрисон Дж. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972.-616 с.
11. Кириллова М.М. О междуполосных переходах в никеле.//ЖЭТФ.- 1971.- Т.61,№7.-С.336-344.
12. Номерованная Л.В., Кириллова М.М., Макеев А.А. Температурная зависимость оптических свойств ферромагнитных Ni и Ni-5%С.// ФММ.- 1981.- Т.52, вып.6.- С.1215-1224.
13. Сасовская И.И., Носков М.М. Оптические свойства никеля.// ФММ.- 1971.- Т.32, вып.4.- С.723-727.
14. Поперенко Л.В., Шайкевич І.А. Об асимметрии фундаментальной полосы поглощения никеля в ближней ультрафиолетовой области спектра// ФММ.- 1982.- Т.53, вып.3.- С.505-509.
15. Какун С.И., Поперенко Л.В., Шайкевич І.А. Особенности оптического поглощения бомбардированной низкоэнергетическими пучками аргона поверхности ферромагнитного никеля. // ФММ.- 1985.- Т.60, вып.3.- С.480-487.
16. Кириллова М.М., Болотин Г.А., Маекский В.М. Междуполосные переходы в молибдене.// ФММ.- 1967.- Т.24, вып.1.- С.95-101.

Надійшла до редколегії 04.03.10 р.

Підп. до друку 18.06.2010.
Формат 70x100¹/₁₆. Папір офс.
Ум. друк. арк. 25,31. Наклад 350.
Зам. 226.

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

